Cálculo de las secciones transversales de extinción, absorción y esparcimiento de elipsoides en la aproximación cuasiestática como primera aproximación de eritrocitos

Dana Larissa Luna González

I. Introducción

El estudio de las propiedades ópticas de las células biológicas en particular, de los eritrocitos, es de gran importancia para el área médica, pues mediante éste, es posible obtener información de su composición y estado morfológico, lo cual tiene potenciales aplicaciones en el diagnóstico de enfermedades como la anemia en sus diferentes tipos y el diseño de nuevas terapias ópticas [1].

El objetivo de este trabajo es caracterizar la respuesta óptica de elipsoides de diferentes materiales (oro, plata, aluminio, bismuto y óxido de magnesio) y tamaños dentro de la nanoescala, por medio de las secciones transversales de esparcimiento, absorción y extinción, bajo la aproximación cuasi-estática como primera aproximación de eritrocitos. Este trabajo está dividido en tres partes: Introducción, Resultados y Conclusiones. En la primera parte se estudia la interacción entre luz y materia, en particular, una onda plana iluminando una nanopartícula

I. Aproximación cuasiestática

Los campos electromagnéticos presentan diferentes propiedades propiedades según la región en la que se encuentren. Al considerar las dimensiones de la fuente del orden d y la longitud de onda $\lambda = 2\pi c/\omega$, entonces hay tres regiones de interés: la región cercana (estática) en donde $d \ll r \ll \lambda$, que se estudiará en la siguiente sección, la región intermedia en donde $d \ll r \sim \lambda$, y la región lejana (de radiación) donde $d \ll \lambda \ll r$ [6].

I.1. Dipolo eléctrico (caso estático)

En electrodinámica clásica, se entiende como *límite cuasiestático* el considerar una partícula de tamaño mucho menor que la longitud de onda de la luz incidente [2]. En el caso de un elipsoide caracterizado por una función dieléctrica ϵ_p, que se encuentra inmerso en un medio caracterizado por una función dieléctrica ϵ_m y cuyo semieje mayor es a, se puede definir el límite cuasiestático cuando el parámetro de tamaño $x = ka$ es mucho menor que la unidad [4], donde $k = 2\pi\sqrt{\epsilon_m}/\lambda$. Esta aproximación garantiza que toda la geometría del elipsoide esté sujeta a un campo eléctrico de la misma intensidad y dirección [3].

En la aproximación cuasiestática, es posible analizar a la partícula mediante la aproximación dipolar, al considerar a las cargas que conforman un dipolo eléctrico embebidas en un medio homogéneo e infinito caracterizado por su función dieléctrica ϵ_m. Con esta aproximación, se obtiene el potencial eléctrico para un dipolo puntual [5]:

$$\phi = \frac{p}{4\pi\epsilon_m}\left(\frac{\vec{r}\cdot\hat{e}_z}{r^3}\right) = \frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{4\pi\epsilon_m r^3} = \frac{p\cos\theta}{4\pi\epsilon_m r^2} \tag{1}$$

donde $\vec{p}$ representa el momento dipolar eléctrico. Si se considera una esfera con permitividad eléctrica ϵ_p, embebida en el mismo medio caracterizado por su función dieléctrica ϵ_m en el cual existe un campo eléctrico uniforme $\vec{E}_0 = E_0\hat{e}_z$, al resolver la ecuación de Laplace considerando las condiciones de frontera entre la esfera y el medio, se obtiene que el campo eléctrico fuera de la esfera es la superposición del campo eléctrico aplicado y del campo eléctrico producido por un dipolo eléctrico puntual localizado en el origen con momento dipolar [4]:

$$\vec{p} = \epsilon_m\alpha\vec{E}_0 = 4\pi\epsilon_m a^3\frac{\epsilon_1 - \epsilon_m}{\epsilon_1 + 2\epsilon_m}\vec{E}_0, \tag{2}$$

donde $\alpha = 4\pi a^3(\epsilon_1 - \epsilon_m)/(\epsilon_1 + 2\epsilon_m)$ es la polarizabilidad eléctrica, que representa la facilidad con la que se polariza la esfera. Es decir, el campo eléctrico induce un dipolo eléctrico en la esfera.

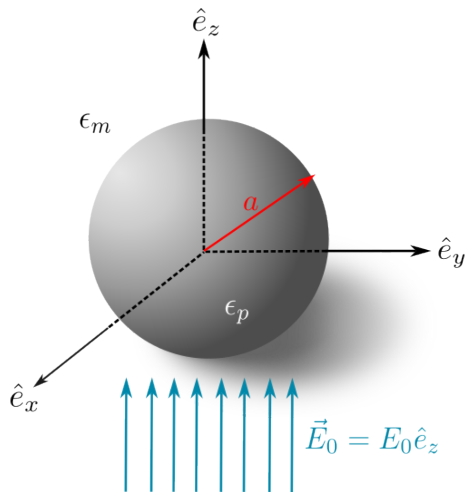

Fig. 1: Esfera de radio r caracterizada por su función dieléctrica ϵ_p y embebida en un medio caracterizado por su función dieléctrica ϵ en la cual incide un campo eléctrico uniforme $\vec{E}_0$.

I.2. Dipolo eléctrico (caso dinámico)

El potencial de la sección anterior considera que las cargas se encuentran fijas en el espacio y están sometidas a un campo eléctrico homogéneo. Este potencial correspondería al de una partícula elipsoidal con una polarización $\vec{p}$ a determinar, en presencia de un campo eléctrico homogéneo alineado en la dirección $\hat{e}_z$. El siguiente escenario a considerar es de las cargas localizadas en un volumen finito moviéndose en presencia de un campo eléctrico dinámico. Una forma de solucionar este problema es considerar que el movimiento de los campos, y por lo tanto de las cargas y corrientes, es armónico; lo cual es equivalente a realizar un análisis en componentes de Fourier. De esta forma, no se pierde generalidad de considerar a los potenciales y campos de un sistema de cargas y corrientes localizadas en el espacio vacío, con una dependencia armónica variando en el tiempo y que oscilan a la frecuencia ω del campo electromagnético aplicado [6]

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r},t) &= \rho(\vec{r})e^{-i\omega t}, \\ \vec{J}(\vec{r},t) &= \vec{J}(\vec{r})e^{-i\omega t}, \end{aligned} \tag{3}$$

considerando que el significado físico lo posee la parte real. Mediante lo anterior, es posible determinar los campos electromagnéticos mediante el potencial vectorial como [6]:

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \frac{\mu_0}{4\pi}\int \mathrm{d}^3r' \frac{\vec{J}(\vec{r'})e^{i\omega\frac{|\vec{r}-\vec{r'}|}{c}}}{|\vec{r}-\vec{r'}|}e^{-i\omega t},$$

en donde se emplea la norma de Lorentz [5] y la densidad de corriente se evalúa en el tiempo de retardo $t_r = t - |\vec{r} - \vec{r'}|/c$. Al definir $k = \omega/c$ y obviando la dependencia temporal

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \frac{\mu_0}{4\pi}\int \vec{J}(\vec{r'})\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r'}|}}{|\vec{r}-\vec{r'}|}\mathrm{d}^3r'. \tag{4}$$

En la región de campo cercano, donde $r \ll \lambda$ (o $kr \ll 1$), $\exp(ik|\vec{r}-\vec{r'}|) \to 1$, se tiene [6]

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \frac{\mu_0}{4\pi}\int \frac{\vec{J}(\vec{r'})}{|\vec{r}-\vec{r'}|}\mathrm{d}^3r',$$

mientras que en la región de campo lejano ($kr \gg 1$) dado que la exponencial oscila rápidamente, es suficiente aproximar

$$|\vec{r} - \vec{r'}| \simeq r - \hat{e}_r \cdot \vec{r'}, \tag{5}$$

con $\hat{e}_r$ un vector unitario en la dirección de $\vec{r}$. [1] Si sólo se consideran los términos que decaen como r^{-1}, el inverso de la distancia en la Ec. (4) puede ser reemplazado por r. Entonces, el potencial vectorial es

$$\lim_{kr\to\infty} \vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\int \vec{J}(\vec{r'})e^{-ik\hat{e}_r\cdot\vec{r'}}\mathrm{d}^3r',$$

que se puede reescribir al realizar la expansión en serie de potencias de la exponencial dentro de la integral de volumen, dando como resultado

$$\lim_{kr\to\infty} \vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\sum_n \frac{(-ik)^n}{n!}\int \vec{J}(\vec{r'})(\hat{e}_r\cdot\vec{r'})^n\mathrm{d}^3r'.$$

Al considerar únicamente el primer término de la expansión, se concluye que

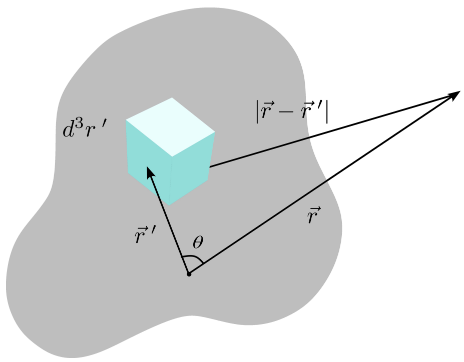

Fig. 2: Vector de posición $\vec{r}$ del volumen y $\vec{r'}$. Se muestra la distancia $|\vec{r} - \vec{r'}|$ entre estos últimos.

$$\vec{A}(\vec{r}) \approx \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\int \vec{J}(\vec{r'})\mathrm{d}^3r', \tag{6}$$

que al realizar una integración por partes, [2] se obtiene que

$$\int \vec{J}d^3r' = -\int \vec{r'}(\nabla'\cdot\vec{J})\mathrm{d}^3r' = -i\omega\int \vec{r'}\rho(\vec{r'})\mathrm{d}^3r', \tag{7}$$

donde se emplea

$$\nabla\cdot\vec{J} = -\frac{\partial\rho}{\partial t} = i\omega\rho(\vec{r}).$$

Al sustituir la Ec. (7) en la Ec. (6) y considerando que el momento dipolar eléctrico $\vec{p}$ de una distribución de cargas ρ es

$$\vec{p} = \int \vec{r'}\rho(\vec{r'})\mathrm{d}^3r',$$

se obtiene

$$\vec{A}(\vec{r}) = -\frac{i\omega\mu_0}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\int \vec{r'}\rho(\vec{r'})\mathrm{d}^3r' = -\frac{i\omega\mu_0}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\vec{p}. \tag{8}$$

[1] Empleando la ley de cosenos y haciendo una expansión binomial $|\vec{r} - \vec{r'}| = \sqrt{r^2 + (r')^2 - 2rr'\cos\theta} = r\sqrt{1 + (r'/r)^2 - 2\left((r'/r)\cos\theta\right)} \simeq r\left\{1 - (\hat{e}_r\cdot\vec{r'}/r) + 1/2\,(r'/r)^2\right\} \simeq r - \hat{e}_r\cdot\vec{r'}$.

[2] Al considerar $\int_V \vec{r'}(\nabla'\cdot\vec{J})\mathrm{d}^3r' = \int_{\partial V}\vec{r'}(\vec{J}\cdot\mathrm{d}\vec{S}) - \int_V \vec{J}\mathrm{d}^3r'$ y asumiendo que $\vec{J}$ se desvanece en los límites del volumen V, es decir, en la superficie ∂V.

Al calcular el campo $\vec{H}$ como función del potencial vectorial, y empleando la ley de Faraday-Lenz para determinar el campo eléctrico, se concluye que [6]

$$\vec{E} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\left\{k^2(\hat{e}_r \times \vec{p}) \times \hat{e}_r \frac{e^{ikr}}{r} + [3\hat{e}_r(\hat{e}_r \cdot \vec{p}) - \vec{p}]\left(\frac{1}{r^3} - \frac{ik}{r^2}\right)e^{ikr}\right\}, \tag{9}$$

$$\vec{H} = \frac{ck^2}{4\pi}(\hat{e}_r \times \vec{p})\frac{e^{ikr}}{r}\left(1 - \frac{1}{ikr}\right). \tag{10}$$

Obsérvese que el campo $\vec{H}$ es transversal al vector radial para cualquier distancia, mientras el campo eléctrico tiene componentes paralelas y perpendiculares a $\hat{e}_r$.

Con base en la Ec. (8), en la zona de radiación cuando $kr \gg 1$, se tiene que al iluminar el sistema con una onda plana armónica en el tiempo y de frecuencia angular ω se induce un dipolo eléctrico p que genera campos electromagnéticos $\vec{E}_p$ y $\vec{H}_p$ que oscilan a la misma frecuencia ω

$$\vec{E}_p = \frac{e^{ikr}}{-ikr}\frac{ik^3}{4\pi\epsilon_m}\hat{e}_r \times (\hat{e}_r \times \vec{p})e^{i\omega t}, \qquad \vec{H}_p = \frac{ck^2}{4\pi}(\hat{e}_r \times \vec{p})\frac{e^{ikr}}{r}e^{i\omega t}. \tag{11}$$

Si de manera similar a la Ec. (2), se considera un campo eléctrico oscilante polarizado en la dirección $\hat{e}_x$, que induce un dipolo eléctrico con momento dipolar $\vec{p} = \epsilon_m \alpha E_0 e^{-i\omega t}\hat{e}_x$, se pueden reescribir a los campos generados por el dipolo inducido mediante el vector de amplitud de esparcimiento

$$\vec{X} = \frac{ik^3}{4\pi}\alpha\hat{e}_r \times (\hat{e}_r \times \hat{e}_x), \tag{12}$$

como

$$\vec{E}_p = \frac{e^{ik(r-z)}}{-ikr}\vec{X}E, \qquad \vec{H}_p = \frac{k}{\omega\mu}\hat{e}_r \times \vec{E}_s. \tag{13}$$

donde $E = E_0 e^{ikz}$ y la polarización en la base de vectores esféricos es $\vec{p} = \epsilon_m \alpha E_0 e^{-i\omega t}(\sin\theta\cos\phi\hat{e}_r + \cos\theta\cos\phi\hat{e}_\theta - \sin\phi\,\hat{e}_\phi)$. [3]

II. Secciones transversales

En las secciones anteriores se consideró a la partícula como una distribución de cargas localizadas en un volumen finito, sometidas a un campo eléctrico estático y a uno dinámico. En esta sección, es de interés analizar el punto de vista macroscópico al considerar a la partícula embebida en un medio no absorbente e iluminada por una onda plana armónica en el tiempo. Teniendo en cuenta lo anterior, la energía W_{abs}, transportada por los campos electromagnéticos y que es absorbida por la partícula, se calcula al integrar el promedio temporal del vector de Poynting $\langle\vec{S}\rangle_t$ [4] sobre una esfera concéntrica a la partícula y de radio r mayor al de la partícula [Fig. 3], es decir,

$$W_{abs} = -\int_A \langle\vec{S}\rangle_t \cdot \hat{e}_r \text{ dA}.$$

Dado que el vector de Poynting en cualquier punto en el medio que rodea a la partícula se puede considerar como la suma de los términos $\langle\vec{S^i}\rangle_t, \langle\vec{S^s}\rangle_t$ y $\langle\vec{S^{ext}}\rangle_t$ [4] asociados al campo incidente, al campo esparcido y a la interacción entre los dos anteriores, respectivamente, [5] se tiene que $W_{abs} = W_i - W_s + W_{ext}$, donde [4]

$$W_i = -\int_A \langle\vec{S^i}\rangle_t \cdot \hat{e}_r \text{ dA}, \qquad W_s = \int_A \langle\vec{S^s}\rangle_t \cdot \hat{e}_r \text{ dA}, \qquad W_{ext} = -\int_A \langle\vec{S^{ext}}\rangle_t \cdot \hat{e}_r \text{ dA}. \tag{14}$$

[3] Es decir, $\hat{e}_r \times (\hat{e}_r \times \hat{e}_x) = -\cos\theta\cos\phi\hat{e}_\theta + \sin\phi\hat{e}_\phi$.

[4] El promedio temporal del vector de Poynting es $\langle\vec{S}\rangle_t = (1/\tau)\int_t^{t+\tau}\vec{S}(t')dt'$, y para campos electromagnéticos del tipo ondas planas es $\langle\vec{S}\rangle_t = (1/2)\text{Re}[\vec{E} \times (\vec{B}/\mu)^*]$, donde $*$ corresponde a la operación complejo conjugado [4].

[5] $\vec{S}_{ext} = 1/2\,\text{Re}\{\vec{E}_i \times \vec{H}_s^* + \vec{E}_s \times \vec{H}_i^*\}$

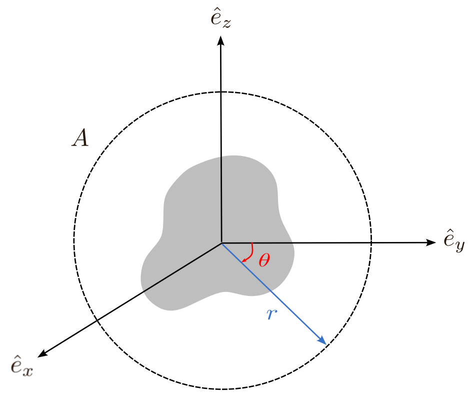

Fig. 3: Esquema de la esfera imaginaria de radio r y superficie A centrada en el origen y en la partícula de interés.

Para un medio no absorbente, W_i es igual en todas partes, por lo que se anula, [6] entonces

$$W_{ext} = W_a + W_s. \tag{15}$$

Al considerar el campo incidente $\vec{E}_i = E\hat{e}_x$ polarizado en la dirección $\hat{e}_x$ y a $\vec{H}_i = (1/\mu\omega)\,\vec{k} \times E\hat{e}_x$ en un medio no absorbente, W_a es independiente del radio r de la esfera imaginaria, por lo que se puede considerar a r lo suficientemente grande para estar en la región de campo lejano donde los campos se comportan como las Ecs. (13), por lo cual, W_{ext} está dado por [4]

$$W_{ext} = I_i \frac{4\pi}{k^2}\,\mathrm{Re}\{(\vec{X}\cdot\hat{e}_x)_{\theta=0}\},$$

donde I_i es la irradiancia incidente y por consiguiente,

$$C_{ext} = \frac{W_{ext}}{I_i} = \frac{4\pi}{k^2}\,\mathrm{Re}\{(\vec{X}\cdot\hat{e}_x)_{\theta=0}\},^{7} \tag{16}$$

que es la sección transversal de extinción y que posee dimensiones de área. La Ec. (16) puede ser reescrita como [4]

$$C_{ext} = C_{abs} + C_{sca} \tag{17}$$

donde $C_{abs} = W_{abs}/I_i$ y $C_{sca} = W_s/I_i$ corresponden a las secciones transversales de absorción y esparcimiento, respectivamente. Al sustituir las Ecs. (13) en la Ec. (14) se obtiene

$$C_{sca} = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \frac{|\vec{X}|^2}{k^2}\,\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi. \tag{18}$$

Estas secciones transversales son propiedades macroscópicas y medibles, que proveen información sobre la energía absorbida y esparcida por una partícula.

Al reescribir el vector de amplitud de esparcimiento [Ec. (12)] en términos de la base vectorial esférica se obtiene

$$\vec{X}\cdot\hat{e}_x = \frac{ik^3}{4\pi}\alpha(\sin^2\theta\cos^2\phi - 1),$$

y sustituyéndolo en la Ec. (16), la sección transversal de extinción es

$$C_{ext} = k\mathrm{Re}\left[\left(i\alpha(\sin^2\theta\cos^2\phi - 1)\right)_{\theta=0}\right] = k\,\mathrm{Re}\left[-i\alpha\right],$$

[6] $W_i = \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} |S_i(r,\theta,\phi)|\cos\theta\sin\theta\, d\theta = 0$

[7] Debido al teorema óptico, la extinción sólo depende de la amplitud de esparcimiento en la dirección de propagación y es el efecto combinado de la absorción en la partícula y el esparcimiento por la partícula en todas las direcciones. [4].

y dado que la polarizabilidad es compleja se sigue que

$$C_{ext} = k\,\mathrm{Im}[\alpha]. \tag{19}$$

Asimismo, a partir de la Ec. (18), la sección transversal de esparcimiento se describe por

$$C_{sca} = \frac{|\alpha|^2 k^4}{6\pi}. \tag{20}$$

III. Elipsoide en la aproximación cuasiestática

En esta sección se busca estudiar el esparcimiento de luz por un elipsoide centrado en el origen, con semiejes (a, b, c) paralelos a los ejes $\hat{e}_x, \hat{e}_y, \hat{e}_z$ respectivamente, y con dimensiones tales que $\lambda \gg a > b > c$. Las coordenadas más naturales, aunque poco conocidas, para estudiar el sistema enunciado previamente son las coordenadas elipsoidales [ver Fig. 4], que describen la superficie del elipsoide como

$$\frac{x^2}{a^2 - u} + \frac{y^2}{b^2 - u} + \frac{z^2}{c^2 - u} = 1, \tag{21}$$

donde debe determinarse el valor del parámetro u. La Ec. (21) es una ecuación de tercer grado para u, por lo que las soluciones (reales) son un conjunto de tres valores $\{\xi, \eta, \zeta\}$ tales que [8]

$$-\infty < \xi < c^2 < \eta < b^2 < \zeta < a^2 \tag{22}$$

que corresponden a tres formas cuadráticas con focos en común (https://mathworld.wolfram.com/ConfocalEllipsoidalCoordinates.html)

$$\frac{x^2}{a^2 - \xi} + \frac{y^2}{b^2 - \xi} + \frac{z^2}{c^2 - \xi} = 1, \tag{23}$$

$$\frac{x^2}{a^2 - \eta} + \frac{y^2}{b^2 - \eta} + \frac{z^2}{c^2 - \eta} = 1, \tag{24}$$

$$\frac{x^2}{a^2 - \zeta} + \frac{y^2}{b^2 - \zeta} + \frac{z^2}{c^2 - \zeta} = 1. \tag{25}$$

Obsérvese que si ξ es constante, se obtiene un elipsoide confocal. De esta forma, la superficie de la partícula a estudiar se tiene cuando $\xi = 0$. Cuando η es constante, se obtiene un hiperboloide de una hoja y cuando ζ es constante se tiene un hiperboloide de dos hojas.

Es así como, a cualquier punto (x, y, z) le corresponde un conjunto de coordenadas elipsoidales (ξ, η, ζ). Sin embargo, esto no es cierto para el caso contrario. Estas coordenadas determinan ocho puntos simétricamente localizados en los octantes cuyo espacio está particionado por los ejes coordenados x, y, z anteriormente mencionados.

[8] La función $f(u) = x^2/(a^2 - u) + y^2/(b^2 - u) + z^2/(c^2 - u) - 1$ resulta ser continuamente diferenciable en el dominio $(-\infty, c^2) \cap (c^2, b^2) \cap (b^2, a^2)$ y estrictamente creciente en cada intervalo que lo compone, de tal forma que, al calcular los límites en cada extremo de los intervalos, se concluye que existe exactamente una raíz en cada intervalo.

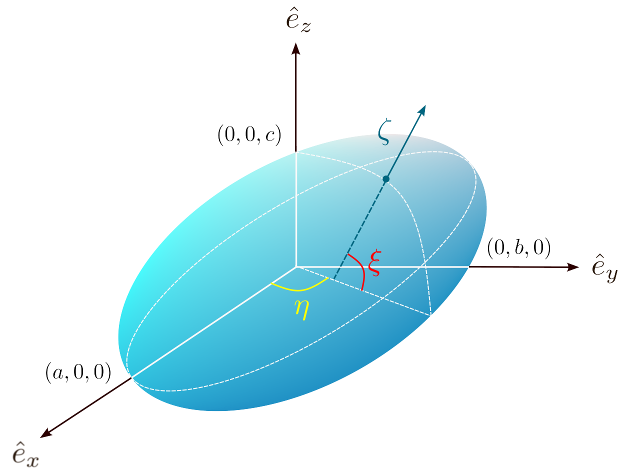

Fig. 4: Sistema coordenado elipsoidal con un elipsoide centrado en el origen, con semiejes (a, b, c), $a > b > c$.

Las ecuaciones anteriores se pueden reescribir de forma matricial como

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{a^2+\xi} & \frac{1}{b^2+\xi} & \frac{1}{c^2+\xi} \\ \frac{1}{a^2+\eta} & \frac{1}{a^2+\eta} & \frac{1}{a^2+\eta} \\ \frac{1}{a^2+\zeta} & \frac{1}{a^2+\zeta} & \frac{1}{a^2+\zeta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ z^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

cuya solución está dada por las expresiones

$$x^2 = \frac{(a^2+\xi)(a^2+\eta)(a^2+\zeta)}{(b^2-a^2)(c^2-a^2)}, \tag{26}$$

$$y^2 = \frac{(b^2+\xi)(b^2+\eta)(b^2+\zeta)}{(a^2-b^2)(c^2-b^2)}, \tag{27}$$

$$z^2 = \frac{(c^2+\xi)(c^2+\eta)(c^2+\zeta)}{(a^2-c^2)(b^2-c^2)}. \tag{28}$$

Como se quiere resolver el problema del esparcimiento de luz por un elipsoide centrado en el origen, lo primero que hay que hacer, dado que se considera el límite cuasiestático, es resolver la ecuación de Laplace en coordenadas elipsoidales para el potencial eléctrico, lo cual se puede obtener al expresar al laplaciano en coordenadas generalizadas [8]

$$\nabla^2\phi = \frac{1}{h_1h_2h_3}\left[\frac{\partial}{\partial q_1}\left(\frac{h_2h_3}{h_1}\frac{\partial\phi}{\partial q_1}\right) + \frac{\partial}{\partial q_2}\left(\frac{h_3h_1}{h_2}\frac{\partial\phi}{\partial q_2}\right) + \frac{\partial}{\partial q_3}\left(\frac{h_1h_2}{h_3}\frac{\partial\phi}{\partial q_3}\right)\right], \tag{29}$$

donde ϕ es una función escalar, y h_i con $i = 1, 2, 3$ los factores de escala que, para coordenadas elipsoidales se asocian como $1 \to \xi, 2 \to \eta$ y $3 \to \zeta$, y se determinan al hacer un cambio de base de coordenadas cartesianas a elipsoidales. Para ello, se encuentra un vector unitario en la dirección de la i-ésima coordenada, que mide cómo es que cambia el vector posición $\vec{r} = (x, y, z)$ en una dirección dada y se define como [8]

$$\hat{e}_i = \frac{1}{h_i}\left(\frac{\partial\vec{r}}{\partial q_i}\right), \tag{30}$$

con

$$h_i = \left|\frac{\partial\vec{r}}{\partial q_i}\right| = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial q_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial q_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial q_i}\right)^2}. \tag{31}$$

Para la variación en x, empleando la Ec. (26), se tiene que

$$\begin{aligned}
\frac{\partial x}{\partial \xi} &= \frac{1}{2}\left(\frac{(a^2+\xi)(a^2+\eta)(a^2+\zeta)}{(b^2-a^2)(c^2-a^2)}\right)^{-1/2} \frac{\partial}{\partial \xi}\left(\frac{(a^2+\xi)(a^2+\eta)(a^2+\zeta)}{(b^2-a^2)(c^2-a^2)}\right) \\
&= \frac{1}{2}\frac{1}{a^2+\xi}\sqrt{\frac{(a^2+\xi)(a^2+\eta)(a^2+\zeta)}{(b^2-a^2)(c^2-a^2)}} \\
&= \frac{1}{2x}\frac{\partial x^2}{\partial \xi},
\end{aligned}$$

por tanto,

$$\frac{\partial x}{\partial \xi} = \frac{1}{2}\frac{x}{(a^2+\xi)}.$$

Análogamente, empleando las Ecs. (27) y (28) para y y z, respectivamente

$$\begin{aligned}
\frac{\partial y}{\partial \xi} &= \frac{1}{2y}\frac{\partial y^2}{\partial \xi} = \frac{1}{2}\frac{y}{(b^2+\xi)}, \\
\frac{\partial z}{\partial \xi} &= \frac{1}{2z}\frac{\partial z^2}{\partial \xi} = \frac{1}{2}\frac{z}{(c^2+\xi)}.
\end{aligned}$$

De esta forma, el cuadrado del primer factor de escala h_1 es

$$h_1^2 = \frac{1}{4}\left[\frac{x^2}{(a^2+\xi)^2} + \frac{y}{(b^2+\xi)^2} + \frac{z}{(c^2+\xi)^2}\right]. \tag{32}$$

Al proponer que la Ec. (21), correspondiente al lugar geométrico de los elipsoides, se modifique como

$$1 - \frac{x^2}{a^2+u} - \frac{y^2}{b^2+u} - \frac{z^2}{c^2+u} = \frac{g(u)}{(a^2+u)(b^2+u)(c^2+u)}, \tag{33}$$

donde $g(u) = (u-\xi)(u-\eta)(u-\zeta)$ es una función cúbica con tres raíces reales dentro del rango descrito por las limitaciones de cada variable, y al derivarla con respecto de u se obtiene

$$\frac{x^2}{(a^2+u)^2} + \frac{y^2}{(b^2+u)^2} + \frac{z^2}{(c^2+u)^2} = \frac{g(u)}{[f(u)]^2}\left[\frac{1}{u-\xi} + \frac{1}{u-\zeta} + \frac{1}{u-\eta} - \left(\frac{1}{a^2+u} + \frac{1}{b^2+u} + \frac{1}{c^2+u}\right)\right], \tag{34}$$

con

$$f(u) = \sqrt{(a^2+u)(b^2+u)(c^2+u)}, \tag{35}$$

por medio del cual se puede reescribir al primer factor de escala de la Ec. (36) como

$$h_1^2 = \frac{1}{4}\frac{g(u)}{[f(u)]^2}\left[\frac{(u-\zeta)(u-\eta)+(u-\xi)(u-\eta)+(u-\xi)(u-\zeta)}{g(u)} - \left(\frac{1}{a^2+u} + \frac{1}{b^2+u} + \frac{1}{c^2+u}\right)\right].$$

Dado que ξ es una raíz de $g(u)$, entonces, $g(u) = 0$, por lo que el factor de escala h_1 es

$$h_1 = \frac{\sqrt{(\xi-\eta)(\xi-\zeta)}}{2f(\xi)}. \tag{36}$$

Desarrollando un proceso análogo, se cumple que

$$h_2 = \frac{\sqrt{(\eta-\xi)(\eta-\zeta)}}{2f(\eta)} \quad \text{y} \quad h_3 = \frac{\sqrt{(\zeta-\xi)(\zeta-\eta)}}{2f(\zeta)}. \tag{37}$$

Sustituyendo las Ecs. (36) y (37) en la Ec. (29) y simplificando,

$$\nabla^2\phi = \frac{4}{\Upsilon}\left[(\eta-\zeta)f(\xi)\frac{\partial}{\partial \xi}\left(f(\xi)\frac{\partial \phi}{\partial \xi}\right) + (\zeta-\xi)f(\eta)\frac{\partial}{\partial \eta}\left(f(\eta)\frac{\partial \eta}{\partial \eta}\right) + (\xi-\zeta)f(\zeta)\frac{\partial}{\partial \zeta}\left(f(\zeta)\frac{\partial \phi}{\partial \zeta}\right)\right],$$

donde a Υ se le conoce como el valor absoluto del determinante funcional [9]

$$\Upsilon = (\xi - \eta)(\zeta - \xi)(\eta - \zeta). \tag{38}$$

Como resultado de lo anterior, la ecuación de Laplace en coordenadas elipsoidales es

$$\nabla^2\phi = (\eta - \zeta)f(\xi)\frac{\partial}{\partial\xi}\left(f(\xi)\frac{\partial\phi}{\partial\xi}\right) + (\zeta - \xi)f(\eta)\frac{\partial}{\partial\eta}\left(f(\eta)\frac{\partial\eta}{\partial\eta}\right) + (\xi - \eta)f(\zeta)\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(f(\zeta)\frac{\partial\phi}{\partial\zeta}\right) = 0, \tag{39}$$

cuya solución está determinada por la forma del campo incidente, descrito por el potencial anterior, y que cumple las condiciones de contorno, por lo cual, la ecuación se puede resolver mediante el método de reducción de orden al proponer una solución no trivial y buscar una segunda solución.

Al considerar un elipsoide homogéneo bajo un campo eléctrico incidente uniforme alineado a lo largo del eje $\hat{e}_z$, como a cada punto en las coordenadas elipsoidales le corresponde ocho distintos en las coordenadas cartesianas debido a la simetría del problema, el potencial electrostático hereda las siguientes propiedades de simetría

$$\phi(x, y, z) = \phi(-x, y, z) = \phi(x, -y, z) = \phi(-x, -y, z), \tag{40}$$

$$\phi(x, y, -z) = \phi(-x, y, -z) = \phi(x, -y, -z) = \phi(-x, -y, -z), \tag{41}$$

donde x, y, z son positivas. Entonces, solo se tiene que considerar el potencial en dos octantes: uno con z positivo y otro con z negativo.

Debido al esparcimiento producido por la partícula, se debe de considerar un potencial de perturbación ϕ_p. En consecuencia, el potencial fuera de la partícula ϕ_{ext} está formado por la superposición del potencial incidente ϕ_0 y el potencial de perturbación ϕ_p

$$\phi_{ext}(\xi, \eta, \zeta) = \phi_0(\xi, \eta, \zeta) + \phi_p(\xi, \eta, \zeta), \tag{42}$$

donde el potencial incidente es el potencial eléctrico asociado a una onda plana

$$\phi_0 = -E_0 r\cos\theta = -E_0 z = -E_0\left[\frac{(c^2 + \xi)(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)}{(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)}\right]^{1/2}, \tag{43}$$

en donde se empleó la Ec. (28).

Para distancias lo suficientemente lejanas a la partícula, es decir, cuando $\xi \gg a^2$, al factorizar ξ de la Ec. (26), se obtiene

$$\frac{x^2}{\frac{a^2}{\xi} + 1} + \frac{y^2}{\frac{b^2}{\xi} + 1} + \frac{z^2}{\frac{c^2}{\xi} + 1} = \xi,$$

donde

$$\lim_{\xi\to\infty}\left(\frac{x^2}{\frac{a^2}{\xi} + 1} + \frac{y^2}{\frac{b^2}{\xi} + 1} + \frac{z^2}{\frac{c^2}{\xi} + 1}\right) = x^2 + y^2 + z^2 = r^2,$$

entonces, $\xi \simeq r^2$ en el límite asintótico. Asimismo, en esta aproximación el potencial de perturbación es despreciable, por lo que

$$\lim_{\xi\to\infty}\phi_p = 0. \tag{44}$$

Al considerar ϕ_{int} y ϵ_p el potencial y la permitividad eléctrica en el interior del elipsoide y las mismas cantidades ϕ_{ext} y ϵ_m para el exterior de este, como el potencial es continuo en la superficie del elipsoide y la componente perpendicular del campo eléctrico por ausencia de cargas externas también [5]

$$\phi_{int}|_{\xi=0} = \phi_{ext}|_{\xi=0}, \tag{45a}$$

$$\epsilon_p\frac{\partial\phi_{int}}{\partial\xi}\bigg|_{\xi=0} = \epsilon_m\frac{\partial\phi_{ext}}{\partial\xi}\bigg|_{\xi=0}. \tag{45b}$$

Reescribiendo los potenciales ϕ_{int} y ϕ_0 de la forma

$$\phi(\xi,\eta,\zeta) = F(\xi)[(c^2+\eta)(c^2+\zeta)]^{1/2}, \tag{46}$$

se obtiene que, para que satisfagan la Ec. (39), se tiene que cumplir

$$(\eta-\zeta)[(c^2+\zeta)(c^2+\eta)]^{1/2}\left[f(\xi)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(f(\xi)\frac{\mathrm{d}F(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right)-\frac{1}{4}F(\xi)(a^2+b^2+2\xi)\right]=0, \tag{47}$$

por lo que resolver la Ec. (39) es equivalente a resolver

$$f(\xi)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(f(\xi)\frac{\mathrm{d}F(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right)-\left(\frac{a^2+b^2}{4}+\frac{\xi}{2}\right)F(\xi)=0. \tag{48}$$

La ecuación anterior es una ecuación diferencial ordinaria lineal de segundo orden, por lo que existen dos soluciones no triviales linealmente independientes. Una de estas soluciones es

$$F_1(\xi) = (c^2+\xi)^{1/2}, \tag{49}$$

y la segunda solución se obtiene mediante el método de reducción de orden. Como $F_1(\xi)$ es solución de la Ec. (39), se propone una segunda solución dada por $F_2(\xi) = v(\xi)F_1(\xi)$ donde $v(\xi)$ se determina al sustituir dicha solución en la ecuación diferencial dada, reduciéndola a una ecuación de primer orden donde la variable dependiente será v. Derivando la ecuación anterior respecto a ξ

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}F_2(\xi)}{\mathrm{d}\xi} &= F_1(\xi)\frac{\mathrm{d}v(\xi)}{\mathrm{d}\xi}+v(\xi)\frac{F_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi},\\ \frac{\mathrm{d}^2F_2(\xi)}{\mathrm{d}\xi^2} &= F_1(\xi)\frac{\mathrm{d}^2v(\xi)}{\mathrm{d}\xi^2}+2\frac{\mathrm{d}v(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\frac{\mathrm{d}F_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}+v(\xi)\frac{\mathrm{d}^2F_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi^2},\end{aligned}$$

y sustituyendo las derivadas anteriores en la Ec. (49) y simplificando, se obtiene

$$f^2(\xi)F_1(\xi)\frac{\mathrm{d}^2v(\xi)}{\mathrm{d}\xi^2}+\frac{\mathrm{d}v(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\left[f(\xi)F_1(\xi)\frac{\mathrm{d}f(\xi)}{\mathrm{d}\xi}+2f^2(\xi)\frac{\mathrm{d}F_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right]=0.$$

Haciendo el cambio de variable $V(\xi) = dv(\xi)/d\xi$ y reordenando términos resulta en

$$\frac{1}{V(\xi)}\frac{\mathrm{d}V(\xi)}{\mathrm{d}\xi} = -\frac{1}{f^2(\xi)F_1(\xi)}\left[f(\xi)F_1(\xi)\frac{\mathrm{d}f(\xi)}{\mathrm{d}\xi}+2f^2(\xi)\frac{\mathrm{d}F_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right],$$

donde la integral indefinida de la ecuación anterior da como resultado

$$\ln[V(q)] = -\ln[F_1^2(q)f(q)],$$

entonces,

$$\frac{\mathrm{d}v(q)}{\mathrm{d}q} = \frac{1}{F_1^2(q)f(q)}.$$

Como $\mathrm{d}v(q)/\mathrm{d}q$ es distinto de cero, $v(q)$ es distinto de una constante. Integrando lo anterior se tiene que

$$v(\xi) = \int_\xi^\infty \frac{\mathrm{d}q}{F_1^2(q)f(q)},$$

por lo tanto,

$$F_2(\xi) = F_1(\xi)\int_\xi^\infty \frac{\mathrm{d}q}{F_1^2(q)f(q)}. \tag{50}$$

Al escribir explícitamente el integrando, usando las Ecs. (49) y (50), y haciendo una integración por partes con $u = 1/(a^2+q)^{1/2}$ y $\mathrm{d}v = 1/[(c^2+q)^{3/2}(b^2+q)^{1/2}]$ se obtiene

$$\begin{aligned} F_2(\xi) &= F_1(\xi)\int_\xi^\infty \frac{\mathrm{d}q}{(c^2+q)[(a^2+q)(b^2+q)(c^2+q)]^{1/2}} \\ &= \frac{F_1(\xi)}{c^2-b^2}\left[\frac{b^2+q}{(a^2+q)(c^2+q)}\right]^{1/2}\Bigg|_\xi^\infty - \int_\xi^\infty \sqrt{\frac{b^2+q}{c^2+q}}\frac{\mathrm{d}q}{(c^2-b^2)(a^2+q)^{3/2}}. \end{aligned} \tag{51}$$

Reescribiendo la segunda integral

$$\int_\xi^\infty \frac{\sqrt{\frac{b^2+q}{a^2+q}}\sqrt{\frac{b^2+q}{a^2+q}}\sqrt{a^2-c^2}\,\mathrm{d}q}{\sqrt{a^2-c^2}(c^2-b^2)\sqrt{\frac{c^2+q}{a^2+q}}\sqrt{\frac{b^2+q}{c^2+q}}(a^2+q)^{3/2}\sqrt{\frac{c^2+q}{a^2+q}}}, \tag{52}$$

y considerando que

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\left(E\left(\operatorname{arcsen}\left(\frac{\sqrt{a^2-c^2}}{\sqrt{a^2+q}}\right)\middle|\frac{a^2-b^2}{a^2-c^2}\right)\right) = -\frac{\sqrt{\frac{b^2+q}{a^2+q}}\sqrt{a^2-c^2}}{(a^2+q)^{3/2}\sqrt{\frac{c^2+q}{a^2+q}}}$$

al sustituir en la Ec. (52) y haciendo uso del teorema fundamental del cálculo, se obtiene que la segunda solución a la Ec. (48) es

$$F_2(\xi) = \frac{2F_1(\xi)}{c^2-b^2}\left\{\left[\frac{b^2+q}{(a^2+q)(c^2+q)}\right]^{1/2} - \frac{1}{(a^2-c^2)^{1/2}}E\left(\operatorname{arcsen}\left(\frac{\sqrt{a^2-c^2}}{a^2+q}\right)\middle|\frac{a^2-b^2}{a^2-c^2}\right)\right\}\Bigg|_\xi^\infty, \tag{53}$$

donde $E(\phi|m)$ es una integral elíptica de segundo tipo definida como [10]

$$E(x|k) = \int_0^x \frac{\sqrt{1-k^2t^2}}{1-t^2}\mathrm{d}t, \qquad 0 \le m \le 1, \tag{54}$$

donde el módulo angular es $\alpha = \operatorname{arcsen} k$ y k es la excentricidad. En el primer límite de integración (∞) de $F_2(\xi)$ al evaluar se obtiene que el primer sumando es cero, y en el segundo límite la función arcoseno es cero. De esta forma, la parte angular de la integral es cero, es decir, $E(0|m) = 0$. En consecuencia, considerando la definición de F_1 en la Ec. (49) se tiene que F_1 y F_2 cumplen

$$\lim_{\xi\to 0} F_1(\xi) = c \qquad \text{y} \qquad \lim_{\xi\to\infty} F_2(\xi) = 0. \tag{55}$$

De esta forma, considerando que F_1 no satisface la condición impuesta sobre ϕ_p en la Ec. (44) y que necesariamente el potencial dentro de la partícula debe de ser finito, lo cual F_2 no satisface, los potenciales ϕ_{int} y ϕ_p, propuestos como en la Ec. (46), están dados por

$$\phi_{int} = C_1F_1(\xi)[(c^2+\eta)(c^2+\zeta)]^{1/2}, \tag{56}$$

$$\phi_p = C_2F_2(\xi)[(c^2+\eta)(c^2+\zeta)]^{1/2}, \tag{57}$$

donde C_1 y C_2 son constantes a determinar a partir de las condiciones de frontera dadas por las Ecs. (45). Empleando la primera condición de contorno [Ec. (45a)]

$$C_1F_1(\xi)[(c^2+\eta)(c^2+\zeta)]^{1/2} = E_0\left[\frac{(c^2+\xi)(c^2+\eta)(c^2+\zeta)}{(a^2-c^2)(b^2-c^2)}\right]^{1/2} + C_2F_2(\xi)[(c^2+\eta)(c^2+\zeta)]^{1/2},$$

y al sustituir las Ecs. (49) y (50) en la ecuación anterior se obtiene

$$C_2\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}q}{(c^2+q)f(q)} - C_1 = \frac{E_0}{[(a^2-c^2)(b^2-c^2)]^{1/2}}. \tag{58}$$

Al definir

$$L^{(3)} = \frac{abc}{2}\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}q}{(c^2+q)f(q)}, \tag{59}$$

entonces, se puede reescribir la Ec. (58) como

$$C_2 L^{(3)}\left(\frac{2}{abc}\right) - C_1 = \frac{E_0}{[(a^2-c^2)(b^2-c^2)]^{1/2}}, \tag{60}$$

y, al usar la segunda condición de contorno [Ec. (45b)], se obtiene

$$\frac{\epsilon_p C_1}{2}\left[\frac{(c^2+\eta)(c^2+\zeta)}{(c^2+\xi)}\right]^{1/2} = \frac{\epsilon_m E_0}{2}\left[\frac{(c^2+\eta)(c^2+\zeta)}{(c^2+\xi)(a^2-c^2)(b^2-c^2)}\right]^{1/2} + \frac{\epsilon_m C_2}{2}\left[\frac{(c^2+\eta)(c^2+\zeta)}{(c^2+\xi)}\right]^{1/2}\int_\xi^\infty \frac{\mathrm{d}q}{(c^2+q)f(q)}$$
$$+\,\epsilon_m C_2[(c^2+\xi)(c^2+\eta)(c^2+\zeta)]^{1/2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left\{\int_\xi^\infty \frac{\mathrm{d}q}{(c^2+q)f(q)}\right\},$$

donde la integral del tercer sumando es

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left[\int_\xi^\infty \frac{\mathrm{d}q}{(c^2+q)f(q)}\right] = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left[\lim_{a\to\infty}\int_\xi^a \frac{\mathrm{d}q}{(c^2+q)f(q)}\right] = -\lim_{a\to\infty}\frac{1}{(c^2+\xi)f(\xi)} = -\frac{1}{(c^2+\xi)f(\xi)};$$

de tal forma que, al evaluar en $\xi = 0$, se obtiene

$$\epsilon_m C_2\left(\frac{2}{abc}\right)\left(L^{(3)}-1\right) - \epsilon_p C_1 = \frac{\epsilon_m E_0}{[(a^2-c^2)(b^2-c^2)]^{1/2}}. \tag{61}$$

Las constantes C_1 y C_2 se obtienen a partir de resolver el sistema de ecuaciones entre las Ecs. (60) y (61), por lo cual, al multiplicar la Ec. (60) por ϵ_p y restarle la Ec. (61), al simplificar se obtiene que

$$C_2 = \frac{abc}{2}\frac{E_0(\epsilon_p-\epsilon_m)}{[(a^2-c^2)(b^2-c^2)]^{1/2}}\left[L^{(3)}(\epsilon_p-\epsilon_m)+\epsilon_m\right]^{-1},$$

por lo tanto, al sustituir C_2 en la Ec. (60) se obtiene una expresión para C_1

$$C_1 = \frac{E_0}{[(a^2-c^2)(b^2-c^2)]^{1/2}}\left\{\left[1+\frac{\epsilon_m}{L^{(3)}(\epsilon_p-\epsilon_m)}\right]^{-1} - 1\right\}.$$

De esta forma, ya se puede determinar el potencial dentro de la partícula sustituyendo F_1 y C_1 en la Ec. (56), por lo que

$$\phi_{int} = \frac{1}{1+\frac{L^{(3)}(\epsilon_p-\epsilon_m)}{\epsilon_m}}\phi_0, \tag{62}$$

$$\phi_p = \frac{abc}{2}\frac{\frac{(\epsilon_m-\epsilon_p)}{\epsilon_m}\int_\xi^\infty \frac{\mathrm{d}q}{F_1^2(q)f(q)}}{1+\frac{L^{(3)}(\epsilon_p-\epsilon_m)}{\epsilon_m}}\phi_0. \tag{63}$$

A pesar de que inicialmente se había considerado el octante donde x, y, z eran positivas, las ecuaciones anteriormente obtenidas representan el potencial en todos los puntos del espacio, como consecuencia de la simetría de la partícula.

Al considerar distancias r muy alejadas del origen tales que $\xi \simeq r^2 \gg a^2$

$$\int_\xi^\infty \frac{\mathrm{d}q}{F_1^2(q)f(q)} = \int_\xi^\infty \frac{\mathrm{d}q}{(c^2+q)f(q)} = \int_\xi^\infty \frac{\mathrm{d}q}{q^{5/2}} = \frac{2}{3}\xi^{-3/2},$$

y entonces el potencial ϕ_p está dado por

$$\phi_p \sim \frac{E_0\cos\theta}{r^2}\frac{\frac{abc}{3}\frac{\epsilon_p-\epsilon_m}{\epsilon_m}}{1+\frac{L^{(3)}(\epsilon_p-\epsilon_m)}{\epsilon_m}}, \qquad (r \gg a) \tag{64}$$

cuya expresión es equivalente a la de un dipolo puntual dado por

$$\vec{p} = 4\pi\epsilon_m abc \frac{\epsilon_p - \epsilon_m}{3\epsilon_m + 3L^{(3)}(\epsilon_p - \epsilon_m)} \vec{E}_0. \tag{65}$$

Entonces, la polarizabilidad $\alpha^{(3)}$ de un elipsoide en un campo paralelo al eje z es

$$\alpha^{(3)} = V \frac{\epsilon_p - \epsilon_m}{\epsilon_m + L^{(3)}(\epsilon_p - \epsilon_m)}, \tag{66}$$

donde $V = 4\pi abc/3$ es el volumen del elipsoide. De manera análoga, las polarizabilidades $\alpha^{(1)}$ y $\alpha^{(2)}$ cuando el campo es aplicado en los ejes x y y son

$$\alpha^{(1)} = 4\pi abc \frac{\epsilon_p - \epsilon_m}{3\epsilon_m + 3L^{(1)}(\epsilon_p - \epsilon_m)}, \qquad \alpha^{(2)} = 4\pi abc \frac{\epsilon_p - \epsilon_m}{3\epsilon_m + 3L^{(2)}(\epsilon_p - \epsilon_m)},$$

donde

$$L^{(1)} = \frac{abc}{2} \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}q}{(a^2 + q)f(q)}, \qquad \text{y} \qquad L^{(2)} = \frac{abc}{2} \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}q}{(b^2 + q)f(q)}.$$

Se puede concluir en general que la polarizabilidad en una dirección arbitraria j, paralela a algún eje cartesiano es

$$\alpha^{(j)} = V \frac{\epsilon_p - \epsilon_m}{\epsilon_m + L^{(j)}(\epsilon_p - \epsilon_m)} \tag{67}$$

con $L^{(j)}$ conocido como *factor geométrico*, dado por la integral

$$L^{(j)} = \frac{abc}{2} \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}q}{(a_j^2 + q)f(q)} \tag{68}$$

donde el superíndice (j) indica la dirección en la que se calcula el factor de geométrico y a_j denota al semieje del elipsoide orientado en esa misma dirección. Cabe mencionar que los factores geométricos satisfacen que $L^{(1)} \leq L^{(2)} \leq L^{(3)}$, [9] y que sólo dos de los tres son independientes, ya que tienen que cumplir la relación

$$L^{(1)} + L^{(2)} + L^{(3)} = 1, \tag{69}$$

pues,

$$L^{(1)} + L^{(2)} + L^{(3)} = \frac{abc}{2} \int_0^\infty \left[\frac{1}{(a^2 + q)} + \frac{1}{(b^2 + q)} + \frac{1}{(c^2 + q)} \right] \frac{\mathrm{d}q}{f(q)},$$

que al simplificar se obtiene

$$L^{(1)} + L^{(2)} + L^{(3)} = -abc \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q} \left(\frac{1}{f(q)} \right) \mathrm{d}q,$$

donde usando el teorema fundamental la integral es

$$\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q} \left(\frac{1}{f(q)} \right) \mathrm{d}q = \frac{1}{f(q)} \Big|_{(abc)^2}^{\infty} = -\frac{1}{abc},$$

y por consiguiente, se cumple la Ec. (69).

En el caso en el que los semiejes son iguales ($a = b = c$), es decir, en el caso de una esfera se tiene que

$$L_{\text{esfera}} = L^{(1)} = L^{(2)} = L^{(3)} = \frac{a^3}{2} \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}q}{(a^2 + q)^{5/2}} = \frac{1}{3}.$$

Una clase especial de elipsoides son los *esferoides*, los cuales tienen dos ejes de igual longitud, por lo cual, solo uno de los factores geométricos es independiente. El esferoide prolato [Fig. 5a], para el cual $b = c > a$ y $L_2 = L_3$ es generado por la rotación de una elipse sobre su eje mayor; el esferoide oblato [Fig. 5b], para el cual $b = a > c$ y $L_1 = L_2$ es generado al rotar una elipse sobre su eje menor. Para los esferoides, se tiene una expresión analítica para L_1 como función de la excentricidad e [4]

[9] Debido a la simetría del elipsoide.

- Esferoide prolato:

$$L_1 = \frac{1-e^2}{e^2}\left(-1+\frac{1}{2e}ln\frac{1+e}{1-e}\right) \qquad e^2 = 1-\frac{b^2}{a^2} \tag{70}$$

- Esferoide oblato:

$$L_1 = \frac{g(e)}{2e^2}\left[\frac{\pi}{2}-\tan^{-1}g(e)\right]-\frac{g^2(e)}{2}, \tag{71}$$

$$g(e) = \left(\frac{1-e^2}{e^2}\right)^{1/2}, \qquad e^2 = 1-\frac{c^2}{a^2} \tag{72}$$

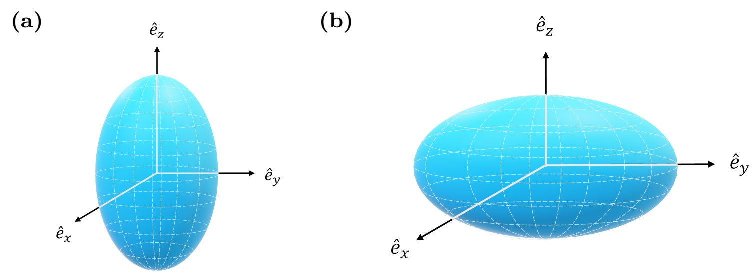

Fig. 5: Clases especiales de elipsoides. **a)** Prolato. El eje mayor del elipsoide está orientado en la dirección del eje $\hat{e}_z$. **b)** Oblato. El eje mayor del elipsoide está orientado en la dirección del eje $\hat{e}_y$.

II. Resultados

Dado que en los sistemas biológicos las partículas se encuentran aleatoriamente orientadas, es de gran utilidad considerar las secciones transversales promedio $\langle C_{abs}\rangle$ y $\langle C_{sca}\rangle$, que son independientes de la polarización de la luz incidente, [10] éstas están dadas por [4]:

$$\langle C_{abs}\rangle = \frac{k}{3}\mathrm{Im}\{\alpha^{(1)}+\alpha^{(2)}+\alpha^{(3)}\},$$

$$\langle C_{sca}\rangle = \frac{k^4}{3(6\pi)}\mathrm{Im}\{\alpha^{(1)}+\alpha^{(2)}+\alpha^{(3)}\}.$$

En este trabajo se realizaron los cálculos para elipsoides oblatos, por lo cual, debido a la simetría del elipsoide, se satisface que $C_{ext}^{(1)} = C_{ext}^{(2)}$.

En la Fig. 6a, dado que se trata de un elipsoide oblato, al considerar $\langle C_{ext}\rangle$ se observan dos frecuencias en las que la sección transversal es máxima, las cuales coinciden con las frecuencias asociadas a $C_{ext}^{(1)}$ y $C_{ext}^{(3)}$ cuando éstas se maximizan. En la Fig. 6b se observa que en partículas pequeñas, la absorción tiene una contribución mayor en la extinción que el esparcimiento.

A continuación se presentan los cálculos de las secciones tranversales de extinción para aluminio, plata, oro, bismuto y óxido de magnesio.

Aluminio y plata

En la Fig. 7 y 8 se observan las secciones transversales de extinción promedio para partículas de aluminio y plata, respectivamente. En las Figs. 7a y 8a se consideraron partículas con relación de aspecto AR$=2$ constante, en ambas figuras se observan dos máximos locales correspondientes a las frecuencias a las cuales C_{ext} se maximiza al iluminar la partícula en la dirección $\hat{e}_x$ (aluminio: 254 nm, plata: 434 nm) y $\hat{e}_z$ (aluminio: $\lambda = 146$ nm , plata: plata: 344 nm). En las Figs. 7a y 8a se observan las secciones transversales de extinción promedio para partículas

[10] Considerando que las partículas no sean ópticamente activas.

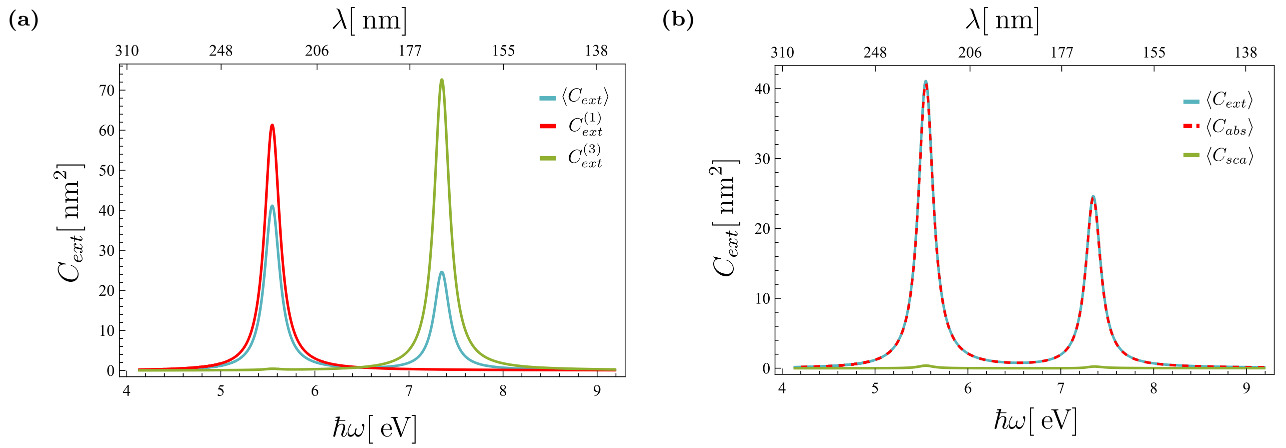

Fig. 6: Secciones transversales como función de la energía $\hbar\omega$ y de la longitud de onda λ para una partícula elipsoidal oblata de aluminio caracterizada por su función dieléctrica dada por el modelo de Drude ($\hbar\omega_p = 13.142$ eV, $\hbar\gamma = 0.197$ eV), con semiejes $a = b = 1.5$ nm, $c = 1$ nm e inmersa en agua ($n_m = 1.33$). **a)** Sección transversal de extinción promedio $\langle C_{ext} \rangle$, $C_{ext}^{(1)}$ y $C_{ext}^{(3)}$. **b)** Sección transversal de extinción promedio $\langle C_{ext} \rangle$, sección transversal de absorción promedio $\langle C_{abs} \rangle$ y sección transversal de esparcimiento promedio $\langle C_{sca} \rangle$.

de aluminio y plata, respectivamente, con una relación de aspecto variable; se observa que conforme la relación de aspecto se aproxima a la unidad, hay un corrimiento de las frecuencias asociadas a las $\langle C_{ext} \rangle$ máximas hacia la frecuencia de resonancia (201 nm) asociada a una esfera inmersa en agua.

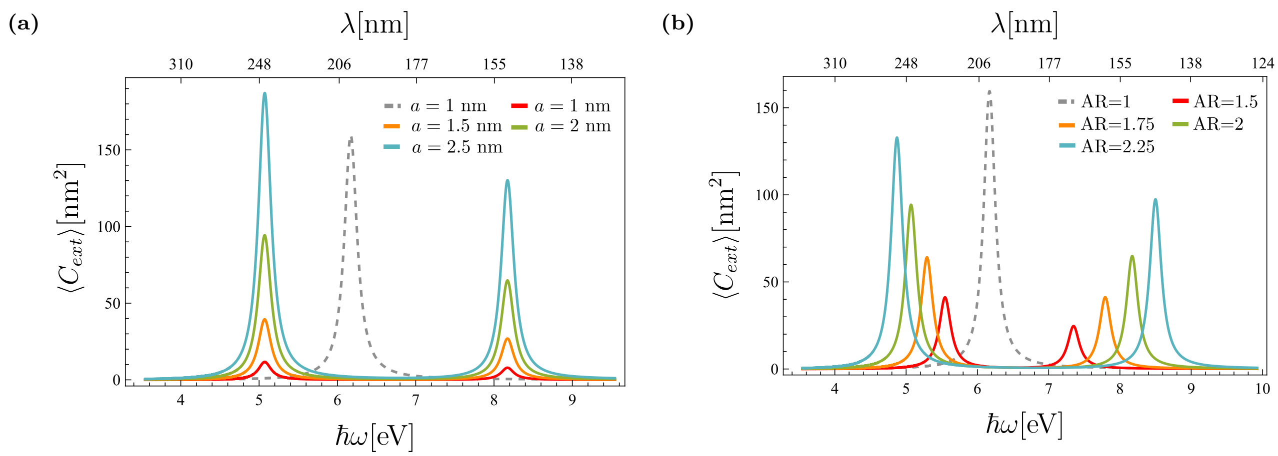

Fig. 7: Secciones transversales de extinción promedio $\langle C_{ext} \rangle$ como función de la energía $\hbar\omega$ y de la longitud de onda λ para una partícula elipsoidal oblata de aluminio caracterizada por su función dieléctrica dada por el modelo de Drude ($\hbar\omega_p = 13.142$ eV, $\hbar\gamma = 0.197$ eV) e inmersa en agua ($n_m = 1.33$). **a)** Razón de aspecto $AR = 2$ constante, excepto en el caso de una esfera (línea gris punteada) donde $AR = 1$. **b)** Semieje menor $c = 1$ nm constante.

Oro y bismuto

En la Fig. 9 se observan las secciones transversales de extinción promedio para partículas de oro, así como la parte imaginaria y real de su índice de refracción. En la Fig. 9a se consideraron partículas con relación de aspecto AR= 2 constante y en la Fig. 9b se consideraron partículas con relación de aspecto variable; en ambos casos, solo se observa una frecuencia asociada (557 nm) a la maximización de $\langle C_{ext} \rangle$ y se observa un incremento de la $\langle C_{ext} \rangle$ que corresponde con la disminución de la parte imaginaria del índice de refracción asociada a la absorción y un aumento de la parte real del índice de refracción asociada al esparcimiento. Como se trata de partículas elipsoidales oblatas, tiene que haber dos frecuencias que maximicen a $\langle C_{ext} \rangle$, por lo anterior, se asume que la frecuencia faltante se debe a

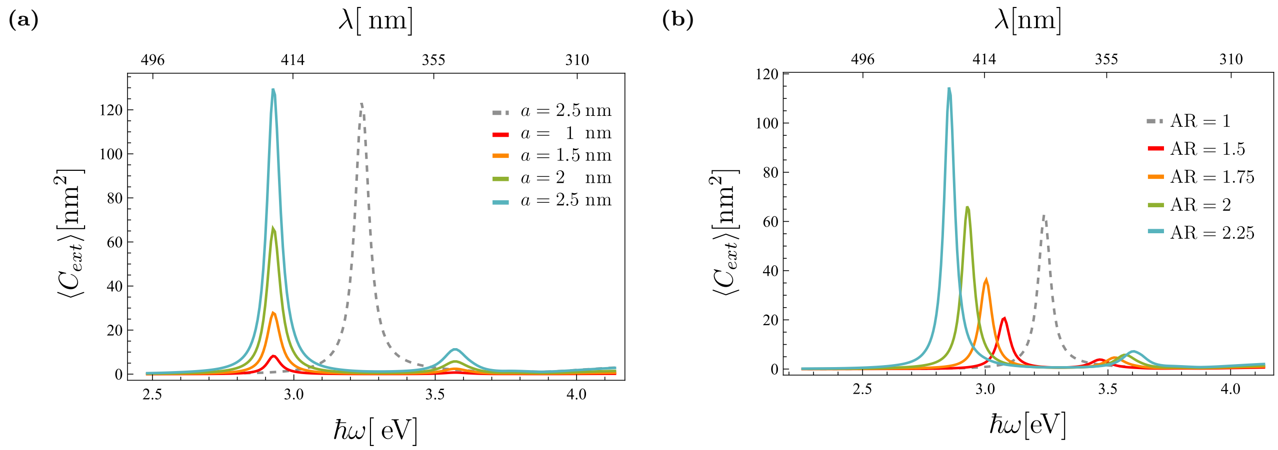

Fig. 8: Secciones transversales de extinción promedio $\langle C_{ext}\rangle$ como función de la energía $\hbar\omega$ y de la longitud de onda λ para una partícula elipsoidal oblata de plata, cuyo índice de refracción complejo fue obtenido a partir de datos experimentales e inmersa en agua ($n_m = 1.33$). **a)** Razón de aspecto $AR = 2$ constante, excepto en el caso de una esfera (línea gris punteada) donde $AR = 1$. **b)** Semieje menor $c = 1$ nm constante. nm

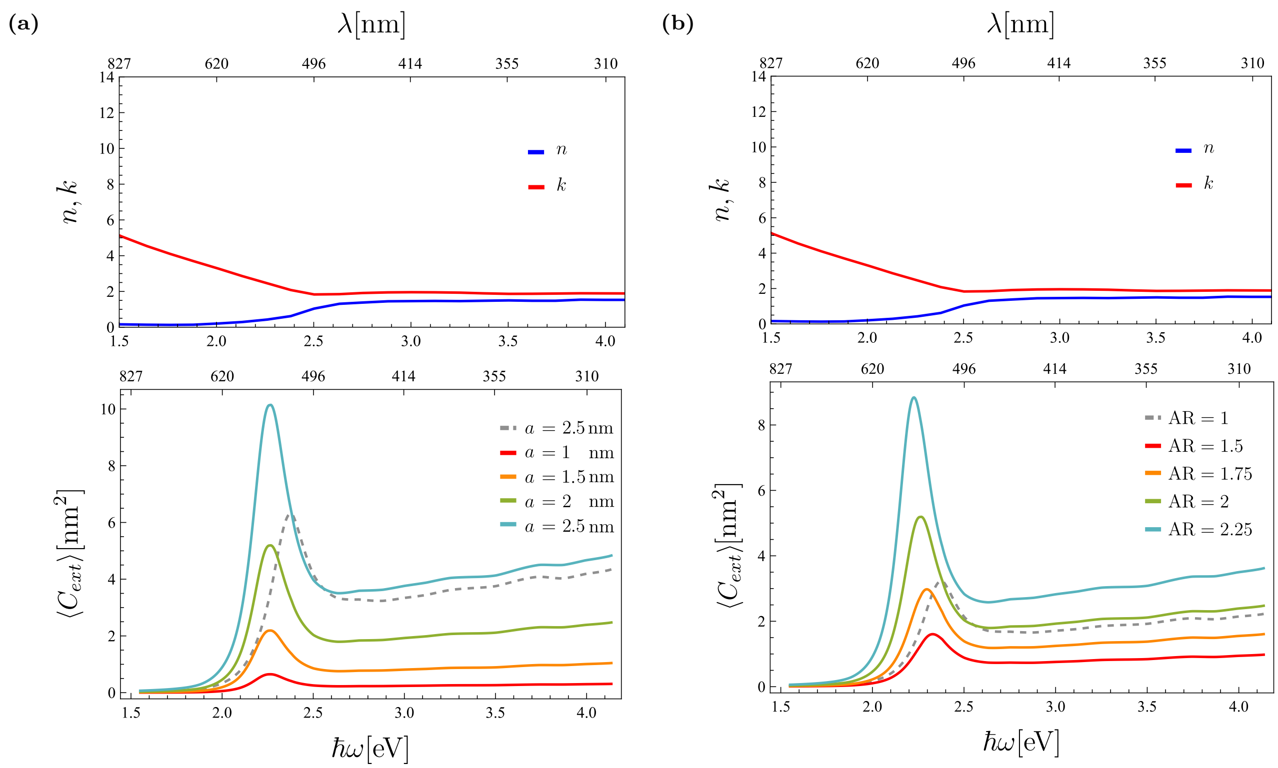

Fig. 9: Secciones transversales de extinción promedio $\langle C_{ext}\rangle$ como función de la energía $\hbar\omega$ y de la longitud de onda λ para una partícula elipsoidal oblata de oro, cuyo índice de refracción complejo fue obtenido a partir de datos experimentales e inmersa en agua ($n_m = 1.33$) y curvas de comparación del índice de refracción (parte real en azul, parte imaginaria en rojo) como función de la energía $\hbar\omega$ y de la longitud de onda λ para el oro. **a)** Razón de aspecto $AR = 2$ constante, excepto en el caso de una esfera (línea gris punteada) donde $AR = 1$. **b)** Semieje menor $c = 1$ nm constante..

En la Fig. 10 se observan las secciones transversales de extinción promedio para partículas de bismuto, así como la parte imaginaria y real de su índice de refracción. En la Fig. 10a se consideraron partículas con relación de aspecto AR= 2 constante y en la Fig. 10b se consideraron partículas con relación de aspecto variable; en ambos casos, solo se observa una frecuencia asociada a la maximización de $\langle C_{ext}\rangle$ y se observa un incremento de la $\langle C_{ext}\rangle$ que corresponde con la disminución de la parte imaginaria del índice de refracción asociada a la absorción y un aumento de la parte real del índice de refracción asociada al esparcimiento. Como se trata de partículas elipsoidales oblatas, tiene que haber dos frecuencias que maximicen a $\langle C_{ext} \rangle$, por lo anterior, se asume que la frecuencia faltante se debe a

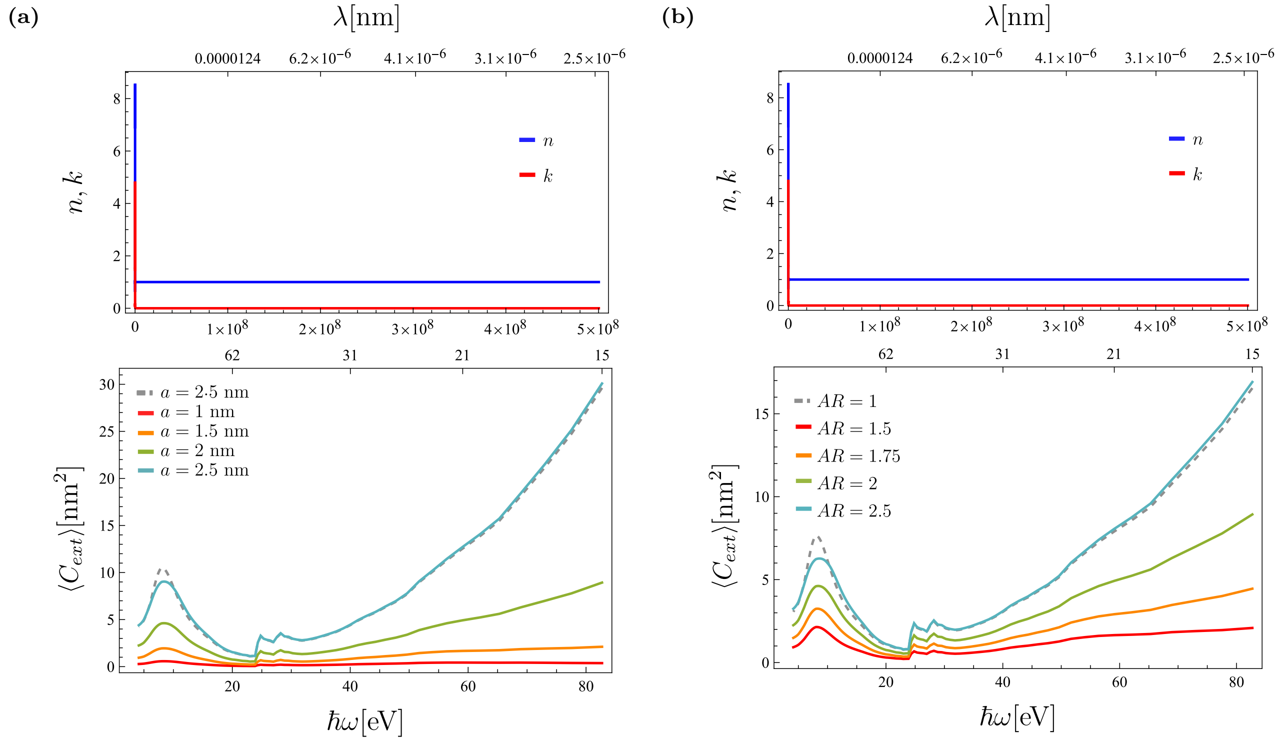

Fig. 10: Secciones transversales de extinción promedio $\langle C_{ext} \rangle$ como función de la energía $\hbar\omega$ y de la longitud de onda λ para una partícula elipsoidal oblata de bismuto, cuyo índice de refracción complejo fue obtenido a partir de datos experimentales e inmersa en agua ($n_m = 1.33$) y curvas de comparación de la función dieléctrica (parte real en azul, parte imaginaria en rojo) como función de la energía $\hbar\omega$ y de la longitud de onda λ para el bismuto. **a)** Razón de aspecto $AR = 2$ constante, excepto en el caso de una esfera (línea gris punteada) donde $AR = 1$. **b)** Semieje menor $c = 1$ nm constante.

Óxido de magnesio

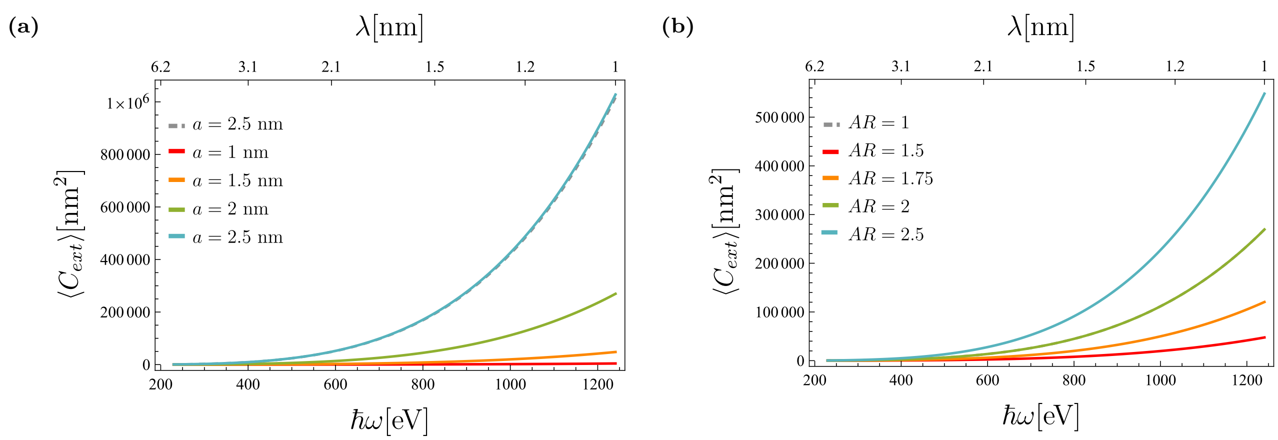

Fig. 11: Secciones transversales de extinción promedio $\langle C_{ext} \rangle$ como función de la energía $\hbar\omega$ y de la longitud de onda λ para una partícula elipsoidal oblata de óxido de magnesio, cuyo índice de refracción complejo fue obtenido a partir de datos experimentales e inmersa en agua ($n_m = 1.33$) y curvas de comparación de la función dieléctrica (parte real en azul, parte imaginaria en rojo) como función de la energía $\hbar\omega$ y de la longitud de onda λ para el bismuto. **a)** Razón de aspecto $AR = 2$ constante, excepto en el caso de una esfera (línea gris punteada) donde $AR = 1$. **b)** Semieje menor $c = 1$ nm constante.

Referencias

[1] Bosschaart N., et al., *A literature review and novel theoretical approach on the optical properties of whole blood*. Lasers in Medical Science, **29**(2), 453-79 (2022). DOI:10.1007/s10103-021-03361-7

[2] Larsson, J., *Electromagnetics from a quasistatic perspective*. American Journal of Physics, **75**(3), 230–239 (2007). DOI:10.1119/1.2397095

[3] García, C. M. (2019). *Respuesta electromagnética de nanopartículas magnético/metálicas tipo core-shell*. Tesis de licenciatura. Universidad Nacional Autónoma de México.

[4] Bohren, C.F. y Huffman D.R. (1998). *Absorption and scattering of light by small particles*. John Wiley & Sons.

[5] Griffiths, D. J. (2013). *Introduction to electrodynamics.* 4.^{a} ed. Pearson.

[6] Jackson, J.D. (1999). *Classical Electrodynamics.* 3.^{a} ed. John Wiley & Sons.

[7] Weisstein, E. W. Confocal Ellipsoidal Coordinates. Recuperado el 27 de marzo de 2024, de MathWorld–A Wolfram Web Resource. https://mathworld.wolfram.com/ConfocalEllipsoidalCoordinates.html

[8] Arfken, G.B., Weber, H.J y Harris F.E. (2013). *Mathematical Methods for Physicists: A Comprehensive Guide*. 7.^{a} ed. Elsevier.

[9] Kellogg, O. D.(1954). *Foundations of Potential Theory*. Springer.

[10] Abramowitz, M. I., Stegun A. (1974). *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Dover Publications, Inc.