



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE
MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

RESPUESTA ELECTROMAGNÉTICA DE
NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICO/METÁLICAS
TIPO CORE-SHELL

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

PRESENTA:
CARLOS MIGUEL GARCÍA ROSAS

DIRECTOR DE TESIS:
DR. ALEJANDRO REYES CORONADO



CIUDAD DE MÉXICO, MÉXICO

FEBRERO, 2019



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

1. Datos del Alumno

García
Rosas
Carlos Miguel
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Física
311527896

2. Datos del tutor

Dr.
Alejandro
Reyes
Coronado

3. Datos del Sinodal 1

Dr.
Juan Arnaldo
Hernández
Cordero

4. Datos del Sinodal 2

Dr.
Edgar
Álvarez
Zauco

5. Datos del Sinodal 3

Dr.
Luis Alberto
Medina
Velázquez

6. Datos del Sinodal 4

Dr.
Frederic
Trillaud

7. Datos del trabajo escrito

Respuesta electromagnética de nanopartículas magnético/metálicas tipo core-shell
74 p
2019

Respuesta electromagnética de nanopartículas magnético/metálicas tipo core-shell

por

Carlos Miguel García Rosas

Tesis presentada para obtener el título de

Físico

en la

FACULTAD DE CIENCIAS

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

Ciudad de México, México. Febrero, 2019

Agradecimientos

Quiero agradecer principalmente a mis padres, José y Concepción, por siempre preocuparse en que tuviera la mejor educación; muchos de los logros que he obtenido se los debo a ustedes, entre los que se incluye éste. Desde pequeño siempre me insistieron en que todo lo que hiciera en mi vida lo debía hacer con disciplina, dedicación y paciencia, ya que la combinación de estos tres ingredientes siempre me ayudaría a cumplir y alcanzar mis metas. Siento mucho que ésta no sea una tesis de algún tema en particular de medicina... pero en mi defensa ustedes tuvieron la culpa por haberme despertado la curiosidad por las matemáticas a los 12 años, pero es algo de lo que estaré eternamente agradecido con ustedes. A mis hermanos, Alfonso, Susana y Julio, por siempre escucharme cuando intentaba explicar por qué ocurrían ciertos fenómenos físicos, a pesar de que no me lo preguntaban.

Gracias a todos los profesores que me han formado hasta este punto, en especial: a Enrique Ortiz, porque desde mi primer día en KUMON siempre me dijo cómo es que las matemáticas se han aplicando a través de la historia. A Gloria Yamasaki, gracias por inculcarme algo de disciplina japonesa en mi vida y jamás dejar de creer en mí. Al M. en C. Guillermo Govea, por aconsejarme y apoyarme en mis días de estudiante de preparatoria. A la M. en C. Emma Lam Osnaya por compartirme su pasión por la docencia y el Cálculo, tema necesario para entender el Electromagnetismo. Al Dr. Carlos Ramírez, porque a pesar de no soy un apasionado por la Mecánica Cuántica, siempre me la explicaba con mucho entusiasmo.

Gracias Dr. Alejandro Reyes Coronado, asesor de esta tesis, por su brindarme su tiempo, paciencia y apoyo. Por siempre darme los mejores consejos académicos, los cuales me han ayudado a salir adelante en esta carrera “altamente no trivial”. Al Dr. Omar Vázquez Estrada e Ing. Fis. Ind. Ulises Félix Rendón por su apoyo en la optimización y discusión de resultados obtenidos en el FEM. A mis sinodales, el Dr. Juan A. Hernández, el Dr. Edgar Álvarez, el Dr. Luis Alberto Medina y el Dr. Frederic Trillaud, por dedicar parte de su tiempo en leer y corregir esta tesis.

A la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) y a la Facultad de Ciencias (FC) de la UNAM, por enseñarme a hacer las cosas con las pocas o muchas herramientas que uno tenga y darme una educación de primer nivel por la módica cantidad de \$0.20 \pm aportaciones voluntarias. Asimismo, agradezco a la FC por apoyarme con una licencia de seis meses con goce de sueldo para la escritura de este trabajo. Investigación realizada gracias al Programa UNAM-PAPIIT IA105917.

Finalmente quiero agradecer a mis amigos del TAE y de la UNAM. En especial a Juan Tafoya, Juan Jaime y a Trejo, porque ustedes me demostraron el verdadero valor de la amistad y siempre me escucharon y/o aconsejaron en las buenas y en las malas. Gracias Emiliano, por siempre recordarme que no todo es física y matemáticas, y en la vida uno se tiene que divertir... gracias por ser mi eterno compañero de tarro.

RESUMEN

En este trabajo de tesis de licenciatura se plantea el estudio de la respuesta electromagnética de una nanopartícula tipo *core-shell*, es decir, una nanopartícula que presenta un núcleo hecho de algún material, ya sea metálico o magnético, y una capa exterior de otro material (magnético o metálico), de tal forma que la nanopartícula tenga un componente metálico y otro magnético. El interés en este tema se debe a las posibles aplicaciones de estas nanopartículas (NPs) en la medicina, en particular, la resonancia magnética nuclear (RMN) [1], en la que se han empleado NPs magnéticas para obtener contraste. También se ha especulado sobre la posibilidad de eliminar células cancerosas de manera selectiva empleando las NPs magnéticas en procedimientos de hipertermia. La forma en que operarían las NPs sería a través de corrientes inducidas al someter las NPs a un campo magnético externo oscilante en el tiempo, incrementando de manera local la temperatura en la vecindad de las NPs. Sin embargo, considerando las corrientes inducidas, sería mucho más eficiente si se emplearan NPs metálicas. Lo que se propone en esta tesis es mantener una parte magnética en la NP (permitiendo el contraste en RMN) pero agregar una contraparte metálica, en la que sea posible excitar plasmones de superficie localizados [2], calentando así las regiones en donde hay mayor concentración de campo eléctrico cercano en la nanopartícula. Para eliminar selectivamente células cancerosas, iluminando la NP a la frecuencia de resonancia adecuada [3], sería necesario funcionalizar la nanopartícula.

El punto de partida fue estudiar la respuesta electromagnética de una NP esférica, homogénea e isotrópica de radio a , al ser iluminada por una onda electromagnética (EM) monocromática plana. Este problema fue resuelto por Gustav Mie en 1908 [4] por lo que hoy en día se conoce a esta solución como “Teoría de Mie”. En la solución dada por Mie, los campos eléctrico y magnético en todo punto del espacio quedan determinados a partir de una expansión en términos de los armónicos esféricos vectoriales, cuyos coeficientes están dados a través de funciones especiales (esféricas de Bessel y de Hankel), y éstos contienen la información de las resonancias de la partícula, conocidas como resonancias plasmónicas de superficie localizadas [2].

Posteriormente, se estudió la respuesta óptica de NPs esféricas tipo *core-shell*, que han sido estudiadas anteriormente por diversos autores [5–8], presentando una solución tipo Mie para el cálculo de los campos electromagnéticos en todo punto del espacio y las propiedades ópticas, como la sección transversal de esparcimiento (C_{scat}), de extinción (C_{ext}) y de absorción (C_{abs}).

Además de NPs esféricas se estudiaron NPs elipsoidales, con las que se podría tener un control adicional con la polarización de la luz incidente, debido a la diferente respuesta de los modos longitudinales y transversales en NPs elipsoidales, por lo que se podrían manipular las zonas de amplificación de campo eléctrico (zonas de mayor calentamiento) en las NPs [9].

En esta tesis de licenciatura se desarrolló un programa para el cálculo numérico de propiedades ópticas: C_{scat} , C_{ext} y C_{abs} , para sistemas *core-shell*, con geometría esférica y elipsoidal (aproximación cuasi-estática), cuando en el núcleo se localiza una nanopartícula magnética y en el exterior un material con respuesta metálica. Para probar que el código desarrollado funciona correctamente, se compararon los cálculos hechos de manera analítica (extensión de la solución de Mie a un sistema esférico tipo *core-shell* y aproximación cuasi-estática para sistema elipsoidal cofocal) con los cálculos obtenidos por los métodos numéricos BEM (Boundary Element Method) [10, 11] y FEM (Finite Element Method) [12, 13].

Posteriormente, se estudió el problema de interacción electromagnética de partículas elipsoidales de manera exacta (es decir, sin restricción cuasi-estática). Dado que la solución exacta a las ecuaciones de Maxwell ya no es posible de manera analítica, se realizó el estudio a partir de métodos numéricos como BEM y FEM, obteniendo las resonancias plasmónicas tanto longitudinales como transversales para las NPs elipsoidales, para diferentes valores de los parámetros relevantes del problema: longitud y ancho del núcleo de la NP y el grosor de la capa metálica.

Índice general

I. Introducción	1
I.I. Plasmones	2
I.I.I. Plasmón de superficie: Breve reseña histórica	3
I.II. Resonancia magnética nuclear	4
I.III. Nanopartículas tipo <i>core-shell</i> y sus aplicaciones biomédicas	5
1. Esparcimiento y absorción de ondas electromagnéticas por partículas esféricas	8
1.1. Solución exacta: Solución de Mie	8
1.2. Cálculo de propiedades ópticas	15
2. Esparcimiento y absorción de ondas electromagnéticas por sistemas tipo <i>core-shell</i> esférico	19
2.1. Cálculo de coeficientes de esparcimiento de Mie	19
3. Aproximación cuasi-estática	27
3.1. Aproximación cuasi-estática: elipsoide	29
3.2. Esparcimiento y absorción de ondas electromagnéticas por sistemas tipo <i>core-shell</i> elipsoidal	36
4. Métodos Numéricos	41
4.1. Método de Elemento en la Frontera	41
4.1.1. Teoría básica	41
4.1.2. Procedimiento numérico	46
4.2. Método de Elementos Finitos	47
4.2.1. Teoría básica	47
4.2.2. Mallado	49
5. Resultados para sistemas de NPs magnético/metálicas tipo <i>core-shell</i>	50
5.1. Hibridación plasmónica	50
5.2. Sistema de NPs esféricas	51
5.3. Sistema de NPs elipsoidales prolato cofocales: aproximación cuasi-estática	53
5.4. Sistema de NPs elipsoidales prolato	55
5.4.1. Incidencia normal y oblicua	55
5.4.2. Sistema ideal de una NP elipsoidal prolato	59
6. Conclusiones	62
6.1. Trabajo a futuro	63

Introducción

Actualmente, el cáncer es una de las causas principales de muerte a nivel mundial; tan sólo en el 2015 se le atribuyen 8.8 millones de fallecimientos, siendo los siguientes cinco tipos de cáncer los más comunes: cáncer pulmonar (1.69 millones de muertes), cáncer hepático (788,000 de muertes), cáncer colorrectal (774,000 de muertes), cáncer gástrico (754,000 de muertes) y de mama (571,000 de muertes). Es importante resaltar que a nivel mundial, el cáncer de mama es el más común entre las mujeres y representa 16 % de los tumores malignos diagnosticados. Otra cifra relevante es que 69 % del total de defunciones por esta enfermedad se presentan en países en desarrollo, donde la mayoría de los pacientes acuden en un estado deplorable, obteniendo un diagnóstico médico en fase avanzada, dificultando su tratamiento [14, 15]. Hay tres tipos generales de tratamiento contra el cáncer: cirugía, radioterapia y quimioterapia. El tratamiento quirúrgico convencional de extracción de tumores sólidos, es una cirugía eficaz para la eliminación de tumores primarios accesibles, bien definidos y localizados dentro de regiones de tejido no vitales. Sin embargo, la alta morbilidad y la naturaleza invasiva asociada con la resección quirúrgica hacen que esta terapia sea inadecuada para el tratamiento de metástasis pequeñas y poco definidas u otros tumores incrustados en regiones vitales. Al emplear el tratamiento por radioterapia, se tiene la posibilidad de dañar el tejido sano circundante, y algunas de las células cancerosas que están más alejadas del sitio de radiación podrían recibir una menor intensidad del haz de radiación [16]. En el tratamiento de cáncer por quimioterapia, algunos de los agentes distribuidos en todo el cuerpo resultan ser tóxicos [17], por lo que la administración local de estos agentes en células malignas es un desafío.

El tratamiento de ablación térmica consiste en la destrucción del tejido por medio de hipertermia extrema (elevar la temperatura del tejido) o hipotermia (disminuir la temperatura del tejido). El cambio de temperatura se concentra en una zona local en y alrededor del tumor. El objetivo de utilizar un tratamiento de ablación térmica mínimamente invasivo es ajustar una dosis letal de calor al volumen de tejido maligno, aplicando el menor daño posible al tejido sano interviniente y circundante. Una propuesta hecha recientemente consiste en el empleo de campos magnéticos alternos para calentar nanopartículas magnéticas funcionalizadas e incrustadas dentro del tejido, lo que proporcionaría una terapia térmica selectiva a los tejidos cargados con el agente de acoplamiento térmico [18].

Se conoce que tanto en la superficie como en el interior de las células, las nanopartículas metálicas pueden interactuar con biomoléculas debido a su tamaño pequeño, ventaja que se puede emplear para el tratamiento terapéutico [19], debido a la excitación de plasmones de superficie localizados en las nanopartículas. Es por eso que se han empleado nanopartículas metálicas como agentes de contraste¹ y de terapia térmica selectiva en células malignas [21]. Estudios *in vivo* bajo la guía de resonancia magnética (empleando una intensidad de campo magnético de 1.5 Teslas) revelaron que la exposición a dosis bajas de luz láser en el infrarrojo cercano (820 nm, 4 W/cm²) en tumores sólidos tratados con NPs esféricas tipo *core-shell* magnético/metálicas se alcanzaron temperaturas máximas promedio capaces de inducir daño tisular irreversible ($\Delta T = 37.4 \pm 6.6^\circ C$) en 4 – 6 min [22]. Se ha demostrado que la luz dentro de la región espectral del infrarrojo cercano penetra al tejido a profundidades superiores a 1 cm, sin daños observables en el tejido intermedio [23]. El rango óptico donde la absorción del tejido de la piel es mínima y la transmisión óptica (penetración) es óptima es de 650 – 900 nm del espectro electromagnético [24].

Lo que se propone en este trabajo de tesis de licenciatura es emplear NPs tipo *core-shell* con núcleo magnético y cascarón metálico, con geometría esférica y elipsoidal. Con la componente magnética se podría arrastrar la NP y obtener contraste en RMN, mientras que con la contraparte metálica, en la que es posible excitar plasmones de superficie localizados [2], sería posible generar calor en la vecindad de las NPs por medio de la concentración de campo eléctrico cercano, si se iluminan las NPs a una frecuencia adecuada [3].

¹Un agente o medio de contraste es una sustancia química utilizada para potenciar la sangre y la perfusión en los tejidos [20].

I.I. Plasmones

A las oscilaciones colectivas (modos normales) de los electrones en la red cristalina de un metal se le denomina plasmón y sus campos electromagnéticos (EMs) asociados satisfacen las ecuaciones de Maxwell (en sistema internacional de unidades, SI), dadas por:

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad \text{Ley de Gauss magnética (I.1)}$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho_{\text{tot}}}{\epsilon_0}, \quad \text{Ley de Gauss eléctrica (I.2)}$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad \text{Ley de Faraday-Lenz (I.3)}$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J}_{\text{tot}} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad \text{Ley de Ampère-Maxwell (I.4)}$$

donde \vec{E} es el campo eléctrico, \vec{B} es el campo magnético, \vec{J}_{tot} es la densidad total de corriente, ρ_{tot} es la densidad total de carga, ϵ_0 es la permitividad eléctrica del vacío y μ_0 es la permeabilidad magnética del vacío.

Existen dos tipos de plasmones: el de bulto y los de superficie [25]. El plasmón de bulto está asociado a la oscilación de los electrones dentro del material (suponiendo que no existe ninguna interfaz) y está caracterizado por la frecuencia de plasma, ω_p , dada por

$$\omega_p^2 = \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m^*},$$

donde N es la densidad electrónica, e es la carga eléctrica del electrón, ϵ_0 es la permitividad eléctrica del vacío y m^* es la masa efectiva de los electrones. Si una onda EM transversal tiene asociada una $\omega < \omega_p$, la onda EM no puede propagarse por el material y se genera una onda evanescente dentro del mismo. Por otra parte, para $\omega > \omega_p$ la onda EM transversal sí se puede propagar a través del material. [26].

Dentro de los plasmones de superficie (que existe una infinidad) existen los localizados en NPs [2] y los propagantes en interfaces (polaritones) [27]. En esta tesis se estudiará la respuesta óptica de NPs metálicas, cuyas dimensiones son del orden o en general inferiores a la longitud de onda de la luz incidente, en las que se presentan resonancias plasmónicas localizadas de superficie. Si una onda EM se propaga a través de una NP metálica pequeña (comparada con la longitud de onda de la luz incidente), el campo eléctrico polariza al gas de electrones [ver Fig. I.1] y junto con la fuerza restauradora y la geometría de la NP (que determina las condiciones de contorno para los campos EMs), aparecen frecuencias de resonancia a las cuales los electrones perturbados se mueven de manera armónica y de forma colectiva, a las que se denominan como resonancias plasmónicas de superficie localizadas [2], las cuales determinan las propiedades ópticas de las NPs.

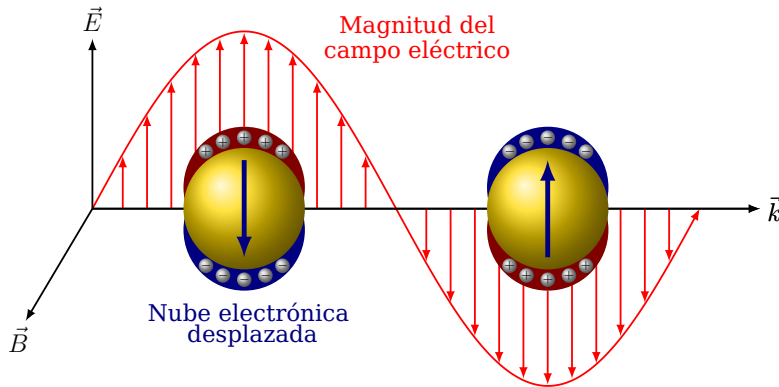


Figura I.1: Resonancia plasmónica de superficie localizada. El esquema muestra cómo una onda EM pasa a través de una NP metálica. El campo eléctrico inducido crea una separación de carga en los átomos, creando una nube electrónica desplazada que oscila a la frecuencia de resonancia.

Típicamente, en la plasmónica se utilizan principalmente materiales como el oro y la plata, y en los últimos años se ha desarrollado investigación en estructuras y dispositivos basados en plasmones de

superficie empleando estos materiales. Sus propiedades ópticas permiten una amplia gama de aplicaciones prácticas que incluyen guiado de ondas EMs y manipulación a la nanoescala [28], biodetección a nivel de una sola molécula [29], transmisión óptica mejorada a través de aberturas de sub-longitud de onda [30] e imágenes ópticas de alta resolución por debajo del límite de difracción [31].

I.I.I. Plasmón de superficie: Breve reseña histórica

Antes de que se realizara investigación sobre las propiedades ópticas en nanoestructuras metálicas, se tienen registros antiguos (desde de la época de los egipcios) sobre el uso de NPs metálicas (oro y plata) que se usaron para ornamentar vasijas y utensilios de la época. Más recientemente, existían personas que se dedicaban a generar agentes de tinción usando NPs para obtener colores intensos y vibrantes en artículos de vidrio y ventanas de iglesias [2, 29]. Uno de los objetos más famosos es la copa de Licurgo [ver Figs. I.2(a) y I.2(b)], que data del Imperio Bizantino (siglo IV), creada por artistas romanos y que hoy en día se muestra en el Museo Británico de Londres, Reino Unido. Cuando la copa es iluminada con una fuente de luz blanca al interior y exterior, ésta muestra un color rojo y verde, respectivamente (dicroísmo). Durante mucho tiempo no quedó claro qué causaba estos colores, pero actualmente se sabe que se deben a partículas de oro y plata de tamaño nanométrico incrustadas en el vidrio. Asimismo, en la época del medievo, el centro “tecnológico” de artículos de vidrio y ventanas de iglesias estaba justo en Troyes, Francia, en donde se encuentra la catedral de San Pedro y San Pablo (siglo XIII – XVII), la cual fue construida con una variedad de estilos góticos y cuenta con alrededor de 180 vidrieras, cuyos colores también se deben a la presencia de nanopartículas [ver Fig. I.2(c)].

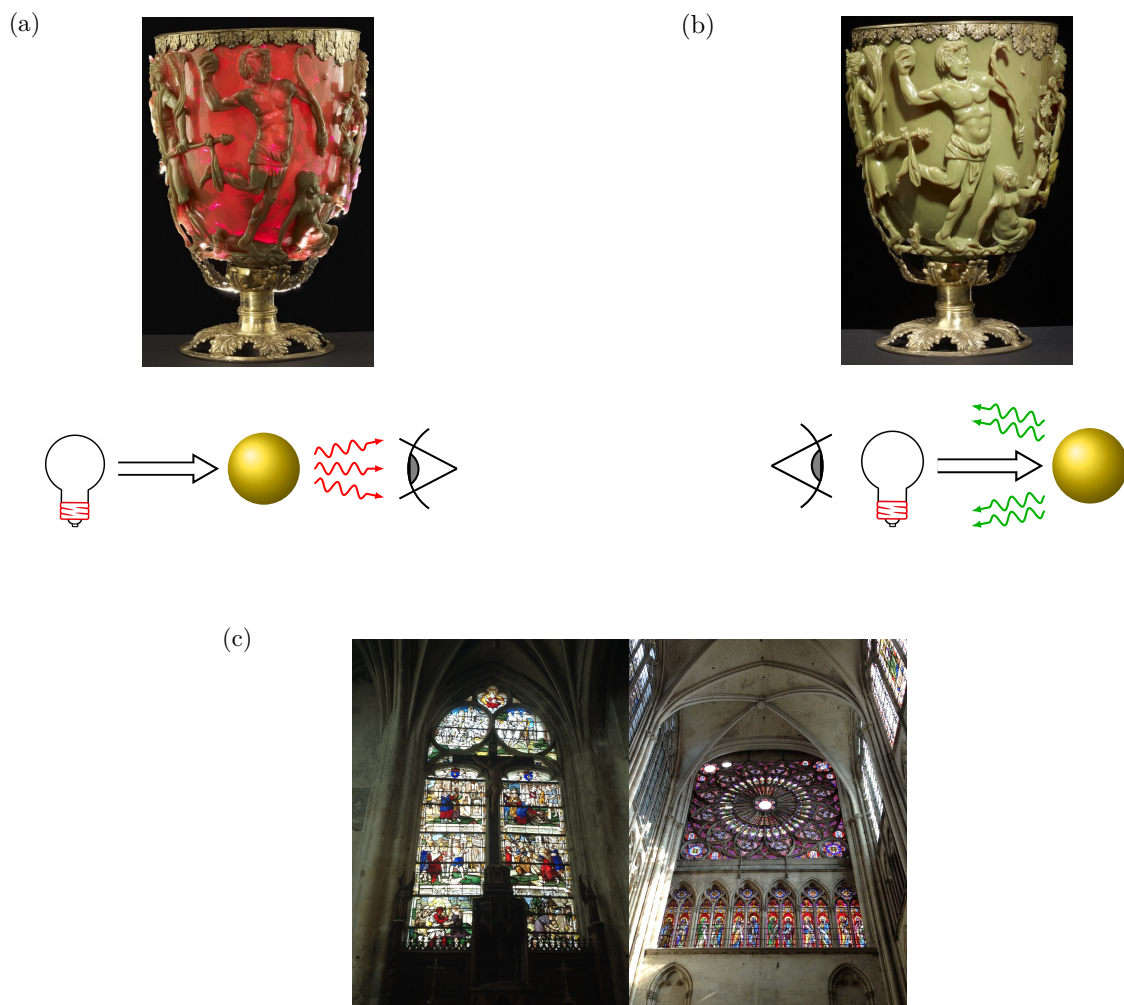


Figura I.2: (a) y (b) Antigua copa de Licurgo iluminada por una fuente de luz blanca al (a) interior y (b) exterior. La absorción de luz por las partículas de oro incrustadas en la copa conduce a un color: (a) rojo brillante de la luz transmitida y (b) color verde intenso producido por el esparcimiento de las partículas (reflexión). (c) Coloridos vitrales en la Catedral de Troyes, Francia, dedicada a San Pedro y San Pablo. Fotografía de la copa de Licurgo tomada del sitio: https://www.britishmuseum.org/research/collection_online/ (Acceso en línea: 31–Octubre–2018).

Uno de los primeros estudios científicos en el que se observaron plasmones de superficie fue a principios del siglo XX. En el año 1902, el profesor Robert W. Wood observó múltiples características inexplicables en las mediciones de reflexiones ópticas en rejillas metálicas [32]. Dos años después, Maxwell Garnett describió los colores brillantes observados en vidrios dopados con un material metálico [33] utilizando la teoría de metales desarrollada por Paul Drude [34] y las propiedades EMs de pequeñas esferas derivadas por Lord Rayleigh [35]. Para el año de 1908, Gustav Mie² desarrolló su propia teoría para el esparcimiento de luz en partículas esféricas [38]. Cincuenta años después, en 1956, David Pines describió teóricamente las pérdidas de energía características experimentadas por los electrones rápidos que viajan a través de los metales, y atribuye estas pérdidas a las oscilaciones colectivas de electrones libres en el metal [39]. En analogía a las oscilaciones de plasma en las descargas de gases, David Pines y David Bohm llama a estas oscilaciones *plasmones* [40]. En ese mismo año, Robert Fano introduce el término *polaritón* para la oscilación acoplada de electrones unidos y luz dentro de medios transparentes. En el año 1970, Uwe Kreiberg y Peter Zacharias realizaron un estudio en el que compararon las respuestas ópticas y electrónicas de nanopartículas de oro y plata. En su trabajo, por primera vez, describieron las propiedades ópticas de nanopartículas metálicas en términos de plasmones de superficie [41]. Cuatro años después, Stephen Cunningham y colaboradores introdujeron el término de *plasmones polaritones de superficie* (SPP) [42].

I.II. Resonancia magnética nuclear

La resonancia magnética (RM) se basa en la medición de las señales de resonancia magnética nuclear³ (RMN) de los protones de agua (H_2O). La imagen por resonancia magnética (IRM) es una técnica no invasiva que se ha aplicado ampliamente para diagnóstico clínico de tejidos malignos [1]. La calidad de las imágenes de una RMN es la clave para la detección temprana y ubicación precisa de cáncer.

Para la generación de señales de RM, se sitúa un paciente en un campo magnético externo (\vec{B}_0) oscilante en el tiempo (entre 1.5 y 3 Teslas). El cuerpo humano está compuesto por un 50 a 75% de agua (dependiendo de las diferentes etapas de la vida [46]), la cual está constituida por dos moléculas de hidrógeno y una de oxígeno. El átomo de hidrógeno consiste en un protón en el núcleo con un sólo electrón, el cual para el principio de RMN no se toma en cuenta. Mediante el campo magnético externo, el espín de los protones (con orientación al azar inicialmente) de los tejidos se orientan, en su gran mayoría, paralelamente al campo magnético externo (magnetización longitudinal).

Lo que determina la orientación del espín del protón es la cantidad de energía asociada a cada uno. Los protones con energía extra, se alinean en dirección contraria al campo magnético externo y por lo cual se considera que están en un estado de energía alto, y aquellos que se alinean al campo magnético externo se encuentran en un estado de energía bajo. Los protones no solamente se alinean en dirección o en contra del campo magnético externo, sino que también tienen un movimiento de precesión que se puede calcular mediante la ecuación de frecuencia de Larmor [1].

Bajo una magnetización longitudinal, se emiten pulsos de radiofrecuencia adecuados para los tejidos, de forma que la duración de los pulsos determine una variación de la orientación del espín del protón en el nivel de energía más bajo al más alto, reduciendo la magnetización longitudinal casi a cero. A esta modificación se le denomina magnetización transversal. Al desconectar los pulsos de radiofrecuencia, los protones regresarán a su posición de referencia, reduciendo la magnetización transversal, que permanece sólo un determinado tiempo medible (señal sinusoidal amortiguada, *free induction decay*, FID). Dicho lapso de tiempo depende de la homogeneidad del campo magnético externo y del tipo de tejido, denominado tiempo de relajación *espín-espín* (T_2), ya que se relaciona con la interacción misma del espín del protón, en donde no hay transferencia neta de energía durante este tiempo de relajación. En la realidad, los protones se desfazan mucho más rápido que T_2 , por las heterogeneidades en el campo magnético. A la combinación de heterogeneidades en campo magnético y el tiempo de relajación T_2 se le conoce como T_2^* . Existe otro tiempo de relajación, que ocurre cuando los protones regresan del nivel de energía más alto al más bajo. Conforme esto ocurre, la energía que había sido absorbida previamente por los protones es disipada en los alrededores de los tejidos en forma de calor, en donde ocurre una transferencia de energía,

²Mie no fue la primera persona en resolver el problema de esparcimiento de una esfera homogénea e isotrópica. Sería más correcto decir que él fue el último. Él dio su propia solución usando una notación moderna y también la aplicó a un problema real: los colores de un coloide de oro. Por esta razón, su nombre fue agregado al problema de esparcimiento de una esfera, aún cuando él tuvo ilustres predecesores, los más notables: Ludvig V. Lorenz [36] (no confundir con Hendrik A. Lorentz) y Peter Debye [37].

³El fenómeno físico de la resonancia magnética nuclear fue observado por primera vez en 1946 por los científicos: F. Bloch [43, 44] y E. M. Purcell [45], de manera independiente.

y la orientación del espín será nuevamente paralela al campo magnético externo, incrementado la magnetización longitudinal original. A este lapso tiempo se le conoce como tiempo de relajación *espín-red* (T_1).

La intensidad de la última señal de radiofrecuencia detectada por el escáner de IRM está determinada por los tiempos de relajación T_1 y T_2 , y a su vez por el número de espines de protones alineados en el tejido. La intensidad de la señal depende principalmente de los diferentes tejidos, aparte de los tiempos de relajación y de la concentración de núcleos (densidad de protones). La ordenación espacial de señales registradas en una prueba son resultado de una codificación de frecuencias y de fases de las señales de RM. Mediante esta ordenación espacial se puede obtener finalmente una imagen matriz con una escala codificada de grises.

El contraste en la IRM depende de la densidad de protones, del tiempo de relajación *espín-red* (T_1) y tiempo de relajación *espín-espín* (T_2). Ya que se desea mejorar el contraste en la IRM, se utilizan los llamados medios o agentes de contraste. La exploración dinámica con contraste, con secuencias de eco de gradiente rápidas, pueden ser de ayuda en la diferenciación entre tumores malignos y benignos [20]. En gran medida, los agentes de contraste son suspensiones de nanopartículas (NPs) paramagnéticas o superparamagnéticas, las cuales no generan señales en la RMN pero influyen en el tiempo de relajación de los protones cercanos alterando los campos magnéticos locales. Debido a sus características únicas superparamagnéticas, las NPs magnéticas son comúnmente utilizadas como agentes de mejora de contraste [21,22,47] en aplicaciones de IRM. En su mayoría, los materiales superparamagnéticos presentan un mayor efecto de relajación (por la cantidad de hierro) que partículas ferromagnéticas [48].

I.III. Nanopartículas tipo *core-shell* y sus aplicaciones biomédicas

Los materiales a escala nanométrica son un tema de interés en diversas áreas de la ciencia [49], ingeniería [50] y disciplinas biomédicas [18,22]. La razón fundamental se debe a que los materiales nanométricos, esencialmente entre 1 y 100 nm, presentan una estructura y propiedades funcionales diferentes a los materiales de bulto. En aplicaciones biomédicas, existen dos tipos importantes de NPs que se han estudiado [49,50], diseñado, sintetizado y caracterizado [51,52], y éstos se han aplicado a diversos estudios [53,54]: NPs metálicas (plasmónicas) [49,50,55] y NPs magnéticas [18,56–58]. Generalmente las NPs metálicas se encuentran compuestas por metales nobles tales como oro (Au) y plata (Ag). Estas NPs presentan resonancias plasmónicas de superficie localizadas (LSPR) [3], que son oscilaciones colectivas de los electrones de conducción de las NPs en resonancia con el campo eléctrico de la luz incidente. Al emplear NPs de Au se tiene una mayor estabilidad bajo condiciones ambiente y ajustando su tamaño, forma o estructura [59] se puede sintonizar su resonancia plasmónica dipolar en el infrarrojo cercano (NIR) del espectro electromagnético [21,53], donde el rango (650 – 900 nm) óptico de absorción del tejido de la piel es mínima y la transmisión óptica (penetración) es óptima [24]. Las NPs magnéticas más comunes están compuestas por óxidos de hierro (IO), cobalto (Co) o níquel (Ni), y su composición química muestra alineación de su momento magnético en presencia de un campo magnético externo y concentra el campo magnético [58]. Estas propiedades hacen que las NPs magnéticas sean candidatas a diversas aplicaciones como IRM [56] y tratamiento de cáncer por hipertermia (la hipertermia puede ser inducida por NPs irradiadas con láser en el infrarrojo cercano) [18]. Sin embargo, tanto las NPs magnéticas como las metálicas presentan limitaciones, como por ejemplo las NPs metálicas carecen de viabilidad para distinguir un analito, que es un compuesto usualmente requerido para el análisis de moléculas atípicas o células en un entorno complejo [61], mientras que las NPs magnéticas son ineficientes para generar energía térmica y eliminar células [57], ya que la forma en que operan las NPs magnéticas es a través de las corrientes inducidas al someterlas a un campo magnético externo oscilante en el tiempo. Por lo tanto, sería mucho más eficiente emplear NPs metálicas, así que si se construyen NPs tipo *core-shell* con componentes magneto/metálicas, se tendría la posibilidad de mantener una parte magnética (permitiendo el contraste en RMN) y una contraparte metálica, en la que es posible excitar plasmones de superficie localizados [2], generando calor en la vecindad de las NPs por medio de la concentración de campo eléctrico cercano, si se iluminan las NPs a una frecuencia adecuada [3]. Una vez funcionalizadas las NPs, sería posible eliminar células malignas del tejido de la piel de manera eficiente y selectiva.

Una NP magnético/metálica tipo *core-shell* es una NP que presenta un núcleo hecho de algún material magnético ya sea IO, Co, Ni o algún otro óxido, y una capa exterior de otro material metálico como Au o Ag (o viceversa), de tal forma que la nanopartícula tenga una componente magnética y otra

metálica. No obstante, las NPs de óxido de hierro en el núcleo y con cascarón de oro se han convertido en la combinación ideal por sus notables ventajas [22, 60–63], ya que por un lado una NP compuesta por óxidos de hierro es estable, sencilla de sintetizar y funciona como agente de contraste [18, 52, 57, 58], por otro lado una NP con componente metálico ofrece excelente estabilidad [21, 53, 54].

Una clave para las aplicaciones tecnológicas es la síntesis de NP de alta calidad con propiedades magnéticas y ópticas deseadas, ajustando con precisión ya sea el tamaño del núcleo o el grosor de la capa, así como la forma geométrica del núcleo o capa [60, 62–64]. Asimismo, se han realizado estudios teóricos (extendiendo la solución de Mie a un sistema esférico multicapa) y experimentales sobre las propiedades magnéticas y ópticas de NPs magnético/metálicas esféricas tipo *core-shell* [60, 62], donde las propiedades plasmónicas están influenciadas por la alta constante dieléctrica del núcleo nanocrystalino de óxido de hierro. Además, se han hecho análisis teóricos para identificar si las propiedades dieléctricas del núcleo magnético de óxidos de hierro influyen directamente al comportamiento plasmónico de la NP tipo *core-shell*. Esta área se ha bautizado como *magneto-plasmónica* [65].

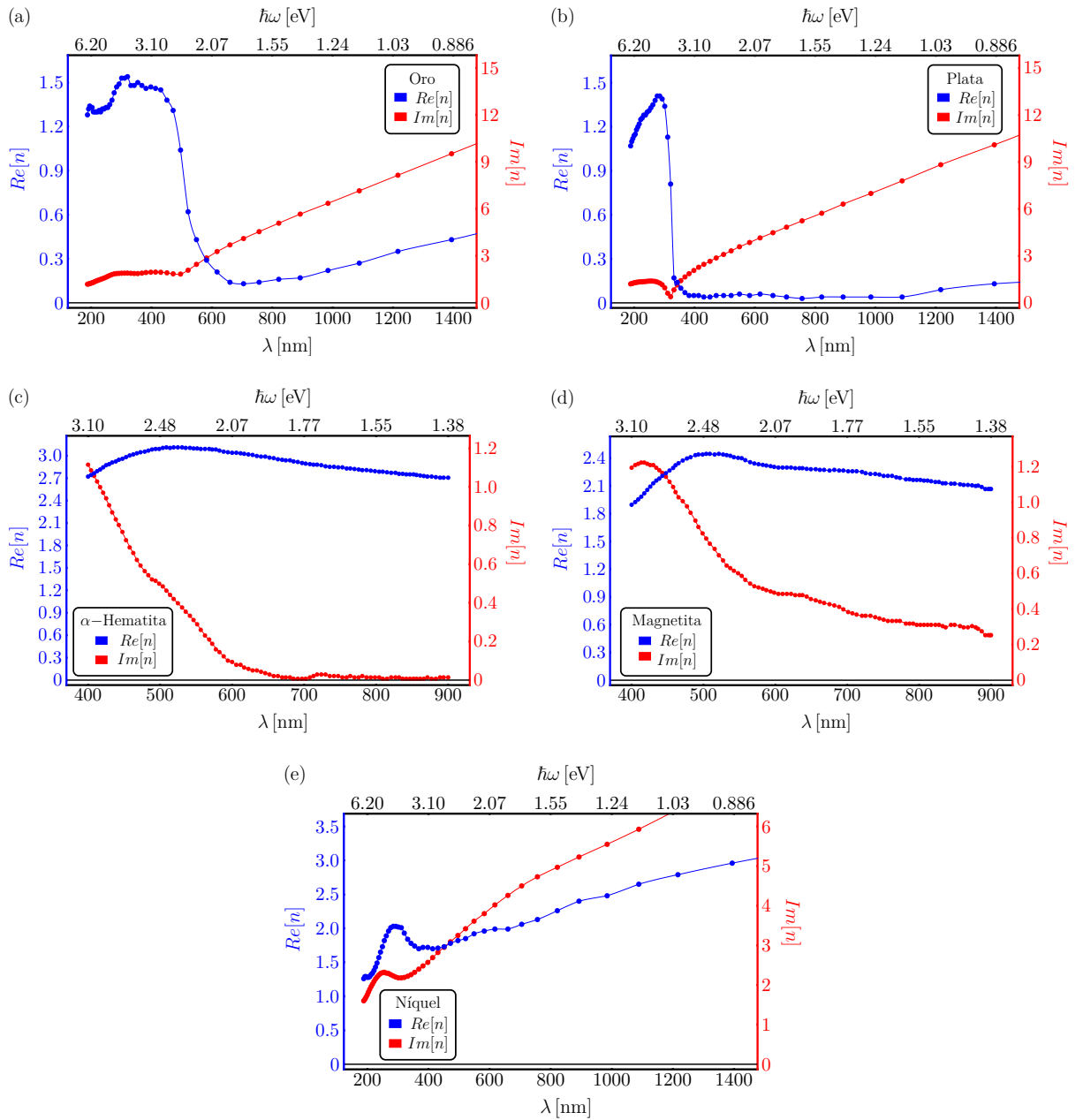


Figura I.3: Parte real e imaginaria del índice de refracción del (a) Au, (b) Ag, (c) α -hematita, (d) magnetita y del (e) Ni, en función tanto de la longitud de onda del haz incidente (escala inferior) como de la frecuencia (escala superior). Los círculos representan los datos experimentales de las referencias [67–70] y la línea continua es la interpolación generada a partir de los datos experimentales.

En 2006, P. Norlander y colaboradores reportaron la síntesis de NPs magnético/metálicas elipsoidales prolato tipo *core-shell*, llamándolas *nanorice*, utilizando el método de sembrado y crecimiento del Au [64]. En sus estudios, el largo del *nanorice* fue de 340 nm y el ancho de 54 nm, y el grosor de la capa fue de 13 nm. El *nanorice* estaba constituido por un núcleo monodisperso de hematita (con una función dieléctrica constante $\varepsilon_C = 9.5$) y un cascarón de Au. La geometría del *nanorice* de hematita/Au combina las propiedades ópticas de nanovarillas y nanoesferas en la región del NIR, haciéndolos candidatos prometedores para aplicaciones biomédicas.

A partir de los trabajos antes mencionados [60, 62, 64], se espera que al emplear NPs elipsoidales, se podría obtener sensibilidad a la polarización de la onda incidente, así como control sobre las zonas de amplificación de campo eléctrico y mayor control sobre las excitaciones plasmónicas al tener una respuesta diferente para cada polarización: longitudinal y transversal [9]. Asimismo, es cierto que una NP esférica tiene mayor probabilidad de entrar en una célula en comparación de una elipsoidal, pero con una NP elipsoidal se tendrían mayor área de contacto con alguna membrana celular receptora (por ejemplo células cancerosas) que una NP esférica [54]. Una restricción para las posibles aplicaciones biomédicas, es que las dimensiones de una NP deben de ser menores a 200 nm [66].

En esta tesis se propone emplear NPs elipsoidales con una parte metálica, adicional a la componente magnética, que permita disminuir aún más la energía suministrada y que amplifique el calor (debido a la amplificación del campo eléctrico cercano en la NP) en una región de tamaño nanométrico por medio de la excitación de LSPR. Los LSPR están fuertemente determinadas por la geometría y dimensiones de las nanopartículas, así como del medio material del núcleo y de la capa en las nanopartículas tipo *core-shell*, por lo que es posible la sintonización de las nanopartículas por medio del diseño de la geometría. Los materiales considerados para la parte metálica fueron Au y Ag [67] [sus índices de refracción se muestran en las Figs. I.3(a) y I.3(b)], mientras que para la parte magnética fueron α -hematita ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) [68], magnetita (Fe_3O_4) [69] y Ni [70] [sus índices de refracción se muestran en las Figs. I.3(c), I.3(d) y I.3(e)].

Capítulo 1

Esparcimiento y absorción de ondas electromagnéticas por partículas esféricas

1.1. Solución exacta: Solución de Mie

La teoría de Mie¹ es la solución exacta que dio Gustav Mie en 1908 a las ecuaciones de Maxwell para el problema de esparcimiento de una onda electromagnética monocromática plana por una esfera homogénea e isotrópica de radio a [38] [ver Fig. 1.1]. La idea general es dividir el espacio en dos regiones: dentro de la partícula y el medio que rodea a la partícula (matriz). Se proponen soluciones para los campos eléctrico y magnético, tanto adentro como afuera, en términos de una base esférica (armónicos esféricos vectoriales), cuyos coeficientes de expansión se determinan al imponer condiciones de contorno de los campos EMs sobre la superficie de la partícula.

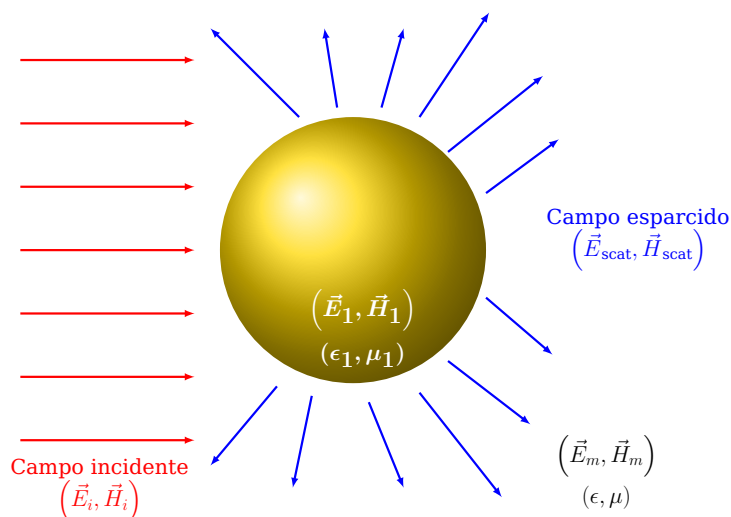


Figura 1.1: Partícula esférica iluminada por una onda electromagnética plana y monocromática, que genera campo EM tanto dentro (campo interno: \vec{E}_1 y \vec{H}_1) como afuera (campo esparcido: \vec{E}_{scat} y \vec{H}_{scat}) de la partícula.

El campo EM dentro de la partícula se denota como \vec{E}_1 y \vec{H}_1 (ver Fig 1.1), mientras que el campo eléctrico y magnético total al exterior de la partícula (\vec{E}_m, \vec{H}_m) está dado por la superposición del campo incidente (\vec{E}_i, \vec{H}_i) más el campo esparcido ($\vec{E}_{scat}, \vec{H}_{scat}$) por la partícula, es decir

$$\vec{E}_m = \vec{E}_i + \vec{E}_{scat} \quad \text{y} \quad \vec{H}_m = \vec{H}_i + \vec{H}_{scat},$$

con el campo incidente dado por

$$\vec{E}_i = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad \text{y} \quad \vec{H}_i = \vec{H}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)},$$

¹En realidad debería ser llamada la “solución de Mie” a las ecuaciones de Maxwell para el problema de interacción de una onda EM monocromática plana con una partícula esférica.

donde \vec{k} es el vector de propagación de la onda EM, ω su frecuencia, t el tiempo y \vec{r} el vector de posición de un punto en el espacio. Se requiere que los campos totales dentro y fuera de la partícula cumplan las condiciones de frontera (es decir, que las componentes tangenciales del campo eléctrico a la superficie de la esfera son continuos al atravesarla)

$$\left(\vec{E}_m - \vec{E}_1\right)\Big|_{r=a} \times \hat{n} = \left(\vec{H}_m - \vec{H}_1\right)\Big|_{r=a} \times \hat{n} = 0, \quad (1.1)$$

donde los subíndices 1 y m se refieren a las regiones interna y externa de la esfera, respectivamente [ver Fig. 1.1]; a es el radio de la partícula y \hat{n} define un vector normal dirigido hacia el exterior de la superficie de la partícula. Para campos armónicos en el dominio de la frecuencia, ω , y en ausencia de cargas y corrientes, los campos \vec{E} y \vec{H} tienen divergencia nula

$$\nabla \cdot \vec{E} = 0 \quad \text{y} \quad \nabla \cdot \vec{H} = 0, \quad (1.2)$$

y además \vec{E} y \vec{H} no son independientes, pues

$$\nabla \times \vec{E} = i\omega\mu\vec{H} \quad \text{y} \quad \nabla \times \vec{H} = -i\omega\mu\vec{E}. \quad (1.3)$$

En la Fig. 1.1 se ejemplifica la situación general del problema de esparcimiento, es decir, la interacción de una partícula esparcidora con una onda EM monocromática plana. La solución de este problema se reduce a resolver las ecuaciones de onda *vectoriales* para el campo electromagnético (\vec{E}, \vec{H}) , es decir, las ecuaciones vectoriales de Helmholtz homogéneas (sin fuentes), dadas por

$$\nabla^2 \vec{E} + k^2 \vec{E} = 0 \quad (1.4)$$

y

$$\nabla^2 \vec{H} + k^2 \vec{H} = 0, \quad (1.5)$$

donde $k^2 = \omega^2 \epsilon \mu$, ω es la frecuencia angular, ϵ es la permitividad eléctrica o función dieléctrica, y μ es la permeabilidad magnética.

A partir de la ec. (1.2), se puede inferir que los campos \vec{E} y \vec{H} se pueden escribir a partir del rotacional del producto de un radio vector (función vectorial) \vec{r} con una función escalar ψ , es decir, se puede construir una función vectorial \vec{M} de la forma

$$\vec{M} = \nabla \times (\vec{r}\psi), \quad (1.6)$$

por lo que \vec{M} tiene divergencia cero

$$\nabla \cdot \vec{M} = \nabla \cdot [\nabla \times (\vec{r}\psi)] = 0.$$

Asimismo, el laplaciano de \vec{M} está dado por

$$\nabla^2 \vec{M} = \nabla (\nabla \cdot \vec{M}) - \nabla \times (\nabla \times \vec{M}). \quad (1.7)$$

Aplicando el operador $[\nabla^2 + k^2]$ al campo \vec{M} y usando las ecs. (1.6) y (1.7) se obtiene

$$\begin{aligned} \nabla^2 \vec{M} + k^2 \vec{M} &= \nabla (\nabla \cdot \vec{M}) - \nabla \times (\nabla \times \vec{M}) + k^2 \vec{M} \\ &= -\nabla \times \{\nabla \times [\nabla \times (\vec{r}\psi)]\} + k^2 [\nabla \times (\vec{r}\psi)] \\ &= \nabla \times [-\nabla \times \nabla \times (\vec{r}\psi) + k^2 (\vec{r}\psi)] \\ &= \nabla \times \{\nabla^2 (\vec{r}\psi) - \nabla [\nabla \cdot (\vec{r}\psi)] + k^2 (\vec{r}\psi)\}. \end{aligned}$$

Notando que el rotacional de un gradiente es cero para funciones *suaves*,² la expresión anterior se reduce a

$$\nabla^2 \vec{M} + k^2 \vec{M} = \nabla \times [\nabla^2 (\vec{r}\psi) + k^2 (\vec{r}\psi)]. \quad (1.8)$$

²Sea $U \subset \mathbb{R}^n$ un abierto. Una función $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ es *suave* (o C^∞) si todas sus derivadas parciales, de cualquier orden, existen. El conjunto de las funciones suaves en U se denota por $C^\infty(U)$ [71].

Cambiando $\nabla^2(\vec{r}\psi)$ a su notación de índices, se obtiene

$$\begin{aligned}\nabla^2(\vec{r}\psi) &= \frac{\partial^2(r_i\psi)}{\partial r_j\partial r_j} = \frac{\partial}{\partial r_j} \left(\frac{\partial r_i}{\partial r_j}\psi + r_i \frac{\partial\psi}{\partial r_j} \right) \\ &= \frac{\partial(\delta_{ij}\psi)}{\partial r_j} + \frac{\partial}{\partial r_j} \left(r_i \frac{\partial\psi}{\partial r_j} \right) \\ &= \delta_{ij} \frac{\partial\psi}{\partial r_j} + \delta_{ij} \frac{\partial\psi}{\partial r_j} + r_i \frac{\partial^2\psi}{\partial r_j\partial r_j} \\ &= 2\nabla\psi + \vec{r}(\nabla^2\psi),\end{aligned}$$

por lo que la ec. (1.8) se puede escribir como

$$\nabla^2\vec{M} + k^2\vec{M} = \nabla \times [\vec{r}(\nabla^2\psi + k^2\psi)]. \quad (1.9)$$

Por lo tanto \vec{M} satisface la ecuación de Helmholtz *vectorial* si ψ es solución de la ecuación de Helmholtz *escalar*

$$\nabla^2\psi + k^2\psi = 0. \quad (1.10)$$

A partir de \vec{M} se define otra función vectorial \vec{N} , tal que

$$\vec{N} = \frac{\nabla \times \vec{M}}{k}, \quad (1.11)$$

de modo que si se aplica el operador $[\nabla^2 + k^2]$ al campo \vec{N} y considerando la ec. (1.7), \vec{N} satisface la ecuación de Helmholtz *vectorial*, ya que

$$\begin{aligned}\nabla^2\vec{N} + k^2\vec{N} &= \nabla^2 \left(\frac{\nabla \times \vec{M}}{k} \right) + k^2 \left(\frac{\nabla \times \vec{M}}{k} \right) \\ &= \frac{1}{k} \left\{ \nabla \left[\nabla \cdot (\nabla \times \vec{M}) \right] - \nabla \times \nabla \times (\nabla \times \vec{M}) + k^2 (\nabla \times \vec{M}) \right\},\end{aligned} \quad (1.12)$$

pero el primer término del lado derecho de la ec. (1.12) es igual a cero ya que la divergencia del rotacional de una función vectorial es cero. Como $\nabla \cdot \vec{M} = 0$ entonces $\nabla(\nabla \cdot \vec{M}) = \vec{0}$, por lo cual la ec. (1.12) se reduce a

$$\begin{aligned}\nabla^2\vec{N} + k^2\vec{N} &= \frac{1}{k} \left\{ \nabla \times \left[\nabla(\nabla \cdot \vec{M}) - \nabla \times (\nabla \times \vec{M}) + k^2\vec{M} \right] \right\} \\ &= \frac{1}{k} \left[\nabla \times (\nabla^2\vec{M} + k^2\vec{M}) \right] \\ &= \frac{1}{k} \left\{ \nabla \times \nabla \times [\vec{r}(\nabla^2\psi + k^2\psi)] \right\},\end{aligned}$$

por lo tanto como \vec{M} satisface la ec. de Helmholtz, entonces también \vec{N} cumple la ecuación de Helmholtz *vectorial* homogénea

$$\nabla^2\vec{N} + k^2\vec{N} = 0. \quad (1.13)$$

Se ha mostrado que tanto los campos \vec{M} y \vec{N} satisfacen la ecuación de Helmholtz *vectorial* y además el rotacional de \vec{M} es proporcional a \vec{N} . Entonces se puede intuir que el rotacional de \vec{N} es proporcional a \vec{M} , ya que al aplicar el rotacional de \vec{N} de la ec. (1.11) se obtiene

$$\nabla \times \vec{N} = \nabla \times \left(\frac{\nabla \times \vec{M}}{k} \right) = \frac{1}{k} \left[\nabla(\nabla \cdot \vec{M}) - \nabla^2\vec{M} \right] = -\frac{1}{k}\nabla^2\vec{M} = -\frac{1}{k}(-k^2\vec{M}),$$

entonces

$$k\vec{M} = \nabla \times \vec{N}.$$

De lo anterior, se tiene que las funciones vectoriales \vec{M} y \vec{N} cumplen todas las propiedades de un campo electromagnético: satisfacen la ecuación de Helmholtz *vectorial*, a su vez $\nabla \cdot \vec{M} = \nabla \cdot \vec{N} = 0$, el rotacional de \vec{M} es proporcional a \vec{N} , y así como el rotacional de \vec{N} es proporcional a \vec{M} .

Considerando el caso de esparcimiento de una onda EM monocromática plana por una partícula esférica, es conveniente elegir un sistema de coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) (ver Fig. 1.2). En este caso, tanto

\vec{M} como \vec{N} representan las soluciones fundamentales a las ecuaciones vectoriales de Helmholtz [ecs. (1.4) y (1.5)] para ondas transversales.³ Es interesante notar que \vec{M} es tangencial en todas partes a cualquier esfera con $|\vec{r}| = r$, es decir, que $\vec{r} \cdot \vec{M} = 0$.

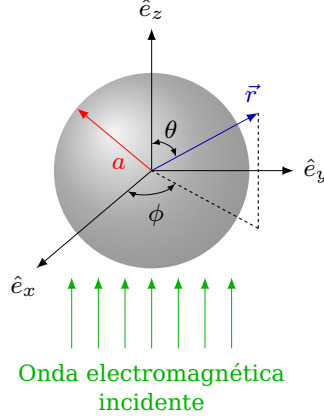


Figura 1.2: Sistema de coordenadas esféricas centrada en la partícula esférica de radio a . El vector de onda incidente (flechas verdes) se escoge en la dirección \hat{e}_z y campo eléctrico incidente tendrá dirección paralela a \hat{e}_x .

Para que \vec{M} y \vec{N} sean solución de la ec. de Helmholtz vectorial, es necesario que ψ satisfaga la ec. de Helmholtz escalar, que en coordenadas esféricas⁴ está dada por [4]

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right) + k^2 \psi = 0. \quad (1.14)$$

Se propone una solución separable a la ec. (1.14) de la forma

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi), \quad (1.15)$$

que al sustituirla en la ec. (1.14), se obtienen las siguientes tres ecuaciones diferenciales ordinarias

$$\frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} + m^2 \Phi = 0, \quad (1.16a)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta = 0, \quad (1.16b)$$

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + [k^2 r^2 - n(n+1)] R = 0, \quad (1.16c)$$

donde las constantes de separación m y n se determinan a partir de condiciones de frontera que ψ debe satisfacer. Entonces es suficiente sólo considerar la ortogonalidad de los polinomios de Legendre, a los enteros positivos de m , ya que se pueden generar todas las soluciones linealmente independientes de (1.16a) y el cálculo de integrales que se requieren para expresar una onda plana en armónicos esféricos.

A la función ψ , compuesta por el producto de las funciones R , Θ y Φ que resuelven las ecuaciones diferenciales ordinarias (1.16a–1.16c), se le conoce como función generadora⁵ de los armónicos esféricos vectoriales, la cual satisface la ecuación de Helmholtz escalar en coordenadas esféricas. Las soluciones para las funciones R , Θ y Φ son las funciones esféricas de Bessel, los polinomios asociados de Legendre y las funciones seno y coseno, respectivamente.

La función ψ que satisface la ecuación de Helmholtz [ec. (1.10)] en coordenadas esféricas puede separarse en una parte par ψ_{emn} y otra impar ψ_{omn} :

$$\psi_{emn} = \cos(m\phi) P_n^m(\cos \theta) z_n^{(j)}(kr), \quad (1.17a)$$

$$\psi_{omn} = \sin(m\phi) P_n^m(\cos \theta) z_n^{(j)}(kr), \quad (1.17b)$$

³Una base completa incluye a otro armónico esférico vectorial L definido como $L = \nabla \psi / k$ [72].

⁴En la referencia [4], hay un error en la ec. (4.2), en el tercer término correspondiente a la variable ϕ . El denominador debería ser igual a $1/(r^2 \sin^2 \theta)$ en lugar de $1/(r^2 \sin \theta)$.

⁵En esta tesis se omitirán los detalles sobre las propiedades de cada una de las soluciones a las ecs. (1.16a)–(1.16c). Los detalles pueden ser consultados en [4], donde se considera la solución general.

donde el superíndice $j = 1, 2$ denota las funciones esféricas de Bessel de primer o segundo tipo [4, 73], respectivamente,

$$z_n^{(1)}(kr) = j_n(kr) \quad \text{y} \quad z_n^{(2)}(kr) = y_n(kr),$$

y el superíndice $j = 3, 4$ denota las funciones esféricas de Bessel de tercer o cuarto tipo [4, 73] (también conocidas como funciones esféricas de Hankel), respectivamente,

$$z_n^{(3)}(kr) = h_n^{(1)}(kr) = j_n(kr) + iy_n(kr) \quad \text{y} \quad z_n^{(4)}(kr) = h_n^{(2)}(kr) = j_n(kr) - iy_n(kr).$$

Los armónicos esféricos vectoriales generados por ψ_{emn} y ψ_{omn} se obtienen a partir de

$$\vec{M}_{emn} = \nabla \times (\vec{r} \psi_{emn}), \quad \vec{M}_{omn} = \nabla \times (\vec{r} \psi_{omn}), \quad (1.18a)$$

$$\vec{N}_{emn} = \frac{\nabla \times \vec{M}_{emn}}{k} \quad \text{y} \quad \vec{N}_{omn} = \frac{\nabla \times \vec{M}_{omn}}{k}, \quad (1.18b)$$

donde los armónicos esféricos vectoriales \vec{M}_{omn} , \vec{M}_{emn} , \vec{N}_{omn} y \vec{N}_{emn} se expresan en coordenadas esféricas de la siguiente manera

$$\vec{M}_{emn} = \frac{-m}{\sin \theta} \sin(m\phi) P_n^m(\cos \theta) z_n(\rho) \hat{e}_\theta - \cos(m\phi) \frac{dP_n^m(\cos \theta)}{d\theta} z_n(\rho) \hat{e}_\phi, \quad (1.19)$$

$$\vec{M}_{omn} = \frac{m}{\sin \theta} \cos(m\phi) P_n^m(\cos \theta) z_n(\rho) \hat{e}_\theta - \sin(m\phi) \frac{dP_n^m(\cos \theta)}{d\theta} z_n(\rho) \hat{e}_\phi, \quad (1.20)$$

$$\begin{aligned} \vec{N}_{emn} &= \frac{z_n(\rho)}{\rho} \cos(m\phi) n(n+1) P_n^m(\cos \theta) \hat{e}_r \\ &+ \cos(m\phi) \frac{dP_n^m(\cos \theta)}{d\theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_n(\rho)] \hat{e}_\theta - m \sin(m\phi) \frac{P_n^m(\cos \theta)}{\sin \theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_n(\rho)] \hat{e}_\phi, \end{aligned} \quad (1.21)$$

$$\begin{aligned} \vec{N}_{omn} &= \frac{z_n(\rho)}{\rho} \sin(m\phi) n(n+1) P_n^m(\cos \theta) \hat{e}_r \\ &+ \sin(m\phi) \frac{dP_n^m(\cos \theta)}{d\theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_n(\rho)] \hat{e}_\theta - m \cos(m\phi) \frac{P_n^m(\cos \theta)}{\sin \theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_n(\rho)] \hat{e}_\phi. \end{aligned} \quad (1.22)$$

La componente \hat{e}_r de las ecs. (1.19) y (1.20) ha sido simplificada usando el hecho de que P_n^m satisface la ec. (1.16b). Es importante recordar que cualquier función vectorial (transversal) que satisface la ecuación de Helmholtz vectorial [ec. (1.4) y (1.5)] en coordenadas esféricas, se puede expresar en términos de los armónicos esféricos vectoriales [ecs. (1.18)].

Considerando que la partícula esférica es iluminada por un campo electromagnético incidente polarizado en la dirección $\hat{e}_x (= \sin \theta \cos \phi \hat{e}_r + \cos \theta \cos \phi \hat{e}_\theta - \sin \phi \hat{e}_\phi)$

$$\vec{E}_i = E_0 e^{ikr \cos \theta} \hat{e}_x, \quad (1.23)$$

donde E_0 es la amplitud del campo eléctrico y k es la magnitud del vector de onda del haz incidente, el campo eléctrico incidente se puede expresar en términos de los armónicos esféricos vectoriales \vec{N} y \vec{M} , que contienen las funciones dadas en las ecs. (1.17a) y (1.17b), de la siguiente forma

$$\vec{E}_i = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=m}^{\infty} \left(B_{emn} \vec{M}_{emn} + B_{omn} \vec{M}_{omn} + A_{emn} \vec{N}_{emn} + A_{omn} \vec{N}_{omn} \right),$$

donde A_{emn} , A_{omn} , B_{emn} y B_{omn} son los coeficientes de la expansión [4]. Como el campo eléctrico incidente debe de ser finito en el origen y por la ortogonalidad de los armónicos esféricos vectoriales, la expresión anterior se reduce a [4]

$$\vec{E}_i = \sum_{n=1}^{\infty} \left(B_{o1n} \vec{M}_{o1n}^{(1)} + A_{e1n} \vec{N}_{e1n}^{(1)} \right), \quad (1.24)$$

donde el superíndice (1) en los armónicos esféricos vectoriales \vec{M} y \vec{N} denota que se emplea la función esférica de Bessel $j_n(\rho)$, con $\rho = kr$, para la parte radial de las funciones generadoras [ver ecs. (1.17a) y (1.17b)], asegurando que el campo eléctrico incidente sea finito en el origen. Para calcular el valor de los coeficientes de la expansión, se hace uso de las relaciones de recurrencia e identidades de las funciones

$z_n(\rho)$, así como de las funciones asociadas de Legendre $P_n^m(\cos\theta)$ [4]. Después de las consideraciones anteriores, la forma de los coeficientes de la expansión está dada por

$$B_{o1n} = i^n E_0 \frac{2n+1}{n(n+1)}$$

y

$$A_{e1n} = -iE_0 i^n \frac{2n+1}{n(n+1)},$$

por lo que se puede expresar el campo eléctrico incidente [ec. (1.24)] como [4]

$$\vec{E}_i = E_0 \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left(\vec{M}_{o1n}^{(1)} - i\vec{N}_{e1n}^{(1)} \right), \quad (1.25)$$

y el correspondiente campo magnético incidente [obtenido de la aplicación de la ley de Faraday–Lenz a la ec. (1.25)]

$$\vec{H}_i = -\frac{k}{\omega\mu} E_0 \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left(\vec{M}_{o1n}^{(1)} + i\vec{N}_{e1n}^{(1)} \right), \quad (1.26)$$

donde los subíndices omn y emn (es necesario que m sea igual a uno) en los armónicos esféricos vectoriales \vec{M} y \vec{N} indican la función generadora, ψ , de acuerdo a las ecs. (1.17a) y (1.17b). Para simplificar la notación, se define $E_n = i^n E_0 (2n+1)/n(n+1)$.

Al igual que los campos incidentes, tanto el campo esparcido ($\vec{E}_{\text{scat}}, \vec{H}_{\text{scat}}$) como el interno de la partícula (\vec{E}_1, \vec{H}_1), se pueden expandir en términos de los armónicos esféricos vectoriales. En la frontera entre la partícula esférica y el medio que la rodea (matriz), se impone la condición de frontera

$$\left(\vec{E}_i + \vec{E}_{\text{scat}} - \vec{E}_1 \right) \times \hat{e}_r = \left(\vec{H}_i + \vec{H}_{\text{scat}} - \vec{H}_1 \right) \times \hat{e}_r = 0. \quad (1.27)$$

Al aplicar las condiciones de frontera [ec. (1.27)], la ortogonalidad de los armónicos esféricos vectoriales y conociendo la expansión para el campo incidente [ec. (1.25)], se intuye la forma de construir la expansión del campo esparcido y el campo dentro de la partícula: los coeficientes en estas expansiones se eliminan para toda $m \neq 1$ [4]. El campo EM interno de la partícula (\vec{E}_1, \vec{H}_1) en donde las funciones esféricas de Bessel j_n son finitas (y_n divergen en el origen, por lo que no son aceptables físicamente), es [4, 5]

$$\vec{E}_1 = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left[c_n^{(1)} \vec{M}_{o1n}^{(1)} - i d_n^{(1)} \vec{N}_{e1n}^{(1)} \right] \quad (1.28)$$

y

$$\vec{H}_1 = -\frac{k_1}{\omega\mu_1} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left[d_n^{(1)} \vec{M}_{e1n}^{(1)} + i c_n^{(1)} \vec{N}_{o1n}^{(1)} \right]. \quad (1.29)$$

El campo esparcido se propone como

$$\vec{E}_{\text{scat}} = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left[i a_n \vec{N}_{e1n}^{(3)} - b_n \vec{M}_{o1n}^{(3)} \right] \quad (1.30)$$

y

$$\vec{H}_{\text{scat}} = -\frac{k}{\omega\mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left[i b_n \vec{N}_{o1n}^{(3)} + a_n \vec{M}_{e1n}^{(3)} \right], \quad (1.31)$$

donde el superíndice (3) en los armónicos esféricos vectoriales denota que la dependencia radial de la función generadora, ψ , está dada por la función esférica de Hankel⁶ $h_n^{(1)}$ y los coeficientes a_n y b_n son los

⁶Al analizar el comportamiento asintótico de las funciones $h_n^{(1)}(\rho)$ y $h_n^{(2)}(\rho)$ [4, 73]

$$h_n^{(1)}(\rho) \sim \frac{(-i)^n e^{ikr}}{i\rho}$$

y

$$h_n^{(2)}(\rho) \sim -\frac{i^n e^{-ikr}}{i\rho},$$

con $\rho \gg n^2$, se observa que $h_n^{(1)}(\rho)$ corresponde a una onda esférica *saliente*, mientras que $h_n^{(2)}(\rho)$ representa una *entrante*, en la región $\rho \gg 1$. Este comportamiento indica que la función radial necesaria para representar físicamente el campo esparcido es $h_n^{(1)}(\rho)$.

llamados coeficientes de esparcimiento de Mie.

Las componentes tangenciales de los campos eléctricos y magnéticos deben ser continuas al atravesar la superficie de la partícula, lo que da como resultado el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} E_{s\theta} + E_{i\theta} &= E_{1\theta}, & E_{s\phi} + E_{i\phi} &= E_{1\phi}, \\ H_{s\theta} + H_{i\theta} &= H_{1\theta} & \text{y} & & H_{s\phi} + H_{i\phi} &= H_{1\phi}. \end{aligned} \quad (1.32)$$

La nanopartícula esférica se encuentra caracterizada por su parámetro de tamaño

$$x = \frac{2\pi N_m a}{\lambda} = ka, \quad (1.33)$$

y cuyo índice de refracción relativo es $m = N_1/N_m = n + ik$, donde N_m y N_1 son los índices de refracción de la matriz y de la partícula, respectivamente, λ es la longitud de onda en el medio que rodea a la partícula (la matriz, considerada como homogénea e isotrópica) y a es el radio de la partícula. En la región fuera de la partícula, el índice de refracción relativo es igual a uno (se supone que la partícula está en vacío).

De la ortogonalidad de las funciones asociadas de Legendre, junto con las expresiones de los armónicos esféricos vectoriales [ecs. (1.19)–(1.22)], las expansiones de los campos EM internos y esparcidos [ecs. (1.28), (1.29), (1.30) y (1.31)] y las condiciones de frontera [ec.(1.32)], se obtienen cuatro ecuaciones lineales independientes para los coeficientes: a_n , b_n , c_n y d_n , dadas por

$$j_n(mx)c_n + h_n^{(1)}(x)b_n = j_n(x), \quad (1.34)$$

$$\mu [mxj_n(mx)]' c_n + \mu_1 [xh_n^{(1)}(x)]' b_n = \mu_1 [xj_n(x)]', \quad (1.35)$$

$$\mu mj_n(mx)d_n + \mu_1 h_n^{(1)}(x)a_n = \mu_1 j_n(x), \quad (1.36)$$

$$[mxj_n(mx)]' d_n + m [xh_n^{(1)}(x)]' a_n = m [xj_n(x)]', \quad (1.37)$$

donde la prima (\prime) representa la derivada de la función respecto a su argumento, μ_1 y μ son las permeabilidades magnéticas de la esfera y del medio que la rodea, respectivamente. Al resolver el sistema de ecuaciones [ecs. (1.34)–(1.37)] y empleando los funciones de Riccati–Bessel (ψ_n , χ_n y ζ_n) [4] definidas como

$$\psi_n(\rho) = \rho j_n(\rho), \quad \chi_n(\rho) = \rho y_n(\rho) \quad \text{y} \quad \zeta_n(\rho) = \rho h_n^{(1)}(\rho), \quad (1.38)$$

se obtiene que los coeficientes de esparcimiento están dados por

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{\mu m^2 j_n(mx) [xj_n(x)]' - \mu_1 j_n(x) [mxj_n(mx)]'}{\mu m^2 j_n(mx) [xh_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 h_n^{(1)}(x) [mxj_n(mx)]'} \\ &= \frac{\mu m \psi_n(mx) \psi_n'(x) - \mu_1 \psi_n(x) \psi_n'(mx)}{\mu \psi_n(mx) \zeta_n'(x) - \mu_1 \zeta_n(x) \psi_n'(mx)} \end{aligned} \quad (1.39)$$

y

$$\begin{aligned} b_n &= \frac{\mu_1 j_n(mx) [xj_n(x)]' - \mu j_n(x) [mxj_n(mx)]'}{\mu_1 j_n(mx) [xh_n^{(1)}(x)]' - \mu h_n^{(1)}(x) [mxj_n(mx)]'} \\ &= \frac{\mu_1 \psi_n(mx) \psi_n'(x) - \mu m \psi_n(x) \psi_n'(mx)}{\mu_1 \psi_n(mx) \zeta_n'(x) - \mu m \zeta_n(x) \psi_n'(mx)}. \end{aligned} \quad (1.40)$$

Asimismo, cabe resaltar que cuando el índice de refracción relativo m es igual a uno

$$\lim_{m \rightarrow 1} a_n, b_n \rightarrow 0,$$

lo que da lugar al caso en que el índice de refracción de la partícula es muy parecido al del medio que la rodea ($m \approx 1$), por lo que la partícula será prácticamente indistinguible a él y no habrá esparcimiento.

1.2. Cálculo de propiedades ópticas

El campo EM (\vec{E}, \vec{H}) , en una onda EM plana tienen la forma

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (1.41)$$

y

$$\vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{H}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}, \quad (1.42)$$

donde $\vec{r} = (x, y, z)$ es el vector posición donde se quiere evaluar los campos \vec{E} y \vec{H} . E_0 y B_0 son las amplitudes, en general complejas, de la onda EM plana. El vector de onda \vec{k} también puede ser complejo, de tal forma que

$$\vec{k} = \vec{k}_1 + i\vec{k}_2,$$

donde \vec{k}_1 y \vec{k}_2 son vectores reales, por lo que si se sustituye lo anterior en la ec. (1.41), se tiene que

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k}_1 \cdot \vec{r} + i\vec{k}_2 \cdot \vec{r} - \omega t)} = \vec{E}_0 e^{-\vec{k}_2 \cdot \vec{r}} e^{i(\vec{k}_1 \cdot \vec{r} - \omega t)},$$

donde $\vec{E}_0 e^{-\vec{k}_2 \cdot \vec{r}}$ es la amplitud y $(\vec{k}_1 \cdot \vec{r} - \omega t)$ es la fase de la onda eléctrica, por lo que el vector real \vec{k}_1 es perpendicular a la superficie de fase constante y \vec{k}_2 es perpendicular a la superficie de amplitud constante. Si \vec{k}_1 y \vec{k}_2 son paralelos, la onda EM plana será homogénea, de otra forma será heterogénea.

El vector de Poynting se define como [4]

$$\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H}^* = \text{Re} [\vec{E}_C] \times \text{Re} [\vec{H}_C], \quad (1.43)$$

donde el símbolo * denota que se debe considerar el complejo conjugado del campo \vec{H} , el subíndice C denota la velocidad de fase de las ondas EMs⁷ igual a $C = c/n$, con c igual a la rapidez de las ondas EMs y n el índice de refracción. El vector de Poynting representa la energía por unidad de tiempo y de área transportada por los campos EMs. Si la orientación de la superficie del plano con área A está especificada por la normal del vector \hat{n} [ver Fig. 1.3], entonces $\vec{S} \cdot \hat{n} dA$ es la energía por unidad de tiempo que cruza una superficie infinitesimal $\hat{n} dA$, es decir, la densidad de flujo de energía o irradiancia.

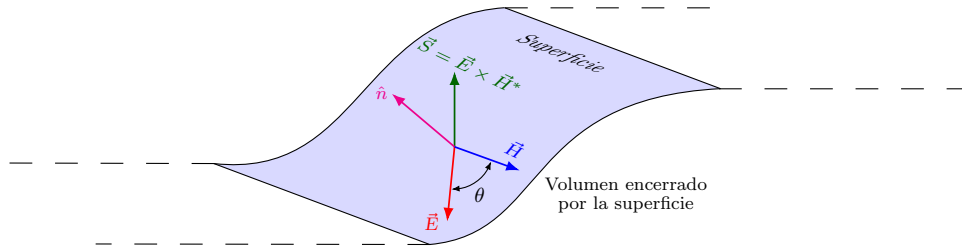


Figura 1.3: Esquema representando el vector de Poynting que atraviesa una superficie.

Si se construye una esfera imaginaria de radio r y de superficie A alrededor de una partícula, la energía electromagnética transportada por la onda EM cruza la superficie A a una tasa dada es [4]

$$W_{\text{abs}} = - \int_A \vec{S} \cdot \hat{e}_r dA, \quad (1.44)$$

donde \hat{e}_r es el vector normal unitario de la superficie de la esfera y \vec{S} es el vector de Poynting. El signo menos en la ec. (1.44) se debe a que se escoge la normal exterior de la superficie de la esfera, asegurando una contribución de W positiva, lo que implica que la energía electromagnética es absorbida en el volumen V .

El valor instantáneo del vector de Poynting es una función que varía rápidamente en el tiempo para frecuencias que son usualmente de interés. La mayoría de los instrumentos no son capaces de detectar

⁷Dado que existen materiales en donde $n < 1$, es posible tener una velocidad de fase (es decir, la velocidad con la cual la amplitud de las ondas continuas entra a través de un medio) más grande de c .

oscilaciones rápidas del valor instantáneo del vector de Poynting, pero si pueden detectar promedios temporales, es decir [4]

$$\langle \vec{S} \rangle = \frac{1}{\tau} \int_t^{t+\tau} \vec{S}(t') dt', \quad (1.45)$$

donde τ es un pequeño intervalo de tiempo, pero significativamente mayor comparado con el periodo de tiempo $1/\omega$. El promedio temporal del vector de Poynting $\langle \vec{S} \rangle$ en cualquier punto de la región externa de la esfera se puede escribir como la suma de tres términos

$$\langle \vec{S} \rangle = \frac{1}{2} \text{Re} \left[\vec{E}_m \times \vec{H}_m^* \right] = \langle \vec{S}_i \rangle + \langle \vec{S}_{\text{scat}} \rangle + \langle \vec{S}_{\text{ext}} \rangle, \quad (1.46)$$

donde el subíndice m hace referencia a los campos en el medio que rodea a la partícula imaginaria (la matriz), los subíndices i , scat y ext se encuentran asociados a las contribuciones de la onda EM incidente, esparcida y extinguida, respectivamente. A su vez, cada término de \vec{S} está descrito de la forma

$$\langle \vec{S}_i \rangle = \frac{1}{2} \text{Re} \left[\vec{E}_i \times \vec{H}_i^* \right], \quad (1.47a)$$

$$\langle \vec{S}_{\text{scat}} \rangle = \frac{1}{2} \text{Re} \left[\vec{E}_{\text{scat}} \times \vec{H}_{\text{scat}}^* \right], \quad (1.47b)$$

$$\langle \vec{S}_{\text{ext}} \rangle = \frac{1}{2} \text{Re} \left[\vec{E}_i \times \vec{H}_{\text{scat}}^* + \vec{E}_{\text{scat}} \times \vec{H}_i^* \right]. \quad (1.47c)$$

Al sustituir la ec. (1.46) en la ec. (1.44), se obtiene

$$W_{\text{abs}} = - \int_A \langle \vec{S}_i \rangle \cdot \hat{e}_r dA - \int_A \langle \vec{S}_{\text{scat}} \rangle \cdot \hat{e}_r dA - \int_A \langle \vec{S}_{\text{ext}} \rangle \cdot \hat{e}_r dA = W_i - W_{\text{scat}} + W_{\text{ext}},$$

donde el signo negativo de W_{scat} se debe a que tanto \vec{S}_{scat} como \hat{e}_r están orientados en la misma dirección. Se consideró que el medio de la región externa a la partícula fuera no absorbente, $W_i = 0$, pues de lo contrario el campo EM incidente estaría depositando energía al medio, lo que implica que

$$W_{\text{ext}} = W_{\text{abs}} + W_{\text{scat}}, \quad (1.48)$$

lo que se conoce como el Teorema Óptico [4].

La ley de Faraday–Lenz en su forma diferencial es

$$\nabla \times \vec{E} = - \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (1.49)$$

donde \vec{E} y \vec{B} son el campo eléctrico y magnético, respectivamente. Cambiando el lado izquierdo de la ec. (1.49) a notación de índices, se tiene que

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{E} &= \epsilon_{lmn} \frac{\partial}{\partial r_l} E_m = \epsilon_{lmn} \frac{\partial}{\partial r_l} \{ E_{0m} \exp [i(k_l r_l - \omega t)] \} \\ &= \epsilon_{lmn} E_{0m} \exp [i(k_l r_l - \omega t)] \cdot \frac{\partial}{\partial r_l} [i(k_l r_l - \omega t)] \\ &= i \epsilon_{lmn} E_m k_l \cdot \frac{\partial r_l}{\partial r_l}, \end{aligned}$$

en donde $\partial r_i / \partial r_i = \delta_{ii}$ con δ_{ij} como la delta de Kronecker y ϵ_{ijk} es el tensor de Levi–Civita. El producto vectorial en notación de índices se denota como $\vec{u} \times \vec{v} = \epsilon_{ijk} u_i v_j$, entonces sustituyendo la ec. (1.50) en notación vectorial en la ec. (1.49), se obtiene

$$-\vec{E} \times i\vec{k} = - \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}.$$

Por un lado, como $\vec{B} = \mu \vec{H}$ se tiene que

$$\vec{E} \times i\vec{k} = \frac{\partial \mu \vec{H}}{\partial t}.$$

Al realizar la derivada parcial con respecto al tiempo del campo \vec{H} de una onda EM monocromática plana [ver ec. (1.42)] y sustituirlo en la ecuación anterior, se obtiene

$$\vec{k} \times \vec{E} = \omega \mu \vec{H}, \quad (1.50)$$

entonces el promedio temporal del vector de Poynting [ec. (1.46)] es igual a

$$\begin{aligned} \langle \vec{S} \rangle &= \frac{1}{2} \text{Re} \left[\vec{E}_0 \times \vec{H}_0^* \right] = \frac{1}{2} \text{Re} \left[\frac{\vec{E}_0 \times \vec{k}^* \times \vec{E}_0^*}{\omega \mu^*} \right] \\ &= \frac{1}{2} \text{Re} \left[\frac{\vec{k}^* (\vec{E}_0 \cdot \vec{E}_0^*) - \vec{E}_0^* (\vec{E}_0 \cdot \vec{k}^*)}{\omega \mu^*} \right]. \end{aligned}$$

Si se considera una onda EM plana homogénea con vector de onda $\vec{k} = k \hat{e}_u = (k_1 + ik_2) \hat{e}_u$, donde \hat{e}_u es un vector unitario real en la dirección de propagación, y que satisface las ecs. de Maxwell, y además si hay ausencia de fuentes (vacío), es decir ausencia de cargas y corrientes totales, entonces el campo eléctrico y el vector de onda serán transversales, es decir que $(\vec{E}_0 \cdot \vec{k}) = 0$ lo que implica que $(\vec{E}_0 \cdot \vec{k}^*) = 0$, por lo cual

$$\langle \vec{S} \rangle = \frac{1}{2} \text{Re} \left[\frac{\vec{k}^* (\vec{E}_0 \cdot \vec{E}_0^*)}{\omega \mu^*} \right] = \frac{1}{2} \text{Re} \left[\frac{k^* E_0^2}{\omega \mu^*} \right] \hat{e}_u = \frac{1}{2} \text{Re} \left[\frac{\omega \sqrt{\epsilon^* \mu^*}}{\omega \mu^*} \right] E_0^2 \hat{e}_u = \frac{1}{2} \text{Re} \left[\sqrt{\frac{\epsilon^*}{\mu^*}} \right] E_0^2 \hat{e}_u,$$

por lo tanto la irradiancia del campo incidente será igual a

$$I_i = \langle \vec{S} \rangle \cdot \hat{n} = \frac{1}{2} \text{Re} \left[\sqrt{\frac{\epsilon^*}{\mu^*}} \right] E_0^2. \quad (1.51)$$

Las secciones transversales de absorción, esparcimiento y extinción se obtienen al calcular el cociente del factor W entre la irradiancia del campo incidente, por lo tanto

$$C_\sigma = \frac{W_\sigma}{I_i}; \quad \sigma = \text{abs, scat, ext.} \quad (1.52)$$

Asimismo, es posible derivar las expresiones de las secciones transversales para una partícula esférica de manera exacta [4, 36, 37]. En particular, para el esparcimiento y extinción, se tiene que [4]

$$W_{\text{scat}} = \frac{1}{2} \text{Re} \left\{ \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (E_{s\theta} H_{s\phi}^* - E_{s\phi} H_{s\theta}^*) r^2 \sin \theta d\theta d\phi \right\}, \quad (1.53a)$$

$$W_{\text{ext}} = \frac{1}{2} \text{Re} \left\{ \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (E_{i\phi} H_{s\theta}^* - E_{i\theta} H_{s\phi}^* - E_{s\theta} H_{i\phi}^* + E_{s\phi} H_{i\theta}^*) r^2 \sin \theta d\theta d\phi \right\}, \quad (1.53b)$$

y el radio $a < r$ de la esfera imaginaria es arbitrario. A partir de las ecs. (1.25) y (1.26), la expansión de las componentes angulares del campo incidente polarizado en la dirección \hat{e}_x se pueden escribir como

$$\begin{aligned} E_{i\theta} &= \frac{\cos(\phi)}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (\psi_n \pi_n - i \psi'_n \tau_n), & H_{i\theta} &= \frac{k}{\omega \mu} \tan(\phi) E_{i\theta}, \\ E_{i\phi} &= \frac{\sin(\phi)}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (i \psi'_n \pi_n - \psi_n \tau_n) & \text{y} & \quad H_{i\phi} = \frac{-k}{\omega \mu} \cot(\phi) E_{i\phi}. \end{aligned} \quad (1.54)$$

Asimismo, la expansión de las componentes angulares del campo esparcido se pueden deducir a partir de las ecs. (1.30) y (1.31), obteniendo así

$$\begin{aligned} E_{s\theta} &= \frac{\cos(\phi)}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (i a_n \zeta'_n \tau_n - b_n \zeta_n \pi_n), & H_{s\theta} &= \frac{k}{\omega \mu} \frac{\sin(\phi)}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (i b_n \zeta'_n \tau_n - a_n \zeta_n \pi_n), \\ E_{s\phi} &= \frac{\sin(\phi)}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (b_n \zeta_n \tau_n - i a_n \zeta'_n \pi_n) & \text{y} & \quad H_{s\phi} = \frac{k}{\omega \mu} \frac{\cos(\phi)}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (i b_n \zeta'_n \pi_n - a_n \zeta_n \tau_n). \end{aligned} \quad (1.55)$$

Las últimas dos ecuaciones están dadas en términos de las funciones angulares π_n y τ_n , definidas en términos de las funciones asociadas de Legendre $P_n^1(\cos \theta)$, como

$$\pi_n = \frac{P_n^1(\cos \theta)}{\sin \theta} \quad \text{y} \quad \tau_n = \frac{dP_n^1(\cos \theta)}{d\theta}. \quad (1.56)$$

Si bien tanto π_n como τ_n no son ortogonales mutuamente ni entre sí, se satisfacen las relaciones [4]

$$\begin{aligned} \int_0^\pi (\tau_n + \pi_n)(\tau_m + \pi_m) \sin \theta d\theta &= \int_0^\pi (\tau_n - \pi_n)(\tau_m - \pi_m) \sin \theta d\theta = 0, \\ \int_0^\pi (\tau_n \pi_m + \pi_n \tau_m) \sin \theta d\theta &= 0, \\ \int_0^\pi (\pi_n \pi_m + \tau_n \tau_m) \sin \theta d\theta &= \delta_{nm} \frac{2n^2(n+1)^2}{2n+1}, \end{aligned}$$

donde δ_{nm} denota la delta de Kronecker.

Al sustituir los campos EMs esparcidos por la partícula esférica, dados por las ecs. (1.55), en la integral de W_{scat} [ec.(1.53b)] y haciendo uso de las relaciones anteriores de las funciones angulares π_n y τ_n , se obtiene

$$W_{\text{scat}} = \frac{\pi |E_0|^2}{k\omega\mu} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \text{Re} \{g_n\} (|a_n|^2 + |b_n|^2),$$

donde el factor g_n se define como

$$g_n = -i\zeta_n^* \zeta_n' = (\chi_n^* \psi_n' - \psi_n^* \chi_n') - i(\psi_n^* \psi_n' + \chi_n^* \chi_n'),$$

con $\chi_n(\rho) = -\rho y_n(\rho)$, que es otra función de Riccati-Bessel, por lo cual $\zeta_n(\rho) = \psi_n(\rho) - i\chi_n(\rho)$. Ahora, como ψ_n y χ_n son funciones reales cuando su argumento es real, el primer sumando de g_n es el *wronskiano* [4]

$$\chi_n \psi_n' - \psi_n \chi_n' = 1, \quad (1.57)$$

y por lo tanto $\text{Re} \{g_n\} = 1$. Por lo anterior y utilizando la definición de sección transversal de esparcimiento [ec. (1.52)], se obtiene [4]

$$C_{\text{scat}} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (|a_n|^2 + |b_n|^2). \quad (1.58)$$

Haciendo un procedimiento análogo, se puede calcular la sección transversal de extinción [4]

$$C_{\text{ext}} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \text{Re} \{a_n + b_n\}, \quad (1.59)$$

y por lo tanto, se obtiene la sección transversal de absorción por medio del teorema óptico [ec.(1.48)], entonces [4]

$$C_{\text{abs}} = C_{\text{ext}} - C_{\text{scat}}. \quad (1.60)$$

Capítulo 2

Esparcimiento y absorción de ondas electromagnéticas por sistemas tipo *core-shell* esférico

2.1. Cálculo de coeficientes de esparcimiento de Mie

Siguiendo el procedimiento de Bohren y Huffman [4], el problema de esparcimiento y absorción por un sistema de partículas esféricas concéntricas *core-shell*, se plantea como la interacción de una onda electromagnética (EM) monocromática plana sobre el sistema que se muestra en la Fig.2.1.

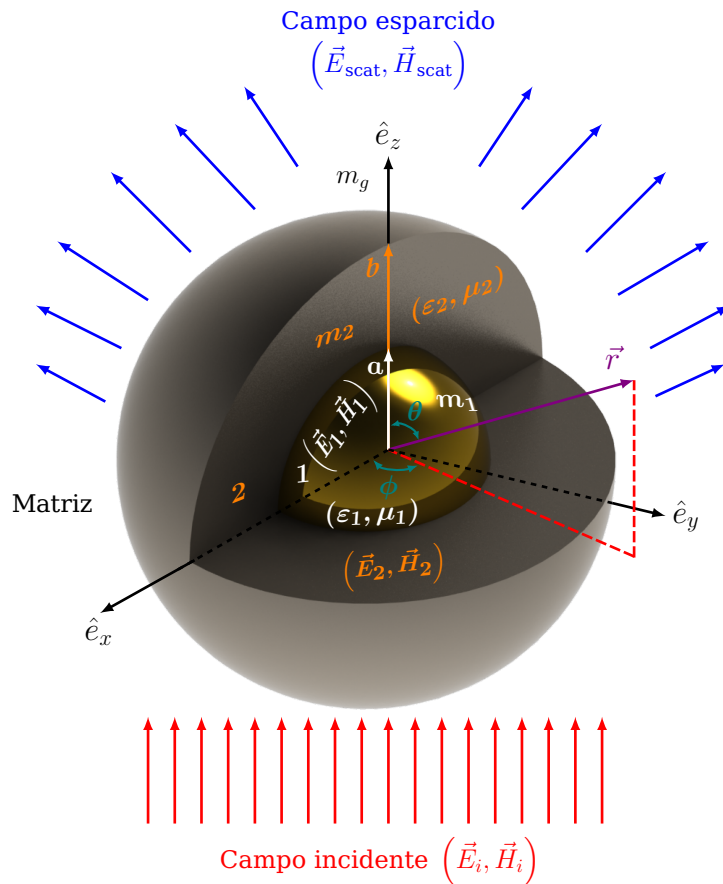


Figura 2.1: Geometría del problema de esparcimiento de un sistema de esferas concéntricas tipo *core-shell*, iluminado por una onda plana monocromática.

Supongamos que la partícula tipo *core-shell* es iluminada por un campo electromagnético incidente polarizado en la dirección \hat{e}_x , $\vec{E} = E_0 \exp[ikr \cos(\theta)] \hat{e}_x$, con dependencia temporal $\exp(-i\omega t)$. Cada componente de la nanopartícula (núcleo y capa) se encuentra caracterizada por su parámetro de tamaño

respectivo

$$x_1 = \frac{2\pi N_m a}{\lambda} = ka \quad \text{y} \quad x_2 = \frac{2\pi N_m b}{\lambda} = kb, \quad (2.1)$$

y cuyo índice de refracción relativo es $m_l = N_l/N_m = n_l + ik_l$, $l = 1, 2$, donde λ es la longitud de onda en el medio que rodea al sistema *core-shell* (la matriz, considerada como homogénea e isotrópica), a es el radio interno (*core*), b es el radio exterior de la segunda capa (*shell*), N_m y N_l son los índices de refracción de la matriz y la componente l -ésima, ($l = 1, 2$) respectivamente, y k es la magnitud del vector de onda del haz incidente en la matriz. En la región fuera de la partícula, el índice de refracción relativo es $m_g = 1$. Todo el espacio se divide en dos regiones: la región dentro del sistema tipo *core-shell* y el medio que rodea a la partícula (la matriz). Los campos eléctricos y magnéticos (dentro \vec{E}_{in} y fuera de la esfera \vec{E}_{out}) son considerados como la superposición de funciones de ondas esféricas hacia adentro y hacia afuera. Por ejemplo, \vec{E}_{in} y \vec{E}_{out} se pueden expresar en términos de los armónicos esféricos vectoriales complejos:

$$\vec{E}_{in} = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left[c_n^{(l)} \vec{M}_{o1n}^{(1)} - id_n^{(l)} \vec{N}_{e1n}^{(1)} \right] \quad (2.2)$$

y

$$\vec{E}_{out} = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left[ia_n^{(l)} \vec{N}_{e1n}^{(3)} - b_n^{(l)} \vec{M}_{o1n}^{(3)} \right], \quad (2.3)$$

donde $E_n = i^n E_0 (2n+1)/n(n+1)$, $\vec{M}_{o1n}^{(j)}$ y $\vec{N}_{e1n}^{(j)}$ ($j = 1, 3$) son los armónicos esféricos vectoriales, en donde el superíndice denota la dependencia radial, es decir, el tipo de función Bessel, z_n : (1) corresponde a las funciones esféricas de Bessel j_n , mientras que (3) corresponde a las funciones de primer tipo de Hankel, $h_n^{(1)}$. Los armónicos esféricos vectoriales $\vec{M}_{o1n}^{(j)}$ y $\vec{N}_{e1n}^{(j)}$, se expresan en coordenadas esféricas de la siguiente manera:

$$\vec{M}_{o1n}^{(j)} = \cos \phi \pi_n(\cos \theta) z_n^{(j)}(\rho) \hat{e}_\theta - \sin \phi \tau_n(\cos \theta) z_n^{(j)}(\rho) \hat{e}_\phi, \quad (2.4)$$

$$\vec{M}_{e1n}^{(j)} = -\sin \phi \pi_n(\cos \theta) z_n^{(j)}(\rho) \hat{e}_\theta - \cos \phi \tau_n(\cos \theta) z_n^{(j)}(\rho) \hat{e}_\phi, \quad (2.5)$$

$$\begin{aligned} \vec{N}_{o1n}^{(j)} &= \sin \phi n(n+1) \sin \theta \pi_n(\cos \theta) \frac{z_n^{(j)}(\rho)}{\rho} \hat{e}_r \\ &+ \sin \phi \tau_n(\cos \theta) \frac{[\rho z_n^{(j)}(\rho)]'}{\rho} \hat{e}_\theta + \cos \phi \pi_n(\cos \theta) \frac{[\rho z_n^{(j)}(\rho)]'}{\rho} \hat{e}_\phi, \end{aligned} \quad (2.6)$$

$$\begin{aligned} \vec{N}_{e1n}^{(j)} &= \cos \phi n(n+1) \sin \theta \pi_n(\cos \theta) \frac{z_n^{(j)}(\rho)}{\rho} \hat{e}_r \\ &+ \cos \phi \tau_n(\cos \theta) \frac{[\rho z_n^{(j)}(\rho)]'}{\rho} \hat{e}_\theta - \sin \phi \pi_n(\cos \theta) \frac{[\rho z_n^{(j)}(\rho)]'}{\rho} \hat{e}_\phi, \end{aligned} \quad (2.7)$$

donde la prima (\prime) denota a la derivada de la función respecto a su argumento, el superíndice $j = 1, 2, 3$ denota las funciones esféricas de Bessel de primer, segundo o tercer tipo, respectivamente,

$$z_n^{(1)}(\rho) = j_n, \quad z_n^{(2)}(\rho) = y_n \quad \text{y} \quad z_n^{(3)}(\rho) = h_n^{(1)} = j_n + iy_n. \quad (2.8)$$

El argumento complejo ρ de las funciones radiales de los armónicos esféricos vectoriales, dados por las ecs. (2.4)–(2.7), está dado como

$$\rho = \frac{2\pi m_l}{\lambda} r, \quad (2.9)$$

donde la coordenada radial está dentro de la l -ésima capa: $r_{l-1} < r < r_l$. Las eigenfunciones angulares π_n y τ_n están definidas por las funciones asociadas de Legendre $P_n^1(\cos \theta)$, ec. (1.56), como

$$\pi_n = \frac{P_n^1(\cos \theta)}{\sin \theta} \quad \text{y} \quad \tau_n = \frac{dP_n^1(\cos \theta)}{d\theta}.$$

Desde el punto de vista de cálculo numérico es conveniente emplear las funciones de Riccati–Bessel, ec. (1.38), que son

$$\psi_n(\rho) = \rho j_n(\rho), \quad \chi_n(\rho) = \rho y_n(\rho) \quad \text{y} \quad \zeta_n(\rho) = \rho h_n^{(1)}(\rho).$$

En la región $a \leq r \leq b$, las funciones esféricas de Bessel j_n y y_n son finitas; como consecuencia, la expansión de los campos eléctrico y magnético (\vec{E}_2, \vec{H}_2) en esta región (*shell*) es

$$\vec{E}_2 = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left[f_n \vec{M}_{o1n}^{(1)} - i g_n \vec{N}_{e1n}^{(1)} + i w_n \vec{N}_{e1n}^{(2)} - v_n \vec{M}_{o1n}^{(2)} \right] \quad (2.10)$$

y

$$\vec{H}_2 = -\frac{k_2}{\omega \mu_2} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left[g_n \vec{M}_{e1n}^{(1)} + i f_n \vec{N}_{o1n}^{(1)} - w_n \vec{M}_{e1n}^{(2)} - i v_n \vec{N}_{o1n}^{(2)} \right], \quad (2.11)$$

donde ω es la frecuencia angular, $k_2 = 2\pi m_2/\lambda$ y μ_2 es la permeabilidad magnética en la segunda región (*shell*).

El campo EM dentro de la partícula (\vec{E}_1, \vec{H}_1) en la región $0 \leq r \leq r_1$, en donde las funciones esféricas de Bessel j_n son finitas (y_n divergen en el origen, por lo que no son aceptables físicamente), está dado por las ecs. (1.28) y (1.29) [4, 5]

$$\vec{E}_1 = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left[c_n^{(1)} \vec{M}_{o1n}^{(1)} - i d_n^{(1)} \vec{N}_{e1n}^{(1)} \right]$$

y

$$\vec{H}_1 = -\frac{k_1}{\omega \mu_1} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left[d_n^{(1)} \vec{M}_{e1n}^{(1)} + i c_n^{(1)} \vec{N}_{o1n}^{(1)} \right].$$

En la región fuera de la esfera, el campo total externo es la superposición del campo incidente y del esparcido, $\vec{E} = \vec{E}_i + \vec{E}_{\text{scat}}$ donde, de acuerdo a la solución de Mie, los campos incidentes y esparcidos están dados por las ecs. (1.25), (1.26), (1.30) y (1.31) [4]

$$\begin{aligned} \vec{E}_i &= \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left[\vec{M}_{o1n}^{(1)} - i \vec{N}_{e1n}^{(1)} \right], \\ \vec{H}_i &= -\frac{k}{\omega \mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left[\vec{M}_{e1n}^{(1)} + i \vec{N}_{o1n}^{(1)} \right], \\ \vec{E}_{\text{scat}} &= \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left[i a_n \vec{N}_{e1n}^{(3)} - b_n \vec{M}_{o1n}^{(3)} \right], \\ \vec{H}_{\text{scat}} &= -\frac{k}{\omega \mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left[i b_n \vec{N}_{o1n}^{(3)} + a_n \vec{M}_{e1n}^{(3)} \right]. \end{aligned}$$

Las condiciones de frontera de los campos EM entre la interfaz en las dos regiones, es decir para el caso en que $r_1 = a$, están dadas por la ec. (1.1) donde el subíndice m es igual a 2. Para el caso del sistema *core-shell*, en la última capa, $r_2 = b$, las condiciones de frontera están dadas por

$$\left(\vec{E}_{\text{scat}} + \vec{E}_i - \vec{E}_2 \right) \times \hat{e}_r = 0, \quad (2.12a)$$

$$\left(\vec{H}_{\text{scat}} + \vec{H}_i - \vec{H}_2 \right) \times \hat{e}_r = 0. \quad (2.12b)$$

Las componentes tangenciales de los campos eléctricos y magnéticos deben ser continuas, lo que da como resultado el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} E_{s\theta} + E_{i\theta} &= E_{2\theta}, & E_{s\phi} + E_{i\phi} &= E_{2\phi}, \\ H_{s\theta} + H_{i\theta} &= H_{2\theta}, & H_{s\phi} + H_{i\phi} &= H_{2\phi}, \\ E_{2\theta} &= E_{1\theta}, & E_{2\phi} &= E_{1\phi}, \\ H_{2\theta} &= H_{1\theta}, & H_{2\phi} &= H_{1\phi}. \end{aligned} \quad (2.13)$$

De la ortogonalidad de las funciones asociadas de Legendre, junto con las expresiones de los armónicos esféricos vectoriales [ecs. (2.4)–(2.7)], las expansiones de los campos [ecs. (2.10) y (2.11)], y las condiciones de frontera [ec. (2.13)], se obtienen ocho ecuaciones lineales independientes en los coeficientes para los campos internos: $a_n, b_n, c_n, d_n, f_n, g_n, v_n$ y w_n .

Debido a las condiciones de contorno [ec. (2.13)] se cumple que $E_{2\theta} = E_{1\theta}$ y $H_{2\theta} = H_{1\theta}$, y además $m_l = k_l/k$, con $l = 1, 2$; entonces para el caso de una partícula tipo *core-shell*, en la región $a \leq r \leq b$ (*shell*), el campo eléctrico es igual a [6–8]

$$\begin{aligned} E_{2\theta} &= \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left\{ f_n \cos \phi \pi_n(\cos \theta) z_n^{(1)}(\rho) - i g_n \cos \phi \tau_n(\cos \theta) \frac{[\rho z_n^{(1)}(\rho)]'}{\rho} \right\} + \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left\{ i w_n \cos \phi \tau_n(\cos \theta) \frac{[\rho z_n^{(2)}(\rho)]'}{\rho} - v_n \cos \phi \pi_n(\cos \theta) z_n^{(2)}(\rho) \right\} \\ &= \cos \phi \sum_{n=1}^{\infty} E_n \pi_n(\cos \theta) [f_n j_n(k_2 r) - v_n y_n(k_2 r)] + \\ &- i \cos \phi \sum_{n=1}^{\infty} E_n \tau_n(\cos \theta) \left\{ g_n \frac{[(k_2 r) j_n(k_2 r)]'}{k_2 r} - w_n \frac{[(k_2 r) y_n(k_2 r)]'}{k_2 r} \right\}, \end{aligned}$$

y por otro lado el campo eléctrico dentro del núcleo (*core*) es

$$E_{1\theta} = \cos \phi \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left\{ c_n \pi_n(\cos \theta) j_n(k_1 r) - i d_n \tau_n(\cos \theta) \frac{[(k_1 r) j_n(k_1 r)]'}{k_1 r} \right\}.$$

Asimismo, el campo magnético, en la región $a \leq r \leq b$ (*shell*), es igual a [6–8]

$$\begin{aligned} H_{2\theta} &= -\frac{k_2}{\omega \mu_2} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left\{ g_n (-\sin \phi) \pi_n(\cos \theta) z_n^{(1)}(\rho) + i f_n \sin \phi \tau_n(\cos \theta) \frac{[\rho z_n^{(1)}(\rho)]'}{\rho} \right\} + \\ &+ \frac{k_2}{\omega \mu_2} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left\{ w_n (-\sin \phi) \pi_n(\cos \theta) z_n^{(2)}(\rho) + i v_n \sin \phi \tau_n(\cos \theta) \frac{[\rho z_n^{(2)}(\rho)]'}{\rho} \right\} \\ &= \frac{k_2 \sin \phi}{\omega \mu_2} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left\{ g_n \pi_n(\cos \theta) z_n^{(1)}(\rho) - i f_n \tau_n(\cos \theta) \frac{[\rho z_n^{(1)}(\rho)]'}{\rho} \right\} + \\ &- \frac{k_2 \sin \phi}{\omega \mu_2} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left\{ w_n \pi_n(\cos \theta) z_n^{(2)}(\rho) - i v_n \tau_n(\cos \theta) \frac{[\rho z_n^{(2)}(\rho)]'}{\rho} \right\} \\ &= \frac{k_2 \sin \phi}{\omega \mu_2} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \pi_n(\cos \theta) [g_n j_n(k_2 r) - w_n y_n(k_2 r)] + \\ &- i \frac{k_2 \sin \phi}{\omega \mu_2} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \tau_n(\cos \theta) \left\{ f_n \frac{[(k_2 r) j_n(k_2 r)]'}{k_2 r} - v_n \frac{[(k_2 r) y_n(k_2 r)]'}{k_2 r} \right\}, \end{aligned}$$

mientras que el campo magnético dentro del núcleo (*core*) es

$$H_{1\theta} = \frac{k_1}{\omega \mu_1} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left\{ d_n \sin \phi \pi_n(\cos \theta) j_n(k_1 r) - i c_n \sin \phi \tau_n(\cos \theta) \frac{[(k_1 r) j_n(k_1 r)]'}{k_1 r} \right\}.$$

Dado que debe cumplirse que $E_{2\theta} = E_{1\theta}$ [por la ec. (2.13)], entonces al considerar sólo los términos que acompañan a la eigenfunción angular $\pi_n(\cos \theta)$ en ambos lados de la condición de contorno, se obtiene

$$f_n j_n(k_2 a) - v_n y_n(k_2 a) = c_n j_n(k_1 a),$$

y en términos de las funciones de Riccati–Bessel

$$\begin{aligned} f_n \frac{\psi_n(m_2 k a)}{m_2 k a} - v_n \frac{\chi_n(m_2 k a)}{m_2 k a} &= c_n \frac{\psi_n(m_1 k a)}{m_1 k a} \\ f_n m_1 \psi_n(m_2 x_1) - v_n m_1 \chi_n(m_2 x_1) &= c_n m_2 \psi_n(m_1 x_1), \end{aligned}$$

donde $x_1 = ka$. Análogamente, para la eigenfunción angular $\tau_n(\cos \theta)$ se obtiene

$$g_n \frac{[(k_2 a) j_n(k_2 a)]'}{k_2 a} - w_n \frac{[(k_2 a) y_n(k_2 a)]'}{k_2 a} = d_n \frac{[(k_1 a) j_n(k_1 a)]'}{k_1 a},$$

o en términos de las funciones de Riccati–Bessel

$$g_n \frac{\left[(m_2 k a) \frac{\psi_n(m_2 k a)}{(m_2 k a)} \right]'}{m_2 k a} - w_n \frac{\left[(m_2 k a) \frac{\chi_n(m_2 k a)}{(m_2 k a)} \right]'}{m_2 k a} = d_n \frac{\left[(m_1 k a) \frac{\psi_n(m_1 k a)}{(m_1 k a)} \right]'}{m_1 k a},$$

$$g_n m_1 \psi_n'(m_2 x_1) - w_n m_1 \chi_n'(m_2 x_1) = d_n m_2 \psi_n'(m_1 x_1),$$

donde χ_n' y ψ_n' representan la derivada de las funciones de Riccati–Bessel respecto a su argumento.

De igual manera, se cumple que $H_{2\theta} = H_{1\theta}$, debido a las condiciones de contorno [ec. (2.13)]. Por un lado, al considerar sólo los términos que acompañan a la eigenfunción angular $\pi_n(\cos \theta)$, en ambos lados de la condición de contorno, se obtiene

$$\frac{k_2}{\mu_2} [g_n j_n(k_2 a) - w_n y_n(k_2 a)] = \frac{k_1}{\mu_1} [d_n j_n(k_1 a)],$$

y en términos de las funciones de Riccati–Bessel

$$\frac{2\pi m_2}{\lambda \mu_2} \left[g_n \frac{\psi_n(m_2 k a)}{(m_2 k a)} - w_n \frac{\chi_n(m_2 k a)}{(m_2 k a)} \right] = \frac{2\pi m_1}{\lambda \mu_1} \left[d_n \frac{\psi_n(m_1 k a)}{(m_1 k a)} \right]$$

$$g_n \mu_1 \psi_n(m_2 x_1) - w_n \mu_1 \chi_n(m_2 x_1) = d_n \mu_2 \psi_n(m_1 x_1).$$

De igual manera, para los términos asociados a la eigenfunción angular $\tau_n(\cos \theta)$ se obtiene

$$\frac{k_2}{\mu_2} \left\{ f_n \frac{[(k_2 a) j_n(k_2 a)]'}{k_2 a} - v_n \frac{[(k_2 a) y_n(k_2 a)]'}{k_2 a} \right\} = \frac{k_1}{\mu_1} \left\{ c_n \frac{[(k_1 a) j_n(k_1 a)]'}{k_1 a} \right\},$$

o de manera equivalente

$$\frac{f_n}{\mu_2} \left[(m_2 k a) \frac{\psi_n(m_2 k a)}{(m_2 k a)} \right]' - \frac{v_n}{\mu_2} \left[(m_2 k a) \frac{\chi_n(m_2 k a)}{(m_2 k a)} \right]' = \frac{c_n}{\mu_1} \left[(m_1 x_1) \frac{\psi_n(m_1 x_1)}{(m_1 x_1)} \right]'$$

$$f_n \mu_1 \psi_n'(m_2 x_1) - v_n \mu_1 \chi_n'(m_2 x_1) = c_n \mu_2 \psi_n'(m_1 x_1).$$

En resumen, se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones:

$$g_n m_1 \psi_n'(m_2 x_1) - w_n m_1 \chi_n'(m_2 x_1) = d_n m_2 \psi_n'(m_1 x_1), \quad (2.14)$$

$$f_n m_1 \psi_n(m_2 x_1) - v_n m_1 \chi_n(m_2 x_1) = c_n m_2 \psi_n(m_1 x_1), \quad (2.15)$$

$$f_n \mu_1 \psi_n'(m_2 x_1) - v_n \mu_1 \chi_n'(m_2 x_1) = c_n \mu_2 \psi_n'(m_1 x_1), \quad (2.16)$$

$$g_n \mu_1 \psi_n(m_2 x_1) - w_n \mu_1 \chi_n(m_2 x_1) = d_n \mu_2 \psi_n(m_1 x_1). \quad (2.17)$$

Por un lado, multiplicando la ec. (2.14) por $-\mu_1 \chi_n(m_2 x_1)$ más la ec. (2.17) multiplicada por $m_1 \chi_n'(m_2 x_1)$, se obtiene

$$g_n = d_n \frac{\left[m_1 \mu_2 \chi_n'(m_2 x_1) \psi_n(m_1 x_1) - m_2 \mu_1 \chi_n(m_2 x_1) \psi_n'(m_1 x_1) \right]}{\left[m_1 \mu_1 \chi_n'(m_2 x_1) \psi_n(m_2 x_1) - m_1 \mu_1 \chi_n(m_2 x_1) \psi_n'(m_2 x_1) \right]}. \quad (2.18)$$

Por otro lado, multiplicando la ec. (2.14) por $-\mu_1 \psi_n(m_2 x_1)$ más la ec. (2.17) multiplicada por $m_1 \psi_n'(m_2 x_1)$, se tiene

$$w_n = d_n \frac{\left[m_1 \mu_2 \psi_n(m_1 x_1) \psi_n'(m_2 x_1) - m_2 \mu_1 \psi_n(m_2 x_1) \psi_n'(m_1 x_1) \right]}{\left[m_1 \mu_1 \chi_n'(m_2 x_1) \psi_n(m_2 x_1) - m_1 \mu_1 \chi_n(m_2 x_1) \psi_n'(m_2 x_1) \right]}. \quad (2.19)$$

Se define un nuevo coeficiente $A_n^{(2)}$ como

$$A_n^{(2)} = \frac{w_n}{g_n} = \frac{d_n \left\{ \frac{-[m_2 \mu_1 \psi_n(m_2 x_1) \psi_n'(m_1 x_1) - m_1 \mu_2 \psi_n(m_1 x_1) \psi_n'(m_2 x_1)]}{m_1 \mu_1 \chi_n'(m_2 x_1) \psi_n(m_2 x_1) - m_1 \mu_1 \chi_n(m_2 x_1) \psi_n'(m_2 x_1)} \right\}}{d_n \left[\frac{m_1 \mu_2 \chi_n'(m_2 x_1) \psi_n(m_1 x_1) - m_2 \mu_1 \chi_n(m_2 x_1) \psi_n'(m_1 x_1)}{m_1 \mu_1 \chi_n'(m_2 x_1) \psi_n(m_2 x_1) - m_1 \mu_1 \chi_n(m_2 x_1) \psi_n'(m_2 x_1)} \right]}$$

$$= \frac{m_2 \mu_1 \psi_n(m_2 x_1) \psi_n'(m_1 x_1) - m_1 \mu_2 \psi_n(m_1 x_1) \psi_n'(m_2 x_1)}{m_2 \mu_1 \chi_n(m_2 x_1) \psi_n'(m_1 x_1) - m_1 \mu_2 \chi_n'(m_2 x_1) \psi_n(m_1 x_1)}. \quad (2.20)$$

Asimismo, multiplicando la ec. (2.15) por $-\mu_1\chi'_n(m_2x_1)$ más la ec. (2.16) multiplicada por $m_1\zeta_n(m_2x_1)$, se tiene

$$f_n = c_n \left[\frac{m_1\mu_2\chi_n(m_2x_1)\psi'_n(m_1x_1) - m_2\mu_1\chi'_n(m_2x_1)\psi_n(m_1x_1)}{m_1\mu_1\chi_n(m_2x_1)\psi'_n(m_2x_1) - m_1\mu_1\chi'_n(m_2x_1)\psi_n(m_2x_1)} \right], \quad (2.21)$$

ahora multiplicando la ec. (2.15) por $-\mu_1\chi'_n(m_2x_1)$ más la ec. (2.16) multiplicada por $m_1\psi_n(m_2x_1)$, se tiene

$$v_n = c_n \left[\frac{m_1\mu_2\psi_n(m_2x_1)\psi'_n(m_1x_1) - m_2\mu_1\psi_n(m_1x_1)\psi'_n(m_2x_1)}{m_1\mu_1\zeta_n(m_2x_1)\psi'_n(m_2x_1) - m_1\mu_1\zeta'_n(m_2x_1)\psi_n(m_2x_1)} \right]. \quad (2.22)$$

Se define otro nuevo coeficiente $B_n^{(2)}$ como

$$\begin{aligned} B_n^{(2)} = \frac{v_n}{f_n} &= \frac{c_n \left[\frac{m_1\mu_2\psi_n(m_2x_1)\psi'_n(m_1x_1) - m_2\mu_1\psi_n(m_1x_1)\psi'_n(m_2x_1)}{m_1\mu_1\chi_n(m_2x_1)\psi'_n(m_2x_1) - m_1\mu_1\chi'_n(m_2x_1)\psi_n(m_2x_1)} \right]}{c_n \left[\frac{m_1\mu_2\chi_n(m_2x_1)\psi'_n(m_1x_1) - m_2\mu_1\chi'_n(m_2x_1)\psi_n(m_1x_1)}{m_1\mu_1\chi_n(m_2x_1)\psi'_n(m_2x_1) - m_1\mu_1\chi'_n(m_2x_1)\psi_n(m_2x_1)} \right]} \\ &= \frac{m_1\mu_2\psi_n(m_2x_1)\psi'_n(m_1x_1) - m_2\mu_1\psi_n(m_1x_1)\psi'_n(m_2x_1)}{m_1\mu_2\chi_n(m_2x_1)\psi'_n(m_1x_1) - m_2\mu_1\chi'_n(m_2x_1)\psi_n(m_1x_1)} \\ &= \frac{m_2\mu_1\psi_n(m_1x_1)\psi'_n(m_2x_1) - m_1\mu_2\psi_n(m_2x_1)\psi'_n(m_1x_1)}{m_2\mu_1\chi'_n(m_2x_1)\psi_n(m_1x_1) - m_1\mu_2\chi_n(m_2x_1)\psi'_n(m_1x_1)}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Para el caso de la última capa, debido a las condiciones de frontera de los campos externos, y a las ecs. (2.12a) y (2.12b), se obtiene un nuevo sistema de ecuaciones, en donde:

1. $E_{s\theta} + E_{i\theta} = E_{2\theta}$.

Para el lado izquierdo de la igualdad, se tiene que

$$\begin{aligned} E_{s\theta} + E_{i\theta} &= \cos\phi \sum_{n=1}^{\infty} E_n \pi_n(\cos\theta) \left[j_n(kr) - b_n h_n^{(1)}(kr) \right] + \\ &\quad - i \cos\phi \sum_{n=1}^{\infty} E_n \tau_n(\cos\theta) \left\{ \frac{[(kr)j_n(kr)]'}{kr} - a_n \frac{[(kr)h_n^{(1)}(kr)]'}{kr} \right\}, \end{aligned}$$

mientras que para el lado derecho de la igualdad se obtiene

$$\begin{aligned} E_{2\theta} &= \cos\phi \sum_{n=1}^{\infty} E_n \pi_n(\cos\theta) [f_n j_n(k_2r) - v_n y_n(k_2r)] + \\ &\quad - i \cos\phi \sum_{n=1}^{\infty} E_n \tau_n(\cos\theta) \left\{ g_n \frac{[(k_2r)j_n(k_2r)]'}{k_2r} - w_n \frac{[(k_2r)y_n(k_2r)]'}{k_2r} \right\}. \end{aligned}$$

Entonces, al comparar los términos que acompañan a la eigenfunción angular $\pi_n(\cos\theta)$ en ambos lados de la igualdad, se cumple que

$$\begin{aligned} \frac{\psi_n(kb)}{kb} - b_n \frac{\zeta_n(kb)}{kb} &= f_n \frac{\psi_n(m_2kb)}{m_2kb} - v_n \frac{\chi_n(m_2kb)}{m_2kb}, \\ m_2 b_n \zeta_n(x_2) - m_2 \psi_n(x_2) + f_n \psi_n(m_2x_2) - v_n \chi_n(m_2x_2) &= 0, \end{aligned}$$

donde $x_2 = kb$. Análogamente, considerando sólo a los términos que acompañan a la eigenfunción angular $\tau_n(\cos\theta)$ en ambos lados de la igualdad, se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{[(kb)\frac{\psi_n(kb)}{kb}]'}{kb} - a_n \frac{[(kb)\frac{\zeta_n(kb)}{kb}]'}{kb} &= g_n \frac{[(m_2kb)\frac{\psi_n(m_2kb)}{m_2kb}]'}{m_2kb} - w_n \frac{[(m_2kb)\frac{\chi_n(m_2kb)}{m_2kb}]'}{m_2kb}, \\ m_2 \psi'_n(x_2) - a_n m_2 \zeta'_n(x_2) - g_n \psi'_n(m_2x_2) + w_n \chi'_n(m_2x_2) &= 0. \end{aligned}$$

$$2. H_{s\theta} + H_{i\theta} = H_{2\theta}.$$

Para el lado izquierdo de la igualdad, se tiene que

$$\begin{aligned} H_{s\theta} + H_{i\theta} &= \frac{k \sin \phi}{\omega \mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \pi_n(\cos \theta) \left[j_n(kr) - a_n h_n^{(1)}(kr) \right] + \\ &\quad - i \frac{k \sin \phi}{\omega \mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \tau_n(\cos \theta) \left\{ \frac{[(kr)j_n(kr)]'}{kr} - b_n \frac{[(kr)h_n^{(1)}(kr)]'}{kr} \right\}, \end{aligned}$$

mientras que para el lado derecho de la igualdad se obtiene

$$\begin{aligned} H_{2\theta} &= \frac{k_2 \sin \phi}{\omega \mu_2} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \pi_n(\cos \theta) [g_n j_n(k_2 r) - w_n y_n(k_2 r)] + \\ &\quad - i \frac{k_2 \sin \phi}{\omega \mu_2} \sum_{n=1}^{\infty} E_n \tau_n(\cos \theta) \left\{ f_n \frac{[(k_2 r)j_n(k_2 r)]'}{k_2 r} - v_n \frac{[(k_2 r)y_n(k_2 r)]'}{k_2 r} \right\}. \end{aligned}$$

Entonces, si se igualan los términos asociados a la eigenfunción angular $\pi_n(\cos \theta)$ en ambos lados de la igualdad, se tiene que

$$\begin{aligned} \frac{k}{\mu} \left[\frac{\psi_n(kb)}{kb} - a_n \frac{\zeta_n(kb)}{kb} \right] &= \frac{k_2}{\mu_2} \left[g_n \frac{\psi_n(m_2 kb)}{m_2 kb} - w_n \frac{\zeta_n(m_2 kb)}{m_2 kb} \right], \\ \mu_2 \psi_n(x_2) - a_n \mu_2 \zeta_n(x_2) - g_n \mu \psi_n(m_2 x_2) + w_n \mu \chi_n(m_2 x_2) &= 0. \end{aligned}$$

Finalmente para la eigenfunción angular $\tau_n(\cos \theta)$ se cumple que

$$\begin{aligned} \frac{k}{\mu} \left\{ \frac{[(kb) \frac{\psi_n(kb)}{kb}]'}{kb} - b_n \frac{[(kb) \frac{\zeta_n(kb)}{kb}]'}{kb} \right\} &= \frac{k_2}{\mu_2} \left\{ f_n \frac{[(m_2 kb) \frac{\psi_n(m_2 kb)}{m_2 kb}]'}{m_2 kb} - v_n \frac{[(m_2 kb) \frac{\chi_n(m_2 kb)}{m_2 kb}]'}{m_2 kb} \right\}, \\ b_n \mu_2 \zeta_n'(x_2) - \mu_2 \psi_n'(x_2) + f_n \mu \psi_n'(m_2 x_2) - v_n \mu \chi_n'(m_2 x_2) &= 0, \end{aligned}$$

entonces se tiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$m_2 \psi_n'(x_2) - a_n m_2 \zeta_n'(x_2) - g_n \psi_n'(m_2 x_2) + w_n \chi_n'(m_2 x_2) = 0, \quad (2.24)$$

$$m_2 b_n \zeta_n(x_2) - m_2 \psi_n(x_2) + f_n \psi_n(m_2 x_2) - v_n \chi_n(m_2 x_2) = 0, \quad (2.25)$$

$$\mu_2 \psi_n(x_2) - a_n \mu_2 \zeta_n(x_2) - g_n \mu \psi_n(m_2 x_2) + w_n \mu \chi_n(m_2 x_2) = 0, \quad (2.26)$$

$$b_n \mu_2 \zeta_n'(x_2) - \mu_2 \psi_n'(x_2) + f_n \mu \psi_n'(m_2 x_2) - v_n \mu \chi_n'(m_2 x_2) = 0. \quad (2.27)$$

Por un lado, multiplicando a la ec. (2.24) por $-\mu \chi_n(m_2 x_2)$ más la ec. (2.26) multiplicada por $\chi_n'(m_2 x_2)$, se tiene

$$g_n = \frac{a_n [m_2 \mu \chi_n(m_2 x_2) \zeta_n'(x_2) - \mu_2 \chi_n'(m_2 x_2) \zeta_n(x_2)] + \mu_2 \chi_n'(m_2 x_2) \psi_n(x_2) - m_2 \mu \chi_n(m_2 x_2) \psi_n'(x_2)}{\mu [\chi_n'(m_2 x_2) \psi_n(m_2 x_2) - \chi_n(m_2 x_2) \psi_n'(m_2 x_2)]},$$

por otro lado, multiplicando a la ec. (2.24) por $-\mu \psi_n(m_2 x_2)$ mas la ec. (2.26) multiplicada por $\psi_n'(m_2 x_2)$, se tiene

$$w_n = \frac{a_n [m_2 \mu \zeta_n'(x_2) \psi_n(m_2 x_2) - \mu_2 \zeta_n(x_2) \psi_n'(m_2 x_2)] + \mu_2 \psi_n(x_2) \psi_n'(m_2 x_2) - m_2 \mu \psi_n(m_2 x_2) \psi_n'(x_2)}{\mu [\chi_n'(m_2 x_2) \psi_n(m_2 x_2) - \chi_n(m_2 x_2) \psi_n'(m_2 x_2)]},$$

pero $A_n^{(2)} = w_n/g_n$, por lo que se obtiene

$$A_n^{(2)} = \frac{a_n [m_2 \mu \zeta_n'(x_2) \psi_n(m_2 x_2) - \mu_2 \zeta_n(x_2) \psi_n'(m_2 x_2)] + \mu_2 \psi_n(x_2) \psi_n'(m_2 x_2) - m_2 \mu \psi_n(m_2 x_2) \psi_n'(x_2)}{a_n [m_2 \mu \chi_n(m_2 x_2) \zeta_n'(x_2) - \mu_2 \chi_n'(m_2 x_2) \zeta_n(x_2)] + \mu_2 \chi_n'(m_2 x_2) \psi_n(x_2) - m_2 \mu \chi_n(m_2 x_2) \psi_n'(x_2)},$$

por lo tanto

$$a_n = \frac{\mu_2 \psi_n(x_2) \left[\psi_n'(m_2 x_2) - A_n^{(2)} \chi_n'(m_2 x_2) \right] - m_2 \mu \psi_n'(x_2) \left[\psi_n(m_2 x_2) - A_n^{(2)} \chi_n(m_2 x_2) \right]}{\mu_2 \zeta_n(x_2) \left[\psi_n'(m_2 x_2) - A_n^{(2)} \chi_n'(m_2 x_2) \right] - m_2 \mu \zeta_n'(x_2) \left[\psi_n(m_2 x_2) - A_n^{(2)} \chi_n(m_2 x_2) \right]}. \quad (2.28)$$

De manera análoga, se obtiene el coeficiente b_n . Multiplicando a la ec. (2.25) por $-\mu\chi'_n(m_2x_2)$ mas la ec. (2.27) multiplicada por $\chi_n(m_2x_2)$, se tiene

$$f_n = \frac{b_n [\mu_2\chi_n(m_2x_2)\zeta'_n(x_2) - m_2\mu\chi'_n(m_2x_2)\zeta_n(x_2)] + m_2\mu\chi'_n(m_2x_2)\psi_n(x_2) - \mu_2\chi_n(m_2x_2)\psi'_n(x_2)}{\mu [\chi'_n(m_2x_2)\psi_n(m_2x_2) - \chi_n(m_2x_2)\psi'_n(m_2x_2)]},$$

ahora si se multiplica a la ec. (2.25) por $-\mu\psi'_n(m_2x_2)$ mas la ec. (2.27) multiplicada por $\psi_n(m_2x_2)$, se tiene

$$v_n = \frac{b_n [\mu_2\zeta'_n(x_2)\psi_n(m_2x_2) - m_2\mu\zeta_n(x_2)\psi'_n(m_2x_2)] + m_2\mu\psi_n(x_2)\psi'_n(m_2x_2) - \mu_2\psi_n(m_2x_2)\psi'_n(x_2)}{\mu [\chi'_n(m_2x_2)\psi_n(m_2x_2) - \chi_n(m_2x_2)\psi'_n(m_2x_2)]},$$

donde $B_n^{(2)} = v_n/f_n$, entonces

$$B_n^{(2)} = \frac{b_n [\mu_2\zeta'_n(x_2)\psi_n(m_2x_2) - m_2\mu\zeta_n(x_2)\psi'_n(m_2x_2)] + m_2\mu\psi_n(x_2)\psi'_n(m_2x_2) - \mu_2\psi_n(m_2x_2)\psi'_n(x_2)}{b_n [\mu_2\chi_n(m_2x_2)\zeta'_n(x_2) - m_2\mu\chi'_n(m_2x_2)\zeta_n(x_2)] + m_2\mu\chi'_n(m_2x_2)\psi_n(x_2) - \mu_2\chi_n(m_2x_2)\psi'_n(x_2)},$$

finalmente

$$b_n = \frac{m_2\mu\psi_n(x_2) [\psi'_n(m_2x_2) - B_n^{(2)}\chi'_n(m_2x_2)] - \mu_2\psi'_n(x_2) [\psi_n(m_2x_2) - B_n^{(2)}\chi_n(m_2x_2)]}{m_2\mu\zeta_n(x_2) [\psi'_n(m_2x_2) - B_n^{(2)}\chi'_n(m_2x_2)] - \mu_2\zeta'_n(x_2) [\psi_n(m_2x_2) - B_n^{(2)}\chi_n(m_2x_2)]}. \quad (2.29)$$

Las secciones transversales de esparcimiento, extinción y absorción, dadas por las ecs. (1.58)–(1.60) [4], son válidas para el caso *core-shell*, entonces para calcular las secciones transversales C_{scat} , C_{ext} y C_{abs} de una partícula esférica concéntrica tipo *core-shell*, basta con sustituir los valores calculados para a_n y b_n [ecs. (2.28) y (2.29)] en las ecs. (1.58)–(1.60).

Capítulo 3

Aproximación cuasi-estática

Para calcular el campo esparcido producido por un elipsoide, caracterizado por una función dieléctrica ε_1 , de semieje mayor a mucho menor que la longitud de onda de la luz incidente, se puede considerar la aproximación de que todo el elipsoide está sujeto a un campo eléctrico de la misma intensidad y dirección (dado que $a \ll \lambda$, \vec{E} no tiene variaciones significativas en la región ocupada por el elipsoide). A este régimen se le conoce como límite *cuasi-estático*.

Se conoce como dipolo eléctrico a la configuración de dos cargas puntuales q y $-q$ que se encuentran separadas a una distancia d [ver Fig. 3.1], cuyo momento dipolar es $\vec{p} = p\hat{e}_z$, donde $p = qd$. Si las cargas se encuentran embebidas en un medio homogéneo e infinito, caracterizado por una función dieléctrica ε_m , el potencial ϕ del dipolo en cualquier punto P es [4, 74]

$$\phi = \frac{q}{4\pi\varepsilon_m} \left(\frac{1}{r_+} - \frac{1}{r_-} \right),$$

donde por ley de cosenos [ver Fig. 3.1]

$$r_{\pm}^2 = r^2 + \left(\frac{d}{2}\right)^2 \mp rd \cos \theta = r^2 \left(1 \mp \frac{d}{r} \cos \theta + \frac{d^2}{4r^2} \right) = r^2 \left(1 \mp \frac{\vec{r} \cdot \hat{e}_z}{r^2} d + \frac{d^2}{4r^2} \right)$$

o bien

$$\frac{1}{r_{\pm}} = \frac{1}{r} \left(1 \mp \frac{\vec{r} \cdot \hat{e}_z}{r^2} d + \frac{d^2}{4r^2} \right)^{-1/2}.$$

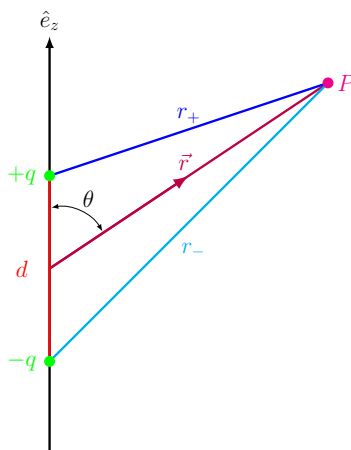


Figura 3.1: Dipolo eléctrico.

Ya que el régimen de interés es $r \gg d$, el tercer término de la ecuación anterior es cero. Si se aplica una expansión de serie binomial se obtiene

$$\frac{1}{r_{\pm}} \cong \frac{1}{r} \left(1 \mp \frac{\vec{r} \cdot \hat{e}_z}{r^2} d \right)^{-1/2} \cong \frac{1}{r} \left(1 \pm \frac{\vec{r} \cdot \hat{e}_z}{2r^2} d \right), \quad (3.1)$$

entonces

$$\frac{1}{r_+} - \frac{1}{r_-} = \frac{\vec{r} \cdot \hat{e}_z}{2r^3} d. \quad (3.2)$$

Si d se aproxima a cero de tal manera que el producto qd se mantenga constante, se obtiene el potencial de un dipolo puntual [74]

$$\phi_{\text{Dipolar}} = \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{4\pi\epsilon_m r^3} = \frac{p \cos \theta}{4\pi\epsilon_m r^2}. \quad (3.3)$$

Si el momento dipolar $\vec{p} = \epsilon_m \alpha E_0 e^{-i\omega t} \hat{e}_x$ de un dipolo puntual, localizado en $z = 0$ e iluminado por un campo electromagnético incidente polarizado en la dirección \hat{e}_x , $\vec{E} = E_0 \exp[i(kz - \omega t)] \hat{e}_x$, oscila con la frecuencia del campo incidente, entonces el dipolo radia campo electromagnético, es decir, esparce un campo eléctrico \vec{E}_{scat} [75] dado por

$$\vec{E}_{\text{scat}} = \frac{e^{ikr}}{-ikr} \frac{ik^3}{4\pi\epsilon_m} \hat{e}_r \times (\hat{e}_r \times \vec{p}), \quad (kr \gg 1) \quad (3.4)$$

donde el factor de dependencia temporal $e^{-i\omega t}$ se ha omitido. Sustituyendo el momento dipolar de un dipolo puntual en la ec. (3.4), \vec{E}_{scat} , se puede reescribir como

$$\vec{E}_{\text{scat}} = \frac{e^{ikr}}{-ikr} \frac{ik^3}{4\pi\epsilon_m} (\epsilon_m \alpha E_0) \hat{e}_r \times (\hat{e}_r \times \hat{e}_x) = \frac{e^{ik(r-z)}}{-ikr} \frac{ik^3}{4\pi} (\alpha E_0 e^{ikz}) \hat{e}_r \times (\hat{e}_r \times \hat{e}_x) = \frac{e^{ikr}}{-ikr} \vec{X} E,$$

donde el vector de amplitud de esparcimiento es

$$\vec{X} = \alpha \frac{ik^3}{4\pi} \hat{e}_r \times (\hat{e}_r \times \hat{e}_x), \quad (3.5)$$

con $\hat{e}_r \times (\hat{e}_r \times \hat{e}_x) = \sin \theta \cos \phi \hat{e}_r - \hat{e}_x$ y además $E = E_0 e^{ikz}$. En consecuencia, el coeficiente de extinción está dado por [4]

$$C_{\text{ext}} = \frac{4\pi}{k^2} \text{Re} \left[\left(\vec{X} \cdot \hat{e}_x \right)_{\theta=0} \right] = \frac{4\pi}{k^2} \text{Re} \left[\alpha \frac{ik^3}{4\pi} (\sin^2 \theta \cos^2 \phi - 1)_{\theta=0} \right] = k \text{Re} [-i\alpha],$$

pero la polarizabilidad compleja es $\alpha = \alpha_1 + i\alpha_2$ por lo que $-i\alpha = \alpha_2 - i\alpha_1$, de manera que la parte real de $-i\alpha$ es igual a la parte imaginaria de la polarizabilidad; por lo tanto

$$C_{\text{ext}} = k \text{Im} [\alpha]. \quad (3.6)$$

Asimismo, el coeficiente de esparcimiento está descrito por la integral [4]

$$\begin{aligned} C_{\text{scat}} &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{|\vec{X}|^2}{k^2} \sin \theta d\theta d\phi \\ &= \left[\frac{(\alpha \cdot \alpha^*) k^4}{(4\pi)^2} \right] \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (\sin^2 \theta \cos^2 \phi + 1) \sin \theta d\theta d\phi \\ &= \left[\frac{2|\alpha|^2 k^4}{(4\pi)^2} \right] \left(\frac{2}{3} \int_0^{2\pi} \cos^2 \phi d\phi + \int_0^{2\pi} d\phi \right), \end{aligned}$$

entonces

$$C_{\text{scat}} = \frac{k^4}{6\pi} |\alpha|^2, \quad (3.7)$$

y se tiene que [4]

$$C_{\text{abs}} = C_{\text{ext}} - C_{\text{scat}}. \quad (3.8)$$

3.1. Aproximación cuasi-estática: elipsoide

En esta sección se describe el problema de 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 $\lambda \gg a > b > c$ [4]. El problema se plantea como la interacción de una onda EM monocromática plana sobre el sistema que se muestra en la Fig. 3.2.

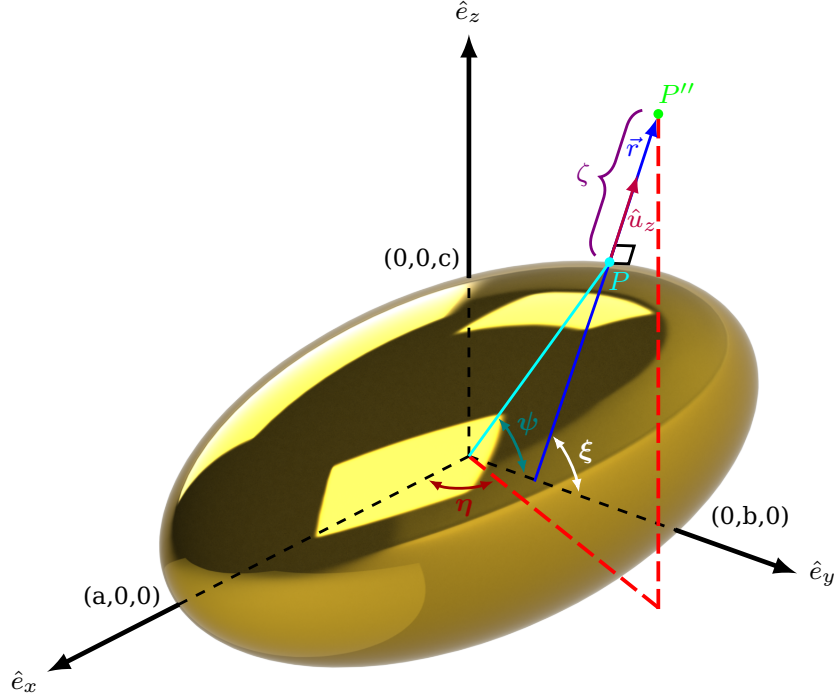


Figura 3.2: Geometría del problema de esparcimiento para un sistema coordinado elipsoidal centrado en el origen, con semiejes (a, b, c) , $a > b > c$.

Empleando un sistema de coordenadas elipsoidales $(\hat{e}_\xi, \hat{e}_\eta, \hat{e}_\zeta)$, conveniente para la simetría del problema, éstas se pueden relacionar con las coordenadas cartesianas por medio de [76]

$$\frac{x^2}{a^2 + u} + \frac{y^2}{b^2 + u} + \frac{z^2}{c^2 + u} = 1, \quad (3.9)$$

donde $a > b > c$. La ecuación para calcular u de la ec. (3.9) corresponde a un polinomio de tercer grado, por lo que tiene tres raíces reales diferentes ξ, η, ζ , que se encuentra en el siguiente rango

$$-c^2 < \xi < \infty, \quad -b^2 < \eta < -c^2, \quad -a^2 < \zeta < -b^2, \quad (3.10)$$

por lo cual

$$\frac{x^2}{a^2 + \xi} + \frac{y^2}{b^2 + \xi} + \frac{z^2}{c^2 + \xi} = 1, \quad -c^2 < \xi < \infty; \quad (3.11a)$$

$$\frac{x^2}{a^2 + \eta} + \frac{y^2}{b^2 + \eta} + \frac{z^2}{c^2 + \eta} = 1, \quad -b^2 < \eta < -c^2; \quad (3.11b)$$

$$\frac{x^2}{a^2 + \zeta} + \frac{y^2}{b^2 + \zeta} + \frac{z^2}{c^2 + \zeta} = 1, \quad -a^2 < \zeta < -b^2. \quad (3.11c)$$

Utilizando estas coordenadas elipsoidales, para una superficie en donde $\xi = \text{constante}$, se obtienen un elipsoide cofocal.¹ La superficie de la partícula en cuestión, se encuentra en el lugar geométrico definido por $\xi = 0$. Cuando la superficie $\eta = \text{constante}$, se obtiene un hiperboloide de una hoja y para cuando la superficie $\zeta = \text{constante}$ se tiene un hiperboloide de dos hojas.

¹A las secciones cónicas en las que su foco coincide se les denomina cofocales. Una superficie cuádrlica cuyos planos principales son los mismos y cuyas secciones en cualquiera de estos planos son cónicas cofocales es una cuádrlica cofocal [77]

Para expresar las coordenadas cartesianas en términos de las coordenadas elipsoidales, se debe resolver el sistema de ecuaciones (3.11), el cual se puede expresar como un arreglo matricial ($AX = B$), de tal forma que

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

donde la inversa de la matriz de coeficientes es igual a

$$\begin{pmatrix} \frac{(a^2 + \xi)(b^2 + \xi)(c^2 + \xi)(a^2 + \eta)(a^2 + \zeta)}{(a^2 - b^2)(a^2 - c^2)(\xi - \eta)(\xi - \zeta)} & \frac{(a^2 + \xi)(a^2 + \eta)(b^2 + \eta)(c^2 + \eta)(a^2 + \zeta)}{(b^2 - a^2)(a^2 - c^2)(\zeta - \eta)(\eta - \zeta)} & -\frac{(a^2 + \xi)(a^2 + \eta)(a^2 + \zeta)(b^2 + \zeta)(c^2 + \zeta)}{(a^2 - b^2)(a^2 - c^2)(\xi - \zeta)(\zeta - \eta)} \\ \frac{(a^2 + \xi)(b^2 + \xi)(c^2 + \xi)(b^2 + \eta)(b^2 + \zeta)}{(b^2 - a^2)(b^2 - c^2)(\xi - \eta)(\xi - \zeta)} & \frac{(c^2 + \eta)(b^2 + \zeta)(b^2 + \xi)(b^2 + \eta)(a^2 + \eta)}{(b^2 - c^2)(a^2 - b^2)(\xi - \eta)(\eta - \zeta)} & \frac{(b^2 + \xi)(b^2 + \eta)(a^2 + \zeta)(b^2 + \zeta)(c^2 + \zeta)}{(a^2 - b^2)(b^2 - c^2)(\xi - \zeta)(\zeta - \eta)} \\ -\frac{(a^2 + \xi)(b^2 + \xi)(c^2 + \xi)(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)}{(a^2 - c^2)(c^2 - b^2)(\xi - \eta)(\xi - \zeta)} & \frac{(c^2 + \xi)(a^2 + \eta)(b^2 + \eta)(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)}{(a^2 - c^2)(c^2 - b^2)(\xi - \eta)(\eta - \zeta)} & \frac{(c^2 + \xi)(c^2 + \eta)(a^2 + \zeta)(b^2 + \zeta)(c^2 + \zeta)}{(a^2 - b^2)(c^2 - b^2)(\xi - \zeta)(\zeta - \eta)} \end{pmatrix},$$

entonces

$$x^2 = \frac{(a^2 + \xi)(a^2 + \eta)(a^2 + \zeta)}{(b^2 - a^2)(c^2 - a^2)}, \quad (3.12a)$$

$$y^2 = \frac{(b^2 + \xi)(b^2 + \eta)(b^2 + \zeta)}{(a^2 - b^2)(c^2 - b^2)}, \quad (3.12b)$$

$$z^2 = \frac{(c^2 + \xi)(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)}{(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)}. \quad (3.12c)$$

Si el elipsoide se encuentra bajo un campo eléctrico incidente uniforme alineado a largo del eje \hat{e}_z , el potencial ϕ tiene las siguientes propiedades de simetría

$$\begin{aligned} \phi(x, y, z) &= \phi(-x, y, z) = \phi(x, -y, z) = \phi(-x, -y, z), \\ \phi(x, y, -z) &= \phi(-x, y, -z) = \phi(x, -y, -z) = \phi(-x, -y, -z), \end{aligned} \quad (3.13)$$

donde x, y, z son positivas. Es necesario que el potencial y su derivada con respecto a z sean continuos en el plano $z = 0$. El campo incidente $\vec{E}_0 = E_0 \hat{e}_z$ se puede describir mediante el potencial de la siguiente forma

$$\phi_0 = -E_0 r \cos \theta = -E_0 z = -E_0 \left[\frac{(c^2 + \xi)(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)}{(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)} \right]^{1/2}. \quad (3.14)$$

Asimismo, se debe considerar un potencial de perturbación ϕ_p , el cual contiene la información del esparramiento producido por la partícula. En consecuencia, el potencial fuera de la partícula ϕ_{ext} , es la superposición del potencial ϕ_0 y el potencial de perturbación ϕ_p , es decir

$$\phi_{\text{ext}}(0, \eta, \zeta) = \phi_0(0, \eta, \zeta) + \phi_p(0, \eta, \zeta). \quad (3.15)$$

Además, para distancias suficientemente lejanas a la partícula, es decir, si $\xi \gg a^2$, al factorizar ξ de la ec. (3.11a) se obtiene

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

por lo tanto

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} \left(\frac{x^2}{1 + \frac{a^2}{\xi}} + \frac{y^2}{1 + \frac{b^2}{\xi}} + \frac{z^2}{1 + \frac{c^2}{\xi}} \right) = x^2 + y^2 + z^2 = r^2,$$

entonces $\xi \simeq r^2$, por lo cual el potencial de perturbación es despreciable

$$\lim_{\xi \rightarrow \infty} \phi_p = 0, \quad (3.16)$$

Sean ϕ_{int} y ε_1 el potencial y a la permitividad eléctrica, respectivamente, en el interior del elipsoide y las mismas cantidades ϕ_{ext} y ε_m , para la región externa. Las condiciones de contorno para este sistema,

derivadas a partir de los requerimientos de continuidad del potencial y de la ley de Gauss, establecen que

$$\phi_{\text{int}} = \phi_{\text{ext}}, \quad (3.17a)$$

$$\varepsilon_1 \frac{\partial \phi_{\text{int}}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=0} = \varepsilon_m \frac{\partial \phi_{\text{ext}}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=0}. \quad (3.17b)$$

Para hacer un cambio de base de un sistema a otro, se debe encontrar un vector unitario en la dirección de la coordenada i , que mide cómo es que cambia el vector de posición en una dirección dada, y se define como [78]

$$\hat{e}_i = \frac{1}{h_i} \left(\frac{\partial \vec{r}}{\partial q_i} \right), \quad i = 1, 2, 3, \quad (3.18)$$

donde h_i es el factor de escala

$$h_i = \left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_i} \right| = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial q_i} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial q_i} \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial q_i} \right)^2}. \quad (3.19)$$

Por un lado, se tiene que

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

si se itera el proceso anterior para y y z , se tiene que el cuadrado del primer factor de escala h_1 es

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

Por otro lado, a partir de la ec. (3.9), se propone [79]

$$1 - \frac{x^2}{a^2 + u} - \frac{y^2}{b^2 + u} - \frac{z^2}{c^2 + u} = \frac{g(u)}{(a^2 + u)(b^2 + u)(c^2 + u)}, \quad (3.20)$$

donde $g(u)$ es una función cúbica con tres raíces reales dentro del rango descrito por la ec. (3.10). Considerando la función $g(u) = (u - \xi)(u - \eta)(u - \zeta)$, entonces al derivar la ec. (3.20) con respecto a u , se obtiene

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

donde la función $f(u)$ está definida como

$$f(u) = \sqrt{(a^2 + u)(b^2 + u)(c^2 + u)}, \quad (3.21)$$

entonces

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

Al momento de evaluar $u \rightarrow \xi$, se tiene que el factor de escala h_1 es

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

análogamente

$$h_2 = \frac{\sqrt{(\eta - \xi)(\eta - \zeta)}}{2f(\eta)},$$

y

$$h_3 = \frac{\sqrt{(\zeta - \xi)(\zeta - \eta)}}{2f(\zeta)}.$$

Asimismo, el laplaciano en coordenadas generalizadas se denota como [79]

$$\nabla^2 \phi = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\partial}{\partial q_1} \left(\frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\partial \phi}{\partial q_1} \right) + \frac{\partial}{\partial q_2} \left(\frac{h_3 h_1}{h_2} \frac{\partial \phi}{\partial q_2} \right) + \frac{\partial}{\partial q_3} \left(\frac{h_1 h_2}{h_3} \frac{\partial \phi}{\partial q_3} \right) \right], \quad (3.22)$$

donde ϕ es un escalar invariante. Por lo tanto, el laplaciano en coordenadas elipsoidales es

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

con

$$\Lambda = \frac{\sqrt{(\xi - \eta)(\xi - \zeta)(\eta - \xi)(\eta - \zeta)(\zeta - \xi)(\zeta - \eta)}}{8f(\xi)f(\eta)f(\zeta)},$$

entonces

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

donde Υ se le conoce como el valor absoluto del determinante funcional [80], que es

$$\Upsilon = (\xi - \eta)(\zeta - \xi)(\eta - \zeta).$$

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

$$\begin{aligned} \nabla^2 \phi &= (\eta - \zeta)f(\xi) \frac{\partial}{\partial \xi} \left(f(\xi) \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right) \\ &+ (\zeta - \xi)f(\eta) \frac{\partial}{\partial \eta} \left(f(\eta) \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) + (\xi - \eta)f(\zeta) \frac{\partial}{\partial \zeta} \left(f(\zeta) \frac{\partial \phi}{\partial \zeta} \right) = 0, \end{aligned} \quad (3.23)$$

la cual, a pesar de ser considerablemente simétrica, no es sencilla de resolver. Hasta este punto, se podría buscar una solución separable al potencial y expandir el potencial real como una suma de armónicos elipsoidales², pero en vista de que la solución a esta ecuación está determinada por la forma del campo incidente, que a su vez está descrito por el potencial (3.23), y que necesariamente cumple las condiciones de contorno (3.15), entonces se proponen los potenciales ϕ_{int} y ϕ_p de la siguiente forma

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

donde $F(\xi)$ es una función que satisface la ecuación diferencial [4]

$$f(\xi) \frac{d}{d\xi} \left[f(\xi) \frac{dF(\xi)}{d\xi} \right] - \left(\frac{a^2 + b^2}{4} + \frac{\xi}{2} \right) F(\xi) = 0. \quad (3.24)$$

Existen dos soluciones linealmente independientes a la ecuación diferencial (ordinaria) anterior. Se propone la primera solución como

$$F_1(\xi) = (c^2 + \xi)^{1/2}, \quad (3.25)$$

y la segunda solución se obtendrá mediante el método de reducción de orden [82]. Como $F_1(\xi)$ es solución de la ec. (3.24), es válido decir que $F_2(\xi) = cF_1(\xi)$ también es solución, para cualquier constante c . Si se reemplaza c por alguna función $c = v(\xi)$, entonces se tendrá una solución de la forma

$$F_2(\xi) = v(\xi)F_1(\xi).$$

Derivando la ecuación anterior respecto a ξ

$$\begin{aligned} \frac{dF_2(\xi)}{d\xi} &= F_1(\xi) \frac{dv(\xi)}{d\xi} + v(\xi) \frac{dF_1(\xi)}{d\xi}, \\ \frac{d^2 F_2(\xi)}{d\xi^2} &= F_1(\xi) \frac{d^2 v(\xi)}{d\xi^2} + 2 \frac{dv(\xi)}{d\xi} \frac{dF_1(\xi)}{d\xi} + v(\xi) \frac{d^2 F_1(\xi)}{d\xi^2}, \end{aligned}$$

y sustituyendo las derivadas anteriores en la ec. (3.24), se obtiene

$$f^2(\xi)F_1(\xi) \frac{d^2 v(\xi)}{d\xi^2} + \frac{dv(\xi)}{d\xi} \left[f(\xi)F_1(\xi) \frac{df(\xi)}{d\xi} + 2f^2(\xi) \frac{dF_1(\xi)}{d\xi} \right] = 0. \quad (3.26)$$

²Esta clase de funciones, junto con funciones análogas en varios sistemas de coordenadas, donde se mencionan muchas de sus propiedades, pueden encontrarse en [81].

Proponiendo el cambio de variable $V(\xi) = dv(\xi)/d\xi$, se tiene

$$\frac{1}{V(\xi)} \frac{dV(\xi)}{d\xi} = -\frac{1}{f^2(\xi)F_1(\xi)} \left[f(\xi)F_1(\xi) \frac{df(\xi)}{d\xi} + 2f^2(\xi) \frac{dF_1(\xi)}{d\xi} \right].$$

Integrando la ecuación anterior, se obtiene

$$\begin{aligned} \ln [V(q)] &= \int^q \frac{1}{V(\xi)} dV(\xi) = - \left[\int^q \frac{df(\xi)}{f(\xi)} + 2 \int^q \frac{dF_1(\xi)}{F_1(\xi)} \right] \\ &= - \{ \ln [f(q)] + \ln [F_1^2(q)] \} = - \ln [F_1^2(q)f(q)], \end{aligned}$$

entonces

$$\frac{dv(q)}{dq} = \frac{1}{F_1^2(q)f(q)},$$

donde $dv(q)/dq \neq 0$, por lo que $v(q) \neq$ constante. Integrando lo anterior se tiene

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

por lo tanto

$$F_2(\xi) = F_1(\xi) \int_{\xi}^{\infty} \frac{dq}{F_1^2(q)f(q)}, \quad (3.27)$$

donde, en principio, los límites de integración son arbitrarios, sin embargo se han elegido los que aparecen en la ec. (3.27), pues al escribir explícitamente el integrando [usando las ecs. (3.21) y (3.25)], se obtiene

$$\begin{aligned} F_2(\xi) &= F_1(\xi) \int_{\xi}^{\infty} \frac{dq}{(c^2 + q) [(a^2 + q)(b^2 + q)(c^2 + q)]^{1/2}} \\ &= \frac{2F_1(\xi)}{c^2 - b^2} \left\{ \left[\frac{b^2 + q}{(a^2 + q)(c^2 + q)} \right]^{1/2} - \frac{1}{(a^2 - c^2)^{1/2}} E \left(\arcsin \left(\frac{\sqrt{a^2 - c^2}}{\sqrt{a^2 + q}} \right) \middle| \frac{a^2 - b^2}{a^2 - c^2} \right) \right\} \Bigg|_0^{\infty}, \end{aligned}$$

donde $E(\phi | k)$ es una integral elíptica de segundo orden definida como [83]

$$E(x | m) = \int_0^x \frac{\sqrt{1 - mt^2}}{\sqrt{1 - t^2}} dt, \quad 0 \leq m \leq 1, \quad (3.28)$$

donde el parámetro m se define como $m \equiv k^2$, el módulo angular es $\alpha = \arcsin k$ y φ es la amplitud que cumple $x = \sin \varphi$. Al evaluar el primer límite de integración (∞) de $F_2(\xi)$, el primer sumando es cero, y en el segundo la función arco seno es cero, por lo cual la parte angular de integral elíptica de segundo orden será igual a cero, obteniendo que $E(0 | m) = 0$. Por lo anterior, las funciones F cumplen con las propiedades

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} F_1(\xi) = c \quad \text{y} \quad \lim_{\xi \rightarrow \infty} F_2(\xi) = 0.$$

De esta forma, los potenciales ϕ_{int} y ϕ_p están dados por

$$\phi_{\text{int}} = C_1 F_1(\xi) [(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)]^{1/2}, \quad (3.29)$$

$$\phi_p = C_2 F_2(\xi) [(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)]^{1/2}, \quad (3.30)$$

donde C_1 y C_2 son constantes que se determinan a partir de las condiciones de frontera, dadas por la ecs. (3.17). Por un lado, de la primera condición de contorno [ec. (3.17a)] se tiene que

$$C_1 F_1(\xi) [(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)]^{1/2} = -E_0 \left[\frac{(c^2 + \xi)(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)}{(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)} \right]^{1/2} + C_2 F_2(\xi) [(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)]^{1/2},$$

entonces

$$C_2 L^{(3)} \left(\frac{2}{abc} \right) - C_1 = \frac{E_0}{[(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)]^{1/2}}. \quad (3.31)$$

Por otro lado, por la segunda condición de contorno [ec. (3.17b)] se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon_1 C_1}{2} \left[\frac{(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)}{(c^2 + \xi)} \right]^{1/2} &= - \frac{\varepsilon_m E_0}{2} \left[\frac{(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)}{(c^2 + \xi)(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)} \right]^{1/2} \\ &+ \frac{\varepsilon_m C_2}{2} \left[\frac{(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)}{(c^2 + \xi)} \right]^{1/2} \int_{\xi}^{\infty} \frac{dq}{F_1^2(q)f(q)} \\ &+ \varepsilon_m C_2 [(c^2 + \xi)(c^2 + \eta)(c^2 + \zeta)]^{1/2} \frac{d}{d\xi} \left\{ \int_{\xi}^{\infty} \frac{dq}{F_1^2(q)f(q)} \right\}, \end{aligned}$$

donde la integral del tercer sumando del lado derecho es³

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} \left[\int_{\xi}^{\infty} \frac{dq}{F_1^2(q)f(q)} \right] &= \frac{d}{d\xi} \left[\lim_{a \rightarrow \infty} \int_{\xi}^a \frac{dq}{F_1^2(q)f(q)} \right] \\ &= \lim_{a \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{F_1^2(a)f(a)} \right] \frac{da}{d\xi} - \left[\frac{1}{F_1^2(\xi)f(\xi)} \right] = - \left[\frac{1}{F_1^2(\xi)f(\xi)} \right], \end{aligned}$$

entonces al evaluar en $\xi = 0$ se obtiene

$$\varepsilon_m C_2 \left(\frac{2}{abc} \right) (L^{(3)} - 1) - \varepsilon_1 C_1 = \frac{\varepsilon_m E_0}{[(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)]^{1/2}}. \quad (3.32)$$

Las constantes C_1 y C_2 se calculan a partir de resolver el sistema de ecuaciones (3.31) y (3.32), por lo cual, al multiplicar la ec. (3.31) por ε_1 menos la ec. (3.32), se obtiene

$$C_2 = \frac{abc}{2} \cdot \frac{E_0 (\varepsilon_1 - \varepsilon_m)}{[(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)]^{1/2}} \left[L^{(3)} (\varepsilon_1 - \varepsilon_m) + \varepsilon_m \right]^{-1},$$

por lo tanto, al sustituir la constante C_2 en la ec. (3.31), la primera constante es igual a

$$C_1 = \frac{E_0}{[(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)]^{1/2}} \left\{ \left[1 + \frac{\varepsilon_m}{L^{(3)} (\varepsilon_1 - \varepsilon_m)} \right]^{-1} - 1 \right\}.$$

Por lo anterior, es posible determinar el potencial dentro de la partícula, a partir de la sustitución de C_1 y $F_1(\xi)$ en la ec. (3.29), por lo que

$$\begin{aligned} \phi_{\text{int}} &= \phi_0 \left\{ 1 - \left[1 + \frac{\varepsilon_m}{L^{(3)} (\varepsilon_1 - \varepsilon_m)} \right]^{-1} \right\} \\ &= \phi_0 \left[1 - \frac{L^{(3)} (\varepsilon_1 - \varepsilon_m)}{L^{(3)} (\varepsilon_1 - \varepsilon_m) + \varepsilon_m} \right] = \phi_0 \left[\frac{\varepsilon_m}{L^{(3)} (\varepsilon_1 - \varepsilon_m) + \varepsilon_m} \right], \end{aligned}$$

entonces

$$\phi_{\text{int}} = \frac{1}{1 + \frac{L^{(3)} (\varepsilon_1 - \varepsilon_m)}{\varepsilon_m}} \phi_0. \quad (3.33)$$

Por otra parte, el potencial de perturbación de la partícula es

$$\phi_p = \frac{abc}{2} \frac{\varepsilon_m - \varepsilon_1}{\varepsilon_m} \int_{\xi}^{\infty} \frac{dq}{F_1^2(q)f(q)} \frac{1}{1 + \frac{L^{(3)} (\varepsilon_1 - \varepsilon_m)}{\varepsilon_m}} \phi_0, \quad (3.34)$$

donde en las ecs. (3.33) y (3.34), a $L^{(3)}$ se le conoce como *factor de depolarización* o *factor geométrico*,⁴ dado por la integral

$$L^{(j)} = \frac{abc}{2} \int_0^{\infty} \frac{dq}{(a_j^2 + q)f(q)}, \quad (3.35)$$

³Regla de Leibniz para integrales: Si una función $G(x)$ está definida mediante la integral $G(x) = \int_{n(x)}^{m(x)} g(t) dt$, entonces

su función derivada es $G'(x) = \left[\int_{n(x)}^{m(x)} g(t) dt \right]' = g[m(x)]m'(x) - g[n(x)]n'(x)$, donde el símbolo *prima* (\prime) representa la derivada de la función respecto a su argumento [71].

⁴De acuerdo con las ecs. (3.33) y (3.34), el término correcto sería "factor geométrico", pero en la literatura se pueden encontrar ambos nombres.

donde el superíndice (j) de L indica la dirección en la que se calcula el factor de depolarización (dirección del campo externo) y a_j denota al semieje del elipsoide orientado en esa misma dirección. Por ejemplo, $L^{(3)}$ [ver Fig. 3.2] se calcula mediante la integral

$$L^{(3)} = \frac{abc}{2} \int_0^\infty \frac{dq}{(c^2 + q)f(q)}.$$

Asimismo, cabe mencionar que sólo dos de los tres factores de depolarización $L^{(1)}$, $L^{(2)}$, $L^{(3)}$ son independientes, ya que deben cumplir la relación [4]

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

donde se satisface que $L^{(1)} \leq L^{(2)} \leq L^{(3)}$. En el caso en que el elipsoide tenga sus semiejes iguales ($a = b = c$), es decir una esfera, se obtiene

$$L_{\text{esfera}} = L^{(1)} = L^{(2)} = L^{(3)} = \frac{a^3}{2} \int_0^\infty \frac{dq}{(a^2 + q)^{5/2}} = \frac{a^3}{2} \left(-\frac{2}{3} \right) \left[\frac{1}{(a^2 + q)^{3/2}} \right] \Big|_0^\infty = \frac{1}{3}.$$

Para distancias r muy alejadas al origen, tales que sean mucho mayores al semieje mayor a [ver Fig. 3.2], es decir, para $\xi \simeq r^2 \gg a^2$, sucede que

$$\int_\xi^\infty \frac{dq}{(c^2 + q)f(q)} \simeq \int_\xi^\infty \frac{dq}{q^{5/2}} = \frac{2}{3} \xi^{-3/2}.$$

Al considerar el potencial de perturbación

$$\phi_p = \frac{abc}{2} \frac{\frac{\varepsilon_m - \varepsilon_1}{\varepsilon_m} \int_\xi^\infty \frac{dq}{F_1^2(q)f(q)}}{1 + \frac{L^{(3)}(\varepsilon_1 - \varepsilon_m)}{\varepsilon_m}} (-E_0 r \cos \theta),$$

si $\xi \simeq r^2 \gg a^2$, el comportamiento asintótico de ϕ_p está descrito por la expresión

$$\phi_p \sim \frac{E_0 \cos \theta}{r^2} \frac{\frac{abc}{3} \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_m}{\varepsilon_m}}{1 + \frac{L^{(3)}(\varepsilon_1 - \varepsilon_m)}{\varepsilon_m}}. \quad (3.36)$$

Retomando el problema de un elipsoide bajo un campo EM uniforme, en donde el potencial fuera del elipsoide es la superposición del potencial aplicado con el potencial de un dipolo puntual en el origen, esto es

$$\phi_0 + \phi_p = \phi_{\text{ext}} = \phi_0 + \phi_{\text{Dipolar}},$$

entonces al sustituir la ec. (3.36) y el potencial de un dipolo puntual en el origen [74] en la ecuación anterior, se obtiene

$$\frac{E_0 \cos \theta}{r^2} \frac{abc \left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_m}{3\varepsilon_m} \right)}{\varepsilon_m + \frac{L^{(3)}(\varepsilon_1 - \varepsilon_m)}{\varepsilon_m}} = \frac{p \cos \theta}{4\pi\varepsilon_m r^2},$$

por lo tanto, \vec{E}_0 genera un dipolo cuyo momento dipolar es

$$\vec{p} = 4\pi\varepsilon_m abc \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_m}{3\varepsilon_m + 3L^{(3)}(\varepsilon_1 - \varepsilon_m)} \vec{E}_0. \quad (3.37)$$

A partir de la ec. (3.37) es posible determinar la polarizabilidad en la dirección \hat{e}_z , ya que

$$\vec{p} = \varepsilon_m \alpha \vec{E}_0,$$

por lo tanto

$$\alpha^{(3)} = V \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_m}{\varepsilon_m + L^{(3)}(\varepsilon_1 - \varepsilon_m)},$$

donde $V = 4\pi abc/3$ es el volumen del elipsoide. Debido a que eligió la dirección \hat{e}_z para calcular un ejemplo en específico, se puede concluir, en general, que la polarizabilidad en una dirección arbitraria j , paralela a algún eje cartesiano es

$$\alpha^{(j)} = V \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_m}{\varepsilon_m + L^{(j)}(\varepsilon_1 - \varepsilon_m)}. \quad (3.38)$$

3.2. Esparcimiento y absorción de ondas electromagnéticas por sistemas tipo *core-shell* elipsoidal

A partir de la aproximación cuasi-estática, es posible resolver el problema de esparcimiento y absorción por un sistema de partícula elipsoidal concéntrica y cofocal *core-shell*, con permitividad eléctrica y permeabilidad magnética ε_1, μ_1 (elipsoide interior) y ε_2, μ_2 (elipsoide exterior), tal y como se muestra en la Fig. 3.3. El sistema de coordenadas se define de acuerdo a los semiejes a_1, b_1 y c_1 del elipsoide interno, es decir

$$\frac{x^2}{a_1^2 + u} + \frac{y^2}{b_1^2 + u} + \frac{z^2}{c_1^2 + u} = 1, \quad (3.39)$$

donde u puede tomar el valor de ξ, η, ζ , y cada variable se encuentra dentro de un rango definido por la ec. (3.10)

$$-c^2 < \xi < \infty, \quad -b^2 < \eta < -c^2, \quad -a^2 < \zeta < -b^2,$$

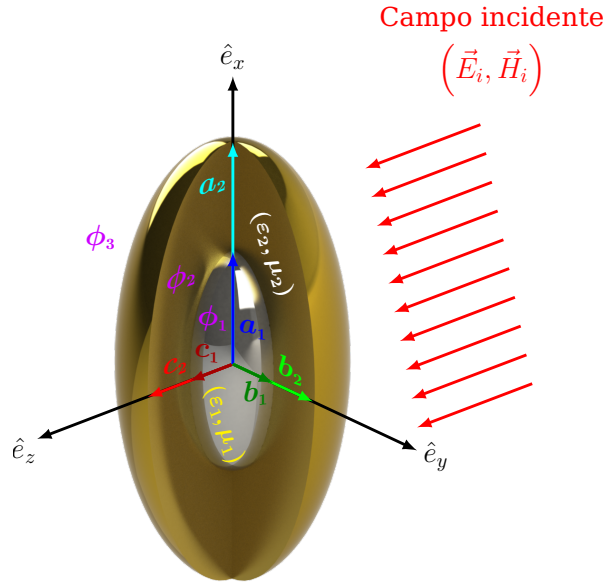


Figura 3.3: Geometría del problema de esparcimiento para un sistema de elipsoides concéntricos y cofocales tipo *core-shell*.

Asimismo, el elipsoide exterior tiene semiejes a_2, b_2 y c_2 , que cumplen con la relación $a_1^2 + t = a_2^2, b_1^2 + t = b_2^2, c_1^2 + t = c_2^2$, que garantiza que el sistema de elipsoides sea cofocal. Definiendo la función [4]

$$G(\eta, \zeta) = \left[\frac{(c_1^2 + \eta)(c_1^2 + \zeta)}{(a_1^2 - c_1^2)(b_1^2 - c_1^2)} \right]^{1/2},$$

y considerando ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 como los potenciales en la región interior, intermedia y externa del elipsoide tipo *core-shell*, respectivamente (ver Fig. 3.3), al igual que en el caso de un solo elipsoide, los potenciales están dados en términos de las soluciones a la ecuación de Laplace en coordenadas elipsoidales, en donde $F_1^{(k)}(\xi)$ y $F_2^{(k)}(\xi)$ están definidas como

$$F_1^{(k)}(\xi) = (c_k^2 + \xi)^{1/2}, \quad (3.40a)$$

$$F_2^{(k)}(\xi) = F_1^{(k)}(\xi) \int_{\xi}^{\infty} \frac{dq}{[F_1^{(k)}(\xi)]^2 f_k(q)}, \quad (3.40b)$$

con $k = 1$ denotando la región interior y $k = 2$ la intermedia (ver Fig. 3.3). El factor geométrico para el elipsoide del núcleo o interior (*core*) y para capa o exterior (*shell*) está dado por:

$$L_k^{(j)} = \frac{a_k b_k c_k}{2} \int_0^\infty \frac{dq}{\left\{ [(a_j)_k]^2 + q \right\} f_k(q)} \quad (k = 1, 2), \quad (3.41)$$

donde nuevamente el superíndice (j) de L indica la dirección en la que se calcula el factor de depolarización y a_j denota al semieje del elipsoide orientado en esa misma dirección, y la función $f_k(u)$ está definida por

$$f_k(u) = \sqrt{(a_k^2 + u)(b_k^2 + u)(c_k^2 + u)}. \quad (3.42)$$

Los potenciales están dados por [4]:

$$\begin{aligned} \phi_1 &= C_1^{(2)} F_1^{(1)}(\xi) G(\eta, \zeta), & -c_1^2 < \xi < 0, \\ \phi_2 &= \left[C_2^{(2)} F_1^{(k)}(\xi) + C_3^{(2)} F_2^{(k)}(\xi) \right] G(\eta, \zeta), & 0 < \xi < t, \\ \phi_3 &= \phi_0 + C_4^{(2)} F_2^{(2)}(\xi) G(\eta, \zeta), & t < \xi, \end{aligned}$$

donde el segundo sumando del potencial ϕ_3 representa el potencial de perturbación y

$$\phi_0 = -E_0 z = -E_0 F_1^{(2)}(\xi) G(\eta, \zeta).$$

Cabe señalar que tanto $F_1^{(k)}(\xi)$ como $F_2^{(k)}(\xi)$ están presentes en las expresiones para el potencial en la región intermedia. Las constantes $C_1^{(2)}$, $C_2^{(2)}$, $C_3^{(2)}$ y $C_4^{(2)}$ se calculan a partir de las condiciones de frontera que deben satisfacer los potenciales:

$$\phi_1(0, \eta, \zeta) = \phi_2(0, \eta, \zeta), \quad (3.43a)$$

$$\varepsilon_1 \frac{\partial \phi_1}{\partial \xi} \Big|_{\xi=0} = \varepsilon_2 \frac{\partial \phi_2}{\partial \xi} \Big|_{\xi=0}, \quad (3.43b)$$

$$\phi_2(t, \eta, \zeta) = \phi_3(t, \eta, \zeta), \quad (3.43c)$$

$$\varepsilon_2 \frac{\partial \phi_2}{\partial \xi} \Big|_{\xi=t} = \varepsilon_m \frac{\partial \phi_3}{\partial \xi} \Big|_{\xi=t}. \quad (3.43d)$$

A partir de la primera condición de contorno [ec. (3.43a)], se tiene

$$C_1^{(2)} F_1^{(1)}(\xi) G(\eta, \zeta) = \left[C_2^{(2)} + C_3^{(2)} \left(\frac{2}{a_1 b_1 c_1} \right) L_1^{(3)} \right] F_1^{(1)}(\xi) G(\eta, \zeta),$$

entonces, al calcular lo anterior sobre la superficie del núcleo, en $\xi = 0$, se obtiene

$$C_1^{(2)} - C_2^{(2)} = C_3^{(2)} \left(\frac{2}{a_1 b_1 c_1} \right) L_1^{(3)}.$$

De igual manera, de la segunda condición de contorno⁵ [ec. (3.43b)], se tiene

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon_1}{2} C_1^{(2)} (c_1^2 + \xi)^{-1/2} G(\eta, \zeta) &= \varepsilon_2 \left[\frac{C_2^{(2)}}{2} + \frac{C_3^{(2)}}{2} \left(\frac{2}{a_1 b_1 c_1} \right) L_1^{(3)} \right] (c_1^2 + \xi)^{-1/2} G(\eta, \zeta) \\ &+ \varepsilon_2 C_3^{(2)} \left\{ -\frac{1}{\left[F_1^{(1)}(\xi) \right]^2 f_1(\xi)} \right\} (c_1^2 + \xi)^{1/2} G(\eta, \zeta), \end{aligned}$$

y al evaluar en $\xi = 0$ se obtiene

$$\varepsilon_1 C_1^{(2)} - \varepsilon_2 C_2^{(2)} = \varepsilon_2 C_3^{(2)} \left(\frac{2}{a_1 b_1 c_1} \right) \left[L_1^{(3)} - 1 \right].$$

Asimismo, de la tercera condición de contorno [ec. (3.43c)], se tiene

$$\left[C_2^{(2)} + C_3^{(2)} \left(\frac{2}{a_2 b_2 c_2} \right) L_2^{(3)} \right] F_1^{(2)}(\xi) G(\eta, \zeta) = \left[-E_0 + C_4^{(2)} \left(\frac{2}{a_2 b_2 c_2} \right) L_2^{(3)} \right] F_1^{(2)}(\xi) G(\eta, \zeta),$$

⁵Ver la nota al pie 3 sobre la integral de Leibniz.

entonces, al calcular lo anterior sobre la superficie de la capa, en $\xi = t$ se obtiene

$$C_2^{(2)} + C_3^{(2)} \left(\frac{2}{a_2 b_2 c_2} \right) L_2^{(3)} = -E_0 + C_4^{(2)} \left(\frac{2}{a_2 b_2 c_2} \right) L_2^{(3)}.$$

De la cuarta condición de frontera,⁵ al evaluar en $\xi = t$ al lado izquierdo de la ec. (3.43d), se obtiene

$$\frac{\varepsilon_2}{2} \left[C_2^{(2)} + C_3^{(2)} \left(\frac{2}{a_2 b_2 c_2} \right) L_2^{(3)} \right] (c_2^2 + t)^{-1/2} G(\eta, \zeta) + \varepsilon_2 C_3^{(2)} \left[-\frac{1}{(c_2^2 + t)(a_2 b_2 c_2)} \right] (c_2^2 + t)^{1/2} G(\eta, \zeta),$$

y al evaluar en $\xi = t$ al lado derecho de la ec. (3.43d), se obtiene

$$\frac{\varepsilon_m}{2} \left[-E_0 + C_4^{(2)} \left(\frac{2}{a_2 b_2 c_2} \right) L_2^{(3)} \right] (c_2^2 + t)^{-1/2} G(\eta, \zeta) + \varepsilon_m C_4^{(2)} \left[-\frac{1}{(c_2^2 + t)(a_2 b_2 c_2)} \right] (c_2^2 + t)^{1/2} G(\eta, \zeta),$$

por lo tanto, al igualar ambos lados de la ec. (3.43d) se tiene

$$\varepsilon_2 C_2^{(2)} + \varepsilon_2 C_3^{(2)} \left(\frac{2}{a_2 b_2 c_2} \right) [L_2^{(3)} - 1] = -\varepsilon_m E_0 + \varepsilon_m C_4^{(2)} \left(\frac{2}{a_2 b_2 c_2} \right) [L_2^{(3)} - 1].$$

En resumen, se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$C_1^{(2)} - C_2^{(2)} = C_3^{(2)} \left(\frac{2}{a_1 b_1 c_1} \right) L_1^{(3)}, \quad (3.44)$$

$$\varepsilon_1 C_1^{(2)} - \varepsilon_2 C_2^{(2)} = \varepsilon_2 C_3^{(2)} \left(\frac{2}{a_1 b_1 c_1} \right) [L_1^{(3)} - 1], \quad (3.45)$$

$$C_2^{(2)} + C_3^{(2)} \left(\frac{2}{a_2 b_2 c_2} \right) L_2^{(3)} = -E_0 + C_4^{(2)} \left(\frac{2}{a_2 b_2 c_2} \right) L_2^{(3)}, \quad (3.46)$$

$$\varepsilon_2 C_2^{(2)} + \varepsilon_2 C_3^{(2)} \left(\frac{2}{a_2 b_2 c_2} \right) [L_2^{(3)} - 1] = -\varepsilon_m E_0 + \varepsilon_m C_4^{(2)} \left(\frac{2}{a_2 b_2 c_2} \right) [L_2^{(3)} - 1]. \quad (3.47)$$

Por un lado, multiplicando la ec. (3.47) por ε_1 menos la ec. (3.45), se tiene

$$-\varepsilon_1 C_2^{(2)} + \varepsilon_2 C_2^{(2)} = \varepsilon_1 C_3^{(2)} \left(\frac{2}{a_1 b_1 c_1} \right) L_1^{(3)} - \varepsilon_2 C_3^{(2)} \left(\frac{2}{a_1 b_1 c_1} \right) [L_1^{(3)} - 1],$$

entonces

$$C_2^{(2)} = \frac{2 \left[\varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) L_1^{(3)} \right]}{a_1 b_1 c_1 (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)} C_3^{(2)}.$$

Por otro lado, multiplicando a la ec. (3.46) por $\varepsilon_m [L_2^{(3)} - 1]$ menos la ec. (3.47) multiplicada por $L_2^{(3)}$, se tiene

$$C_2^{(2)} \left[(\varepsilon_m - \varepsilon_2) L_2^{(3)} - \varepsilon_m \right] + (\varepsilon_m - \varepsilon_2) C_3^{(2)} \left(\frac{2}{a_2 b_2 c_2} \right) [L_2^{(3)} - 1] L_2^{(3)} = \varepsilon_m E_0,$$

entonces al sustituir el valor de la constante $C_2^{(2)}$ en la ecuación anterior, se obtiene

$$C_3^{(2)} = -\frac{\varepsilon_m E_0}{2} \left\{ \frac{\left[\varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) L_1^{(3)} \right] \left[\varepsilon_m + (\varepsilon_2 - \varepsilon_m) L_2^{(3)} \right]}{a_1 b_1 c_1 (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)} + \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_m) [L_2^{(3)} - 1] L_2^{(3)}}{a_2 b_2 c_2} \right\}^{-1},$$

donde el término entre llaves se puede simplificar como

$$\frac{(a_1 b_1 c_1) (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}{\left[\varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) L_1^{(3)} \right] \left[\varepsilon_m + (\varepsilon_2 - \varepsilon_m) L_2^{(3)} \right] + f (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) (\varepsilon_2 - \varepsilon_m) [1 - L_2^{(3)}] L_2^{(3)}}, \quad (3.48)$$

donde $f = \frac{a_1 b_1 c_1}{a_2 b_2 c_2}$. Por un lado, desarrollando el primer producto de términos de la ec. (3.48), se obtiene

$$\begin{aligned} \left[\varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) L_1^{(3)} \right] \left[\varepsilon_m + (\varepsilon_2 - \varepsilon_m) L_2^{(3)} \right] &= \varepsilon_2 \left[\varepsilon_m + (\varepsilon_2 - \varepsilon_m) L_2^{(3)} \right] \\ &+ (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) (\varepsilon_2 - \varepsilon_m) L_1^{(3)} L_2^{(3)} + \varepsilon_m (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) L_1^{(3)}, \end{aligned}$$

por otro lado, desarrollando el segundo producto de términos de la ec. (3.48), se obtiene

$$f(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_2 - \varepsilon_m) \left[1 - L_2^{(3)} \right] L_2^{(3)} = f\varepsilon_2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) L_2^{(3)} - fL_2^{(3)}\varepsilon_m(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) - f(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_2 - \varepsilon_m) \left[L_2^{(3)} \right]^2,$$

por lo tanto, al sumar estos dos últimos resultados, la ec. (3.48) se reduce a

$$\varepsilon_2 \left[\varepsilon_m + (\varepsilon_2 - \varepsilon_m) L_2^{(3)} \right] + fL_2^{(3)}\varepsilon_2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \left(L_1^{(3)} - fL_2^{(3)} \right) \left[\varepsilon_m + (\varepsilon_2 - \varepsilon_m) L_2^{(3)} \right]$$

o bien

$$\left[\varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \left(L_1^{(3)} - fL_2^{(3)} \right) \right] \left[\varepsilon_m + (\varepsilon_2 - \varepsilon_m) L_2^{(3)} \right] + fL_2^{(3)}\varepsilon_2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2),$$

entonces el valor de la tercera constante es igual a

$$C_3^{(2)} = -\frac{\varepsilon_m E_0}{2} \left\{ \frac{(a_1 b_1 c_1)(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}{\left[\varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \left(L_1^{(3)} - fL_2^{(3)} \right) \right] \left[\varepsilon_m + (\varepsilon_2 - \varepsilon_m) L_2^{(3)} \right] + fL_2^{(3)}\varepsilon_2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)} \right\}.$$

Para calcular la polarizabilidad del sistema, solamente es necesario calcular $C_4^{(2)}$. Entonces a partir de la ec. (3.46), se tiene

$$\begin{aligned} C_4^{(2)} &= \frac{C_3^{(2)}(a_2 b_2 c_2)}{L_2^{(3)}} \left[\frac{\varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) L_1^{(3)}}{a_1 b_1 c_1 (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)} + \left(\frac{1}{a_2 b_2 c_2} \right) L_2^{(3)} \right] + \frac{E_0(a_2 b_2 c_2)}{2L_2^{(3)}} \\ &= \frac{C_3^{(2)}}{L_2^{(3)}} \left[\frac{\varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) L_1^{(3)} + f(\varepsilon_2 - \varepsilon_1) L_2^{(3)}}{f(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)} \right] + \frac{3}{4\pi} \left(\frac{V_2 E_0}{2L_2^{(3)}} \right) \\ &= \frac{3}{4\pi} \left(\frac{V_2 E_0}{2L_2^{(3)}} \right) \left\{ \frac{2C_3^{(2)}}{E_0(a_2 b_2 c_2)} \left[\frac{\varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) L_1^{(3)} + f(\varepsilon_2 - \varepsilon_1) L_2^{(3)}}{f(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)} \right] + 1 \right\}, \end{aligned}$$

donde $V_2 = \frac{4\pi}{3} a_2 b_2 c_2$ es el volumen del elipsoide externo. Al sustituir el valor de $C_3^{(2)}$ en la ecuación anterior se obtiene

$$\begin{aligned} C_4^{(2)} &= \frac{3}{4\pi} \left(\frac{V_2 E_0}{2L_2^{(3)}} \right) \left\{ \frac{-\varepsilon_m \left[\varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) L_1^{(3)} + f(\varepsilon_2 - \varepsilon_1) L_2^{(3)} \right]}{\left[\varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \left(L_1^{(3)} - fL_2^{(3)} \right) \right] \left[\varepsilon_m + (\varepsilon_2 - \varepsilon_m) L_2^{(3)} \right] + fL_2^{(3)}\varepsilon_2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)} + 1 \right\} \\ &= \frac{3}{4\pi} \left(\frac{V_2 E_0}{2L_2^{(3)}} \right) \left\{ \frac{L_2^{(3)} \left[\varepsilon_2(\varepsilon_2 - \varepsilon_m) + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_2 - \varepsilon_m) \left(L_1^{(3)} - fL_2^{(3)} \right) + f\varepsilon_2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \right]}{\left[\varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \left(L_1^{(3)} - fL_2^{(3)} \right) \right] \left[\varepsilon_m + (\varepsilon_2 - \varepsilon_m) L_2^{(3)} \right] + fL_2^{(3)}\varepsilon_2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)} \right\}, \end{aligned}$$

por lo tanto

$$C_4^{(2)} = \frac{3}{4\pi} \left(\frac{V_2 E_0}{2} \right) \left\{ \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_m) \left[\varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \left(L_1^{(3)} - fL_2^{(3)} \right) \right] + f\varepsilon_2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{\left[\varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \left(L_1^{(3)} - fL_2^{(3)} \right) \right] \left[\varepsilon_m + (\varepsilon_2 - \varepsilon_m) L_2^{(3)} \right] + fL_2^{(3)}\varepsilon_2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)} \right\}.$$

Finalmente, para una partícula elipsoidal concéntrica y cofocal tipo *core-shell*, iluminada por una onda plana, se cumple que:

$$\phi_3 = \phi_0 + C_4^{(2)} F_2^{(2)}(\xi) G(\eta, \zeta) = \phi_0 + \phi_{\text{Dipolar}},$$

entonces

$$\phi_{\text{Dipolar}} = C_4^{(2)} F_1^{(2)}(\xi) \int_{\xi}^{\infty} \frac{dq}{\left[F_1^{(2)}(\xi) \right]^2 f_2(q)} G(\eta, \zeta),$$

pero $F_1^{(2)}(\xi) G(\eta, \zeta) = -\phi_0/E_0$, entonces

$$\phi_{\text{Dipolar}} = -\frac{\phi_0}{E_0} C_4^{(2)} \int_{\xi}^{\infty} \frac{dq}{\left[F_1^{(2)}(\xi) \right]^2 f_2(q)}.$$

Al considerar distancias r muy alejadas al origen, tales que sean mucho mayores a su semieje mayor a_2 , es decir, para $\xi \simeq r^2 \gg a_2^2$, sucede que

$$\int_{\xi}^{\infty} \frac{dq}{\left[F_1^{(2)}(\xi)\right]^2 f_2(q)} = \int_{\xi}^{\infty} \frac{dq}{(c_2^2 + q) f_2(q)} \simeq \int_{\xi}^{\infty} \frac{dq}{q^{5/2}} = \frac{2}{3} \xi^{-3/2},$$

entonces al sustituir el potencial de un dipolo puntual en el origen [74] en la ecuación anterior, se obtiene

$$\frac{p \cos \theta}{4\pi\epsilon_m r^2} = -\frac{2C_4^{(2)} (-E_0 r \cos \theta)}{3 r^3 E_0},$$

por lo tanto, \vec{E}_0 genera un dipolo cuyo momento dipolar es

$$\vec{p} = \epsilon_m V_2 \frac{(\epsilon_2 - \epsilon_m) \left[\epsilon_2 + (\epsilon_1 - \epsilon_2) \left(L_1^{(3)} - f L_2^{(3)} \right) \right] + f \epsilon_2 (\epsilon_1 - \epsilon_2)}{\left[\epsilon_2 + (\epsilon_1 - \epsilon_2) \left(L_1^{(3)} - f L_2^{(3)} \right) \right] \left[\epsilon_m + (\epsilon_2 - \epsilon_m) L_2^{(3)} \right] + f L_2^{(3)} \epsilon_2 (\epsilon_1 - \epsilon_2)} \vec{E}_0,$$

donde V_2 es el volumen del elipsoide exterior. Para determinar la polarizabilidad en dirección \hat{e}_z , se debe tomar en cuenta que

$$\vec{p} = \epsilon_m \alpha \vec{E}_0,$$

entonces al generalizar para cualquier dirección i , la polarizabilidad de este sistema es

$$\alpha^{(i)} = V_2 \frac{(\epsilon_2 - \epsilon_m) \left[\epsilon_2 + (\epsilon_1 - \epsilon_2) \left(L_1^{(i)} - f L_2^{(i)} \right) \right] + f \epsilon_2 (\epsilon_1 - \epsilon_2)}{\left[\epsilon_2 + (\epsilon_1 - \epsilon_2) \left(L_1^{(i)} - f L_2^{(i)} \right) \right] \left[\epsilon_m + (\epsilon_2 - \epsilon_m) L_2^{(i)} \right] + f L_2^{(i)} \epsilon_2 (\epsilon_1 - \epsilon_2)}, \quad (3.49)$$

donde $L_1^{(i)}$ y $L_2^{(i)}$ son los factores de depolarización del elipsoide interno y externo, respectivamente, en la dirección i .

Una clase especial de elipsoides son los esferoides, los cuales tienen dos ejes con tamaños iguales, por lo cual sólo un factor geométrico es independiente. El esferoide prolato, donde $b = c$ y por lo tanto $L^{(2)} = L^{(3)}$; y oblatos, para los que se cumple $a = b$ y $L^{(1)} = L^{(2)}$. Los factores de depolarización, para el caso de esferoides, son conocidos [4]. Para esferoide prolato se tiene

$$L^{(1)} = \frac{1 - e_p^2}{e_p^2} \left[-1 + \frac{1}{2e_p} \ln \left(\frac{1 + e_p}{1 - e_p} \right) \right], \quad (3.50)$$

donde $e_p^2 = 1 - b^2/a^2$, mientras que para esferoides oblatos la expresión correspondiente es

$$L^{(1)} = \frac{g(e)}{2e_o^2} \left[\frac{\pi}{2} - \arctan g(e) \right] - \frac{g^2(e)}{2}, \quad (3.51)$$

donde

$$g(e) = \left(\frac{1 - e_o^2}{e_o^2} \right)^{1/2} \quad \text{y} \quad e_o^2 = 1 - \frac{c^2}{a^2}.$$

Los demás factores de depolarización se pueden obtener usando la relación $L^{(1)} + L^{(2)} + L^{(3)} = 1$.

Capítulo 4

Métodos Numéricos

4.1. Método de Elemento en la Frontera

En esta sección se describen brevemente las definiciones y ecuaciones básicas del electromagnetismo programadas en el código numérico BEM (Método de Elemento en la Frontera), desarrollado por los autores: García de Abajo, Howie y Aizpurua [10, 11, 84]. Este método numérico consiste en aproximarse a la frontera de la partícula por elementos de frontera de tamaño finito, como triángulos o cuadriláteros, y para las distribuciones de carga de superficie dentro de cada elemento se utiliza un valor constante (método de colocación, utilizado en este trabajo) o algún esquema de interpolación (Método de Galerkin) [85]. En la aproximación por el método de colocación, las distribuciones de carga superficial σ se convierten en vectores con la misma dimensión N que el número de elementos de frontera, y las funciones de Green $G(\vec{r}, \vec{r}')$ se convierten en matrices de dimensión $N \times N$.

4.1.1. Teoría básica

En la deducción que se presenta a continuación, se adopta la notación introducida por los autores García de Abajo y Howie [11, 84]. El punto de partida es considerar a las ecuaciones de Maxwell en el espacio de frecuencias ω . Las ecuaciones de Maxwell (en sistema de unidades CGS) están dadas por [86]

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad \text{Ley de Gauss magnética} \quad (4.1)$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = 4\pi\rho_{\text{tot}}, \quad \text{Ley de Gauss eléctrica} \quad (4.2)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad \text{Ley de Faraday-Lenz} \quad (4.3)$$

$$\nabla \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{J}_{\text{tot}} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad \text{Ley de Ampère-Maxwell} \quad (4.4)$$

donde \vec{E} es el campo eléctrico, \vec{B} es el campo magnético, \vec{J}_{tot} y ρ_{tot} son las densidades totales de corriente y carga volumétrica, ϵ_0 es la permitividad eléctrica del vacío, μ_0 es la permeabilidad magnética del vacío y c es la rapidez de las ondas electromagnéticas, donde $c^2 = 1/\epsilon_0\mu_0$.

Utilizando los campos auxiliares $\vec{D} = \vec{E} + 4\pi\vec{P}$ y $\vec{H} = \vec{B} - 4\pi\vec{M}$, donde \vec{P} y \vec{M} son el vector de polarización y el de magnetización, respectivamente, y sustituyendo $\rho_{\text{tot}} = \rho_{\text{ext}} + \rho_{\text{ind}}$, $\vec{J}_{\text{tot}} = \vec{J}_{\text{ext}} + \vec{J}_{\text{ind}} + \vec{J}_P$ donde ρ_{ext} , ρ_{ind} , \vec{J}_{ext} y \vec{J}_{ind} son las densidades externas e inducidas de carga y corriente volumétrica, respectivamente y $\vec{J}_P = \partial\vec{P}/\partial t$ es la densidad de corriente volumétrica de polarización, se pueden reescribir las ecs. (4.2) y (4.4), que involucran a las fuentes, de la siguiente manera [86]

$$\nabla \cdot \vec{D} = 4\pi\rho_{\text{ext}}, \quad \text{Ley de Gauss eléctrica} \quad (4.5)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{4\pi}{c} \vec{J}_{\text{ext}} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}. \quad \text{Ley de Ampère-Maxwell} \quad (4.6)$$

Para reescribir las ecuaciones de Maxwell en el espacio de frecuencias ω , a las ecs. (4.3) y (4.4) se les debe aplicar una transformada de Fourier [73]

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{-i\omega t} d\omega. \quad (4.7)$$

Al aplicar la transformada de Fourier al campo eléctrico y después calcular su rotacional, se obtiene

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t) = \nabla \times \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \vec{E}(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega \right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \nabla \times \vec{E}(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega,$$

por otro lado, si se calcula la transformada de Fourier al campo magnético y después se deriva parcialmente con respecto al tiempo, se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{B}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \vec{B}(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega \right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} -i\omega \vec{B}(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega,$$

donde \vec{r} es el vector posición en donde se quiere evaluar los campos \vec{E} y \vec{B} . A partir de las dos relaciones anteriores, se tiene que la Ley de Faraday–Lenz en el espacio de frecuencias es

$$\nabla \times \vec{E} = ik\vec{B}, \quad (4.8)$$

donde $k = \omega/c$ es la magnitud del vector de onda. Al aplicar la transformada de Fourier al campo \vec{H} y después calcular su rotacional, se obtiene

$$\nabla \times \vec{H}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \nabla \times \vec{H}(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega,$$

y si se calcula la transformada de Fourier al vector desplazamiento eléctrico y después se deriva parcialmente con respecto al tiempo, se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{D}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} -i\omega \vec{D}(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega,$$

entonces, la Ley de Ampère–Maxwell en el espacio de frecuencias es

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{4\pi}{c} \vec{J}_{\text{ext}} - ik\vec{D}. \quad (4.9)$$

El código numérico BEM resuelve las ecuaciones de Maxwell para un sistema finito de objetos discretizados homogéneos, en donde cada uno describe local y espacialmente una función dieléctrica $\epsilon(\omega)$ invariante. Con este método, las ecuaciones de Maxwell se transforman en un conjunto de ecuaciones integro–diferenciales para las densidades de carga y de corriente superficiales auxiliares en la frontera de los objetos.

La Ley de Gauss magnética indica que $\nabla \cdot \vec{B} = 0$ y como la divergencia del rotacional de cualquier función vectorial es igual a cero, entonces

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} \quad (4.10)$$

o bien

$$\vec{H} = \frac{1}{\mu} \nabla \times \vec{A}, \quad (4.11)$$

donde \vec{A} es el potencial vectorial. Si se sustituye la ec. (4.10) en la Ley de Faraday–Lenz en el espacio de frecuencias [ec. (4.8)] se tiene que $\nabla \times (\vec{E} - ik\vec{A}) = \vec{0}$ y como el rotacional del gradiente de una función escalar es igual a cero, entonces

$$\vec{E} = -\nabla\phi + ik\vec{A}, \quad (4.12)$$

donde ϕ es el potencial escalar. La definición de \vec{E} y \vec{H} en términos de los potenciales \vec{A} y ϕ [ecs. (4.11) y (4.12)] satisfacen de igual manera las ecuaciones de Maxwell [ecs. (4.5) y (4.6)], entonces las ecuaciones de Maxwell se pueden reescribir en términos de los potenciales. Sustituyendo la ec. (4.12) en (4.5) se tiene

$$\epsilon \nabla \cdot \vec{E} + \vec{E} \cdot \nabla \epsilon = \epsilon \nabla \cdot [-\nabla\phi + ik\vec{A}] + \vec{E} \cdot \nabla \epsilon = -\epsilon \nabla^2 \phi + ik\epsilon \nabla \cdot \vec{A} + \vec{E} \cdot \nabla \epsilon = 4\pi \rho_{\text{ext}},$$

entonces

$$\nabla^2 \phi - ik \nabla \cdot \vec{A} = -4\pi \frac{\rho_{\text{ext}}}{\epsilon} + \frac{1}{\epsilon} \vec{E} \cdot \nabla \epsilon,$$

pero como

$$\nabla \left(\frac{1}{\epsilon} \right) = \frac{\partial \left(\frac{1}{\epsilon} \right)}{\partial n} = -\frac{1}{\epsilon^2} \frac{\partial \epsilon}{\partial n} = -\frac{1}{\epsilon^2} \nabla \epsilon,$$

entonces

$$\nabla^2 \phi - ik \nabla \cdot \vec{A} = -4\pi \frac{\rho_{\text{ext}}}{\epsilon} - \epsilon \vec{E} \cdot \nabla \left(\frac{1}{\epsilon} \right) = -4\pi \left[\frac{\rho_{\text{ext}}}{\epsilon} + \frac{1}{4\pi} \vec{D} \cdot \nabla \left(\frac{1}{\epsilon} \right) \right],$$

por lo tanto

$$\nabla^2 \phi - ik \nabla \cdot \vec{A} = -4\pi \left[\frac{\rho_{\text{ext}}}{\epsilon} + \sigma_s \right], \quad (4.13)$$

donde $\sigma_s = \frac{1}{4\pi} \vec{D} \cdot \nabla \left(\frac{1}{\epsilon} \right)$. Asimismo, sustituyendo las ecs. (4.11) y (4.12) en (4.6) se tiene que

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\mu} \nabla \times \vec{A} \right) = \frac{1}{\mu} \left(\nabla \times \nabla \times \vec{A} \right) - \nabla \times \vec{A} \times \nabla \left(\frac{1}{\mu} \right) = \frac{4\pi}{c} \vec{J}_{\text{ext}} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left[\epsilon \left(-\nabla \phi + ik \vec{A} \right) \right],$$

entonces

$$\frac{1}{\mu} \left[\nabla^2 \vec{A} - \nabla \left(\nabla \cdot \vec{A} \right) \right] + \mu \vec{H} \times \nabla \left(\frac{1}{\mu} \right) = -\frac{4\pi}{c} \vec{J}_{\text{ext}} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left[\epsilon \left(\nabla \phi - ik \vec{A} \right) \right],$$

pero como $\mu \nabla \left(\frac{1}{\mu} \right) = -\frac{1}{\mu} \nabla \mu$ entonces

$$\left[\nabla^2 \vec{A} - \nabla \left(\nabla \cdot \vec{A} \right) \right] - \vec{H} \times \nabla \mu = -\frac{4\pi \mu}{c} \vec{J}_{\text{ext}} + \frac{\mu}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left[\epsilon \left(\nabla \phi - ik \vec{A} \right) \right].$$

Al calcular la transformada de Fourier a la ecuación anterior se obtiene

$$\left[\nabla^2 \vec{A} - \nabla \left(\nabla \cdot \vec{A} \right) \right] = -\frac{4\pi \mu}{c} \vec{J}_{\text{ext}} - \frac{\mu}{c} (i\omega \epsilon \nabla \phi) + \frac{ik\mu}{c} (i\omega \epsilon \vec{A}) + \vec{H} \times \nabla \mu,$$

y además

$$\nabla [\phi(\epsilon\mu)] = \epsilon\mu \nabla \phi + \phi \nabla \epsilon\mu,$$

entonces

$$\nabla^2 \vec{A} + k^2 \epsilon \mu \vec{A} - \nabla \left(\nabla \cdot \vec{A} - ik \epsilon \mu \phi \right) = -\frac{4\pi}{c} \left[\mu \vec{J}_{\text{ext}} - \frac{1}{4\pi} c \vec{H} \times \nabla \mu - i \frac{\omega}{4\pi} \phi \nabla \epsilon \mu \right],$$

por lo cual

$$\nabla^2 \vec{A} + k^2 \epsilon \mu \vec{A} - \nabla \left(\nabla \cdot \vec{A} - ik \epsilon \mu \phi \right) = -\frac{4\pi}{c} \left[\mu \vec{J}_{\text{ext}} + \vec{m} \right], \quad (4.14)$$

donde $\vec{m} = \frac{1}{4\pi} \left[i\omega \phi \nabla \epsilon \mu + c \vec{H} \times \nabla \mu \right]$.

Hasta este punto, se redujeron de cuatro ecuaciones de Maxwell a tan sólo dos, pero se encuentran acopladas entre ellas. Se puede obtener un desacoplamiento de las ecuaciones (4.13) y (4.14) por medio de la arbitrariedad involucrada en la definición de los potenciales [86]. El campo \vec{H} está definido en términos de \vec{A} [ec. (4.11)] y el potencia vectorial es arbitrario en la medida en que se puede agregar el gradiente de alguna función escalar Λ , entonces \vec{H} se puede dejar sin cambios por medio de la transformación

$$\vec{A} \longrightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \nabla \Lambda. \quad (4.15)$$

El campo eléctrico [ec. (4.12)] también queda sin cambios, si el potencial escalar tiene la siguiente transformación

$$\phi \longrightarrow \phi' = \phi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t}. \quad (4.16)$$

El resultado de imponer las *libertades de norma* [ecs. (4.15) y (4.16)] es que se puede escoger un conjunto de potenciales (\vec{A}, ϕ) que satisfagan la norma de Lorenz [11, 84]

$$\nabla \cdot \vec{A} = ik \epsilon \mu \phi, \quad (4.17)$$

por lo tanto, las ecs. (4.5) y (4.6) se pueden reducir a dos ecuaciones de onda inhomogéneas, una para ϕ y otra para \vec{A}

$$(\nabla^2 + k^2 \epsilon \mu) \phi = -4\pi \left[\frac{\rho_{\text{ext}}}{\epsilon} + \sigma_s \right] \quad (4.18)$$

y

$$(\nabla^2 + k^2 \epsilon \mu) \vec{A} = -\frac{4\pi}{c} \left[\mu \vec{J}_{\text{ext}} + \vec{m} \right]. \quad (4.19)$$

Las expresiones anteriores siguen siendo válidas para cualquier función dieléctrica ϵ y permeabilidad magnética μ dependientes del espacio en forma arbitraria. Asumiendo que el área que se desea estudiar está compuesta por un número finito de objetos discretizados, se puede escribir la solución a las ecs. (4.18) y (4.19) en términos de las densidades de carga y de corriente superficiales auxiliares,¹ $\sigma_j(s)$ y $\vec{h}_j(s)$, respectivamente, definidos en la interfaz de los objetos [11, 84, 88]

$$\phi_j(\vec{r}) = \phi_j^{\text{ext}}(\vec{r}) + \int_{\partial\Omega_j} d^2s G_j(\vec{r}, \vec{s}) \sigma_j(\vec{s}) \quad (4.20)$$

y

$$\vec{A}_j(\vec{r}) = \vec{A}_j^{\text{ext}}(\vec{r}) + \int_{\partial\Omega_j} d^2s G_j(\vec{r}, \vec{s}) \vec{h}_j(\vec{s}), \quad (4.21)$$

donde \vec{r} pertenece a Ω_j , ds es el diferencial del área en las coordenadas de la interfaz \vec{s} , el subíndice j es utilizado para diferenciar entre distintos medios [ver Fig. 4.1] y los términos ϕ_j^{ext} , \vec{A}_j^{ext} son los potenciales externos que satisfacen la ecuación homogénea de Helmholtz [11, 84].

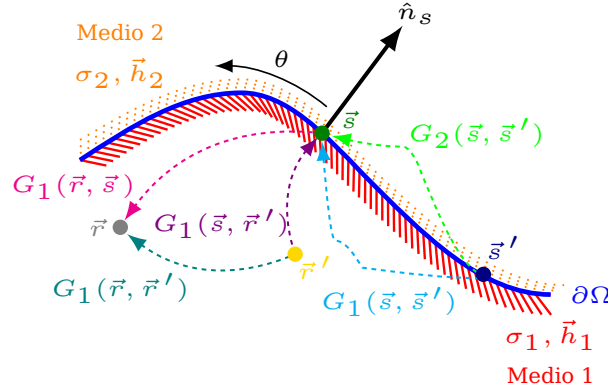


Figura 4.1: Representación esquemática de los elementos implicados en la solución de las ecuaciones de Maxwell en presencia de una interfaz entre dos medios mediante el Método de Elemento en la Frontera (BEM). La interfaz que se muestra en la figura (curva sólida azul) separa el medio 1 del medio 2. La normal de la interfaz \hat{n}_s en un punto \vec{s} dado en la interfaz se elige para dirigirse hacia el medio 2.

Por construcción, las soluciones (4.20) y (4.21) satisfacen la ecuación homogénea de Helmholtz en todo punto excepto en la frontera $\partial\Omega_j$, que es la superficie cerrada que contiene al volumen Ω_j [88]. Asimismo, la densidad de carga de superficie σ_j se ha escogido de tal forma que las condiciones de contorno impuestas por las ecuaciones de Maxwell se cumplan. Como hay cierta arbitrariedad en la elección del potencial externo $\phi_j^{\text{ext}}(\vec{r})$, la carga superficial no está definida de manera única y por esa razón $\sigma_j(\vec{s})$ de la ec. (4.20) debe entenderse como una herramienta matemática en lugar de una cantidad física [88]. En general, la función de Green $G_j(\vec{r}, \vec{s})$ de la ecuación de onda es solución a la ecuación de Helmholtz [11, 84, 88]

$$(\nabla^2 + k_j^2) G_j(\vec{r}, \vec{r}') = -4\pi\delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (4.22)$$

donde \vec{r} y \vec{r}' pertenecen a Ω_j , $k_j = k\sqrt{\epsilon_j(\omega)\mu_j(\omega)}$ y se interpreta que en la raíz cuadrada hay partes imaginarias positivas (esta elección de signo se asegura que los potenciales sean cero en el infinito, mientras que al mismo tiempo, es consistente con el formalismo de respuesta retardada) [11, 84]. Para este caso, sólo se considera el caso homogéneo con $G_j(\vec{r}, \vec{s}) = e^{(ik_j|\vec{r}-\vec{s}'|)}/|\vec{r}-\vec{s}'|$.

Los valores de las densidades de carga y de corriente superficiales auxiliares se determinan a partir de las condiciones de contorno (en la interfaz entre dos medios) para la componente normal y tangencial del campo eléctrico y \vec{H} , respectivamente, y la continuidad del potencial ϕ y \vec{A} [ver ec. (4.10)–(4.12)], por lo

¹La redefinición correspondiente a la densidad de corriente superficial artificial es $\vec{h} = \frac{\mu}{\pi}\vec{\bar{h}}$ donde $\vec{\bar{h}}$ es la densidad de corriente superficial electromagnética. Las unidades correspondientes a cada densidad de corriente son $[\vec{h}] = Vs/m^2$ y $[\vec{\bar{h}}] = A/m$. [87]

tanto

$$\phi_2 - \phi_1 = 0, \quad (4.23)$$

$$\hat{n}_s \times (\vec{A}_2 - \vec{A}_1) = \vec{0}, \quad (4.24)$$

$$\hat{n}_s \cdot (\epsilon_2 \vec{E}_2 - \epsilon_1 \vec{E}_1) = \sigma_{\text{ext}}, \quad (4.25)$$

$$\hat{n}_s \times (\vec{H}_2 - \vec{H}_1) = \vec{K}_{\text{ext}}, \quad (4.26)$$

donde σ_{ext} y \vec{K}_{ext} son las densidades externas de carga y corrientes externas superficiales, \hat{n}_s es el vector normal a la superficie con dirección hacia arriba de la interfaz [ver Fig. 4.1]. A continuación, por simplificación de notación, se adopta una notación matricial para que las coordenadas de la interfaz \vec{s} sean utilizadas como índices de matrices y vectores, y los productos de matrices con vectores, como $G_j \sigma_j$, incluyan las integrales sobre la interfaz [11, 84]. Las ecs. (4.20) y (4.21) deben de tener el mismo valor de cada lado de la interfaz que separa al medio 1 del medio 2 [ver Fig. 4.1], por lo cual [11, 84]

$$\phi_2^{\text{ext}} - \phi_1^{\text{ext}} = G_1 \sigma_1 - G_2 \sigma_2 \quad (4.27)$$

y

$$\vec{A}_2^{\text{ext}} - \vec{A}_1^{\text{ext}} = G_1 \vec{h}_1 - G_2 \vec{h}_2, \quad (4.28)$$

donde

$$\phi_j^{\text{ext}}(\vec{s}) = \frac{1}{\epsilon_j(\omega)} \int d^3 r' G_j(|\vec{s} - \vec{r}'|) \rho(\vec{r}') \quad (4.29)$$

y

$$\vec{A}_j^{\text{ext}}(\vec{s}) = \frac{\mu_j(\omega)}{c} \int d^3 r' G_j(|\vec{s} - \vec{r}'|) \vec{J}_{\text{ext}}(\vec{r}'). \quad (4.30)$$

Considerando el caso de un medio material no magnético (es decir, cuando $\mu_j = 1$), la continuidad de la componente tangencial del campo \vec{H} y del potencial vectorial a través de la interfaz [ec. (4.24) y (4.26)], la definición del potencial vectorial [ecs. (4.10) y (4.11)] y aplicando la regla del triple producto vectorial [73] se obtiene

$$\begin{aligned} \hat{n}_s \times (\vec{H}_2 - \vec{H}_1) &= \hat{n}_s \times \left[\nabla \times (\vec{A}_2 - \vec{A}_1) \right] \\ &= \nabla \left[\hat{n}_s \cdot (\vec{A}_2 - \vec{A}_1) \right] - (\hat{n}_s \cdot \nabla) (\vec{A}_2 - \vec{A}_1) \\ &= \nabla \left[\hat{n}_s \cdot (\vec{A}_2 - \vec{A}_1) \right] - \hat{n}_s \left[\nabla \cdot (\vec{A}_2 - \vec{A}_1) \right]. \end{aligned}$$

Sustituyendo las ecs. (4.17), (4.27) y (4.28) en la igualdad anterior se obtiene [11, 84]

$$H_1 \vec{h}_1 - H_2 \vec{h}_2 - ik \hat{n}_s (G_1 \epsilon_1 \mu_1 \sigma_1 - G_2 \epsilon_2 \mu_2 \sigma_2) = \vec{\gamma}, \quad (4.31)$$

donde

$$\vec{\gamma} = (\hat{n}_s \cdot \nabla_2) (\vec{A}_2^{\text{ext}} - \vec{A}_1^{\text{ext}}) + ik \hat{n}_s (\epsilon_1 \mu_1 \phi_1^{\text{ext}} - \phi_1^{\text{ext}} \epsilon_2 \mu_2), \quad (4.32)$$

y \vec{H}_j es la derivada normal a la función de Green G_j , que debe ser tomada en ambos lados de la interfaz. De manera más explícita²

$$\begin{aligned} H_1(\vec{s}, \vec{s}') &= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \hat{n}_s \cdot \nabla_s G_1(|\vec{s} - \eta \hat{n}_s - \vec{s}'|) \\ &= \hat{n}_s \cdot \nabla_s G_1(|\vec{s} - \vec{s}'|) + 2\pi \delta(\vec{s} - \vec{s}') \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} H_2(\vec{s}, \vec{s}') &= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \hat{n}_s \cdot \nabla_s G_2(|\vec{s} + \eta \hat{n}_s - \vec{s}'|) \\ &= \hat{n}_s \cdot \nabla_s G_2(|\vec{s} - \vec{s}'|) - 2\pi \delta(\vec{s} - \vec{s}'), \end{aligned}$$

donde

$$\hat{n}_s \cdot \nabla_s G_j(|\vec{s} - \vec{s}'|) = \frac{\hat{n}_s \cdot (\vec{s} - \vec{s}')}{|\vec{s} - \vec{s}'|^3} (ik_j |\vec{s} - \vec{s}'| - 1) e^{ik_j |\vec{s} - \vec{s}'|}.$$

²En [11, 84] se menciona un formalismo más detallado sobre las funciones descritas.

Para materiales magnéticos, la proyección de la ec. (4.31) en \hat{n}_s sigue siendo un resultado de la ec. (4.17), pero la parte tangencial debe de ser reemplazada por [11, 84]

$$(\hat{n}_s \partial_i G_1 - \vec{t}_s^i H_1) \frac{1}{\mu_1} \cdot \vec{h}_1 - (\hat{n}_s \partial_i G_2 - \vec{t}_s^i H_2) \frac{1}{\mu_2} \cdot \vec{h}_2 = [\hat{n}_s \cdot \partial_i - \vec{t}_s^i \cdot (\hat{n}_s \cdot \nabla_s)] \left(\frac{\vec{A}_2^{\text{ext}}}{\mu_2} - \frac{\vec{A}_1^{\text{ext}}}{\mu_1} \right), \quad (4.33)$$

con $i = 1, 2$ donde \vec{t}_s^1 y \vec{t}_s^2 son dos vectores tangenciales independientes y la derivada parcial ∂_i está tomada a lo largo de la dirección \vec{t}_s^i . La ec. (4.33) resulta de la continuidad de la componente tangencial del campo magnético. Finalmente, a partir de la continuidad de la componente normal del vector de desplazamiento eléctrico [ver ecs. (4.12) y (4.25)], se obtiene [11, 84]

$$H_1 \epsilon_1 \sigma_1 - H_2 \epsilon_2 \sigma_2 - ik \hat{n}_s \cdot (G_1 \epsilon_1 \vec{h}_1 - G_2 \epsilon_2 \vec{h}_2) = D^{\text{ext}}, \quad (4.34)$$

donde

$$D^{\text{ext}} = \hat{n}_2 \cdot \left[\epsilon_1 \left(ik \vec{A}_1^{\text{ext}} - \nabla_s \phi_1^{\text{ext}} \right) - \epsilon_2 \left(ik \vec{A}_2^{\text{ext}} - \nabla_s \phi_2^{\text{ext}} \right) \right], \quad (4.35)$$

es la diferencia de la magnitud del vector de desplazamiento eléctrico que se generaría en la interfaz por las fuentes externas si todo el espacio fuera homogéneo y se llenara con un medio $j = 2$ o medio $j = 1$, respectivamente.

En resumen, se ha demostrado que cuando las densidades de carga σ_j y corriente \vec{h}_j auxiliares en la frontera se calculan de forma autoconsistente a partir de las ecs. (4.27), (4.28), (4.31) y (4.34) entonces las ecuaciones (4.20) y (4.21) representan la solución a las ecuaciones de Maxwell que son cero en el infinito y satisfacen apropiadamente las condiciones de contorno en la interfaz. Para los materiales magnéticos, la proyección de la ec. (4.31) en la dirección de la interfaz sigue siendo un resultado de la ec. (4.17), pero la parte tangencial debe de ser reemplazada por la ec. (4.33). La fuente externa se introduce a través de términos no homogéneos, como se define en las ecs. (4.29), (4.30), (4.32) y (4.35).

4.1.2. Procedimiento numérico

Considerando el carácter vectorial de las algunas cantidades involucradas en las ecs. (4.28), (4.31) y (4.34), se puede construir un sistema de ocho ecuaciones lineales integrales de superficie con ocho funciones complejas desconocidas en coordenadas de la interfaz (esto es, σ_j y \vec{h}_j para $j = 1, 2$). El método empleado consiste en discretizar las integrales de la interfaz, es decir, al reducir la dependencia espacial de cada cantidad a un número discreto N de puntos representativos distribuidos a lo largo de la interfaz (\vec{s}_a , para $a = 1, \dots, N$) [84]. Asociado a cada uno de estos puntos, se considera un elemento de frontera δS_a tal que éste define un perfecto mallado en la interfaz.

Tanto el campo externo como las funciones complejas desconocidas (σ_j, \vec{h}_j) se supondrán que sólo tienen pequeñas variaciones entre los puntos contiguos de la discretización, para que puedan ser considerados cercanamente constantes en cada elemento de interfaz. Los operadores que aparecen en el sistema de ocho ecuaciones pueden ser aproximados por matrices finitas de dimensión $N \times N$. Además, las cargas y corrientes de la interfaz son aproximadas por vectores complejos de dimensión N , que contienen los valores de (σ_j, \vec{h}_j) en los N puntos representativos. Se debe notar que ambos $H_j(\vec{s}, \vec{s}')$ y $G_j(|\vec{s} - \vec{s}'|)$ divergen en el límite $\vec{s} \rightarrow \vec{s}'$, sin embargo ésta es una divergencia integrable que se soluciona promediando los pequeños elementos de la interfaz. Más explícitamente, los componentes de matriz G_j y vector σ_j son [84]

$$G_{j,ab} = \int_{\delta S_b} ds' G_j(|\vec{s}_a - \vec{s}'|)$$

y

$$\sigma_{j,a} = \sigma_j(\vec{s}_a),$$

donde los subíndices a y b etiquetan los elementos de la interfaz. Por ejemplo, $\delta(|\vec{s}_a - \vec{s}'|)$ se convierte en δ_{ab} , y \hat{n}_s y ϵ_j deben de ser interpretados como la diagonal de matrices con elementos $\hat{n}_{s_a} \delta_{ab}$ y $\epsilon_j \delta_{ab}$, respectivamente. El resultado de discretizar el sistema que involucra $8N$ ecuaciones lineales y $8N$ variables complejas, es que requiere un tiempo de cómputo proporcional a $(8N)^3$ para llegar a la solución por el método directo de matriz invertible. Un procedimiento más eficiente es manipulando matrices de dimensión $N \times N$ por separado, como G_j . Después de cierta álgebra, la solución de las ecs. (4.27), (4.28), (4.31) y (4.34) está dada por (para materiales no magnéticos) [84]

$$\begin{aligned} \sigma_j = & G_j^{-1} \Sigma^{-1} \left\{ D^{\text{ext}} - \epsilon_{j'} \Sigma_{j'} \phi^{\text{ext}} \right. \\ & \left. + ik \hat{n}_s \cdot \Delta^{-1} \left[(\epsilon_1 - \epsilon_2) (\vec{\gamma} + ik \hat{n}_s \epsilon_{j'} \phi^{\text{ext}}) + (\epsilon_2 \Sigma_1 - \epsilon_1 \Sigma_2) \vec{A}^{\text{ext}} \right] \right\} \quad (4.36) \end{aligned}$$

y

$$\vec{h}_j = G_j^{-1} \Delta^{-1} \left[\vec{\gamma} - \Sigma_{j'} \vec{A}^{\text{ext}} + ik \hat{n}_s (G_1 \epsilon_1 \sigma_1 - G_2 \epsilon_2 \sigma_2) \right], \quad (4.37)$$

donde

$$\phi^{\text{ext}} = \phi_2^{\text{ext}} - \phi_1^{\text{ext}}, \quad (4.38a)$$

$$\vec{A}^{\text{ext}} = \vec{A}_2^{\text{ext}} - \vec{A}_1^{\text{ext}}, \quad (4.38b)$$

$$\Sigma_j = H_j G_j^{-1}, \quad (4.38c)$$

$$\Delta = \Sigma_1 - \Sigma_2, \quad (4.38d)$$

$$\Sigma = \epsilon_1 \Sigma_1 - \epsilon_2 \Sigma_2 + k^2 (\epsilon_1 - \epsilon_2)^2 \hat{n}_s \cdot \Delta^{-1} \hat{n}_s, \quad (4.38e)$$

con $j' = 2, 1$ cuando $j = 1, 2$. Para tener una notación más clara, el componente (ab) de la matriz $\hat{n}_s \cdot \Delta^{-1} \hat{n}_s$ en la ec. (4.38e) se lee como $(\hat{n}_{s_a} \cdot \hat{n}_{s_b})[\Delta^{-1}]_{ab}$. Las ecs. (4.36), (4.37) y (4.38) son herramientas matemáticas eficientes que se pueden utilizar para encontrar soluciones analíticas a las ecuaciones de Maxwell en geometrías simples (por ejemplo, planos, esferas, cilindros o esferoides) por proyección de matrices y vectores en una base de funciones analíticas (por ejemplo, planos de onda o funciones de Bessel).

Asimismo, las ecs. (4.36), (4.37) y (4.38) pueden ser evaluadas con sólo cuatro inversiones de matrices y dos multiplicaciones de matrices, omitiendo la suma de matrices, la multiplicación por matrices diagonales y la multiplicación de matrices por vectores, las cuales requieren un tiempo de cálculo proporcional a N^2 . Por lo tanto, el tiempo computacional de evaluar las ecs. (4.36), (4.37) y (4.38) es proporcional a $6N^3$.

4.2. Método de Elementos Finitos

4.2.1. Teoría básica

La solución de problemas dependientes del tiempo, en física, se pueden obtener mediante la solución de ecuaciones diferenciales parciales (EDPs) que describen el sistema. Sin embargo, no existen soluciones analíticas exactas para algunos problemas o es muy lento encontrar las soluciones [12]. En cambio, estos problemas pueden resolverse mediante la discretización de las ecuaciones para aproximarse a la solución. El método de elementos finitos (FEM) es una aproximación usada para resolver ecuaciones diferenciales de manera numérica [12]. FEM toma una función u que debe de ser una variable dependiente en una ecuación diferencial parcial y aproxima a u con una función u_h como en la siguiente ecuación [12]

$$u \approx u_h. \quad (4.39)$$

Entonces la función aproximada u_h es discretizada en elementos a lo largo de la geometría del problema. Los nodos se crean entre las subsecciones y en cada nodo i hay una función Ψ_i que es la función base, y un coeficiente de funciones denotadas por u_i . La función u puede ser aproximada por la función u_h usando una combinación lineal de funciones básicas tales que

$$u_h = \sum_i u_i \Psi_i, \quad (4.40)$$

donde la función base Ψ_i es continua sobre toda la geometría, pero es cero en cualquier otro lado excepto en el nodo i .

La Fig. 4.2(a) ejemplifica de forma unidimensional la aproximación por el método de elementos finitos, donde u puede representar una función de presión o temperatura, a lo largo de una longitud x de la geometría [13]. La longitud de la geometría está dividida en siete elementos, $\Psi_0 - \Psi_6$. Una de las ventajas del método por elementos finitos es que es óptimo para problemas que se desean resolver de manera computacional, ya que la discretización es adaptable al problema físico y a su geometría [13].

En la Fig. 4.2(a) las funciones base son discretizadas de manera periódica a lo largo del eje \hat{e}_x . Pero dependiendo de la forma de la función u es preferible tener una distribución no uniforme de la discretización de la función base. En la Fig. 4.2(b), donde la función u cambia de manera rápida, es necesario tener una resolución más fina en la discretización para así tener una mejor aproximación a la función u .

El análisis del método de elementos finitos en COMSOL Multiphysics[®] se realiza siguiendo un flujo de procedimiento, como se muestra en la Fig. 4.3. El método puede ser dividido en tres pasos básicos

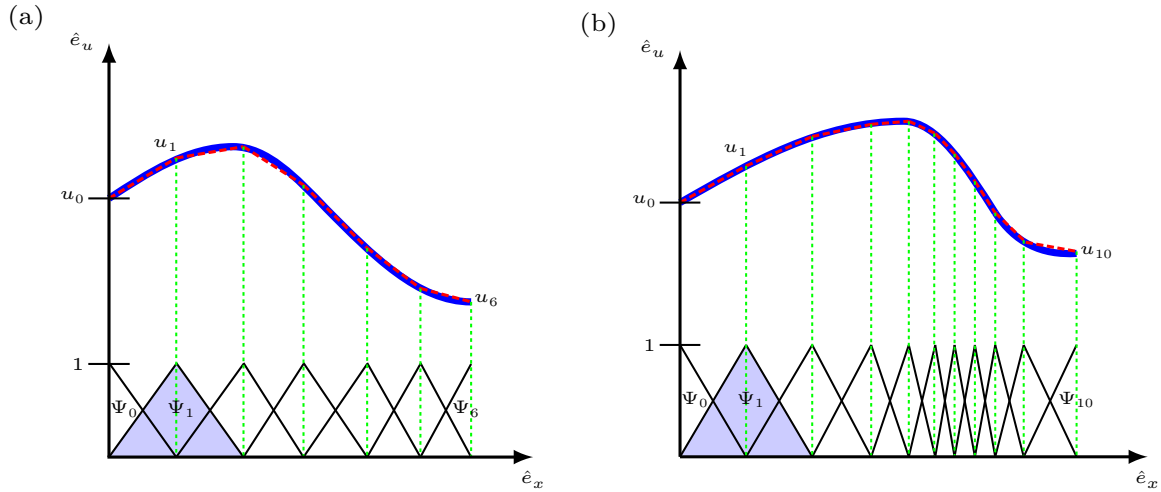


Figura 4.2: Ejemplo unidimensional por el método de elementos finitos. (a) La función u (línea azul continua) se aproxima con una función u_h (línea roja punteada), que es una combinación lineal de funciones de base (Ψ_i se representa con líneas negras continuas). Los coeficientes se denotan por u_0 a u_6 . (b) La función u es aproximada con once combinaciones lineales no uniformemente distribuidas de funciones básicas $\Psi_0 - \Psi_{10}$, los coeficientes son $u_0 - u_{10}$. La función base Ψ_1 es distinta de cero cerca del nodo $i = 1$, el área debajo de la función base se encuentra sombreada.

llamados pre-procedimientos, solución y post-procedimientos [13]. Los pasos del pre-procedimiento habilitan al usuario de construir el modelo, en donde se contiene toda la información sobre la aplicación del FEM para el estudio y es conveniente dividirlo en subpasos más pequeños [ver Fig. 4.3].

Los primeros subpasos involucran la creación de la interconexión de la geometría (1D , 2D o 3D), para representar el dominio del estudio y asignar las propiedades del material al dominio. Además las condiciones físicas del problema que se desea investigar se generan mediante la asignación de física (o multifísica) fundamental, ecuaciones matemáticas y la formulación de elementos finitos al modelo. Después, la aplicación de condiciones iniciales y de frontera para el dominio bajo estudio, así como la discretización en elementos finitos, determinan la ecuación matricial que rige al modelo.

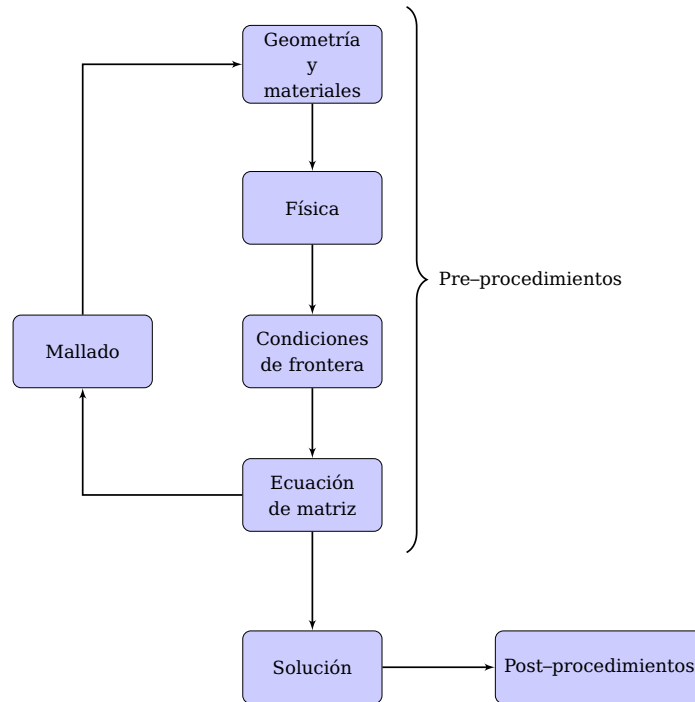


Figura 4.3: Pasos básicos para realizar un análisis de elementos finitos en COMSOL Multiphysics®.

Este paso es seguido por la solución del conjunto de ecuaciones algebraicas, que proporciona las soluciones de nodos relacionadas con la física del modelo. COMSOL Multiphysics® emplea principalmente dos métodos para obtener la solución del modelo llamados: método de pasos segregados y el método totalmente acoplado.

El método de pasos segregados genera el conjunto de ecuaciones algebraicas para cada modelo físico bajo consideración y calcula las soluciones resultantes para cada uno de esos modelos siguiendo una secuencia especificada por el usuario. El método totalmente acoplado genera el conjunto único de ecuaciones algebraicas para todos los modelos físicos implicados y los implementa en un esquema de iteración único que se repite hasta que se alcanza la convergencia. Una vez que se determinan las soluciones de los problemas, el paso de post-procesamiento permiten al usuario evaluar los resultados del análisis de elementos finitos mediante gráficas y exportación de datos [13].

4.2.2. Mallado

Cuando el método de elementos finitos es adaptado a un problema con más de una dimensión, los resultados son un *grid* de la función de base llamada malla [13]. En la Fig. 4.4 se muestran varios tipos de celdas de funciones básicas con diferentes configuraciones geométricas.

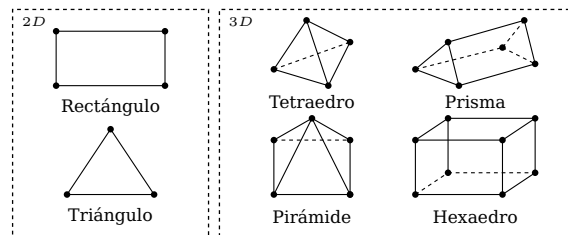


Figura 4.4: Ejemplo de varios tipos de elementos de malla, tanto para problemas de dos como tres dimensiones. La forma del elemento de malla se puede elegir para ajustarse al problema físico o a su geometría.

El mallado también puede ser adaptado para analizar las partes importantes del modelo, como por ejemplo en la Fig. 4.5 las partes más cruciales, puntas de la elipsoide, tienen una mayor densidad de elementos de mallado.

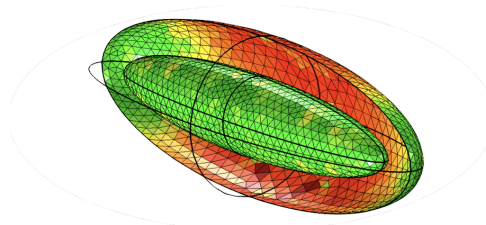


Figura 4.5: Ejemplo del mallado aplicado a una nanopartícula elipsoidal tipo core-shell. El tamaño de los elementos de mallado se encuentra ajustado a ciertas partes de la nanopartícula, como por ejemplo, en las puntas del elipsoide se tiene un tamaño de elemento más fino que en el resto de la nanopartícula. Las puntas de la nanopartícula son de gran interés ya que es un punto donde hay mayor concentración de campo eléctrico, es por ello que es más importante tener un mallado más fino en las puntas de la nanopartícula al simular la nanopartícula completa.

Capítulo 5

Resultados para sistemas de NPs magnético/metálicas tipo *core-shell*

En esta sección presento los resultados obtenidos para las secciones transversales de absorción, C_{abs} , para NPs tipo *core-shell* con núcleo magnético (α -hematita [68], magnetita [69] y níquel [70]) y cascarón metálico (oro y plata [67]) con geometría: esférica y elipsoidal (incluyendo aproximación cuasi-estática), embebidas en una matriz de agua ($n = 1.33$). Como se muestra a continuación, al considerar NPs elipsoidales, se obtiene sensibilidad a la polarización de la onda incidente, y por lo tanto control sobre las zonas de amplificación de campo eléctrico así como de las excitaciones plasmónicas, al tener una respuesta diferente para cada polarización [9]. Sin embargo, para el caso de elipsoides en general no existen soluciones analíticas a las ecuaciones de Maxwell (salvo bajo la aproximación cuasi-estática para elipsoides cofocales), por lo que se realizó el estudio a partir de métodos numéricos como BEM (Boundary Element Method) [11, 84] y FEM (Finite Element Method) [12, 13].

Las dimensiones consideradas en esta tesis para las NPs magnético/metálicas esféricas y elipsoidales tipo *core-shell*, se eligieron a partir de dos factores pensando en aplicaciones biomédicas: las dimensiones de una NP deben de ser menores a 200 nm [66] y las resonancias plasmónicas de interés deben de estar sintonizadas dentro del rango de 650 – 900 nm del espectro electromagnético, donde la absorción del tejido de la piel es mínima y la transmisión óptica es óptima [24]. En todas las gráficas que se presentan en esta sección se delimitó con líneas discontinuas gruesas (situadas en 650 y 900 nm) y fondo de color rojo el rango óptico de mínima absorción del tejido de la piel. Las resonancias plasmónicas tienen un ancho determinado por el tiempo de vida media del modo, por lo que se buscó que el máximo de la resonancia se encuentre dentro del rango 675 – 875 nm (líneas discontinuas delgadas con puntos de color rojo), garantizando tener una respuesta suficientemente grande en la zona donde el tejido de la piel absorbe menos.

5.1. Hibridación plasmónica

La teoría de hibridación plasmónica es un método intuitivo que ayuda a calcular las resonancias plasmónicas de nanoestructuras complejas [89–91]. Esta teoría separa la geometría de una NP compleja en partes constituyentes más simples y luego calcula cómo es que las resonancias plasmónicas de las partes básicas interactúan entre sí para generar resonancias plasmónicas de la nanoestructura compuesta. Para el caso específico de NPs tipo *core-shell*, la respuesta plasmónica altamente dependiente de la geometría, puede interpretarse como la interacción o hibridación entre las frecuencias de resonancia de los plasmones de la nanoesfera y de la nanocavidad [ver Fig. 5.1]. Por ejemplo, las resonancias plasmónicas de una NP esférica con óxido de hierro en el núcleo y con cascarón metálico, como Ag o Au, pueden explicarse como la interacción de plasmones de una NP esférica metálica sólida y una cavidad esférica dentro de un bloque metálico [ver Fig. 5.1]. La hibridación de los plasmones de la esfera y de la cavidad conduce a un modo plasmónico de acoplamiento antisimétrico (*antibonding*) de mayor energía (ω_+) y a un modo de acoplamiento simétrico (*bonding*) de menor energía (ω_-) [89]. Como el núcleo de la NP está compuesto por óxido de hierro (material con alta permitividad eléctrica [60]), el plasmón de la cavidad tendrá un corrimiento hacia el rojo a una energía por debajo de la del plasmón de la esfera [ver Fig. 5.1].

El modo plasmónico de acoplamiento simétrico tiene mayor momento dipolar y se puede acoplar a una onda EM monocromática plana, dando lugar a una resonancia en la absorción [ver Fig. 5.1]. La capacidad de sintonizar las resonancias plasmónicas de una NP tipo *core-shell* surge a partir de la combinación del tamaño del núcleo de la NP (plasmón de cavidad) y del grosor de la capa (distancia de interacción).

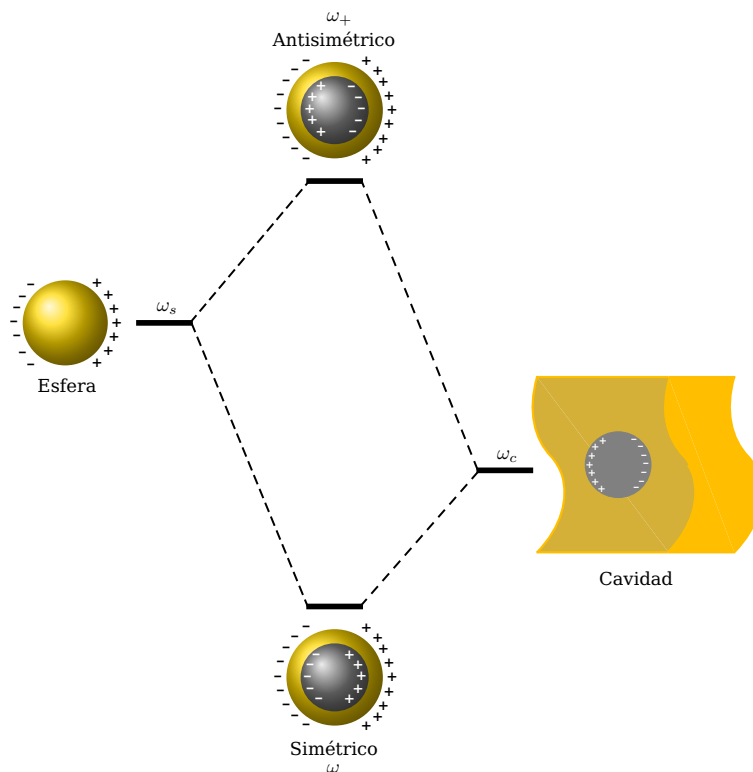


Figura 5.1: Diagrama descriptivo de los niveles de energía de la hibridación plasmónica en una NP tipo *core-shell* esférica que ocurren como resultado de la interacción entre la esfera y la cavidad plasmónica. El núcleo de las NPs tipo *core-shell* está compuesto por un material con permitividad eléctrica alta, como por ejemplo un óxido de hierro [60]. La NP tipo *core-shell* presenta un modo plasmónico de acoplamiento simétrico ω_- y un modo plasmónico de acoplamiento antisimétrico ω_+ . Los niveles de energía ω_c y ω_s representan las resonancias plasmónicas de la cavidad y de la esfera, respectivamente.

Para cascarones más delgados (más gruesos) se tiene una interacción más fuerte (más débil), lo que conlleva a una mayor (menor) separación de energías entre el modo plasmónico de acoplamiento simétrico y antisimétrico [90]. Por lo tanto, la teoría de hibridación plasmónica proporciona una descripción intuitiva de los plasmones y se ha convertido en una guía útil en la ingeniería de nanoestructuras metálicas con resonancias predecibles al aplicarse a geometrías complejas [55].

5.2. Sistema de NPs esféricas

Para el caso de NPs tipo *core-shell* esféricas, los cálculos de la sección transversal de absorción, se realizaron tanto de forma analítica (haciendo uso de la extensión de la solución de Mie), como de forma numérica (empleando los métodos numéricos BEM y FEM).

Para las NPs que presentaron un prominente pico de resonancia del plasmón localizado de superficie (LSPR) en el espectro de la sección transversal de absorción y sintonizado dentro los 650 – 900 nm del espectro electromagnético, se realizó un análisis de la variación en el grosor de la capa fijando el tamaño de su núcleo, para analizar el corrimiento de la resonancia y determinar si incluso una variación grande puede dejar el pico de resonancia dentro del rango de interés.

En la Fig. 5.2 se muestran seis curvas de la sección transversal de absorción, C_{abs} , en función tanto de la longitud de onda del haz incidente (escala inferior) como de la frecuencia (escala superior), para seis NPs esféricas con núcleo magnético (α -hematita, magnetita y níquel) de radio $a = 27$ nm y cascarón metálico (oro y plata) de $\Delta r = 9$ nm. Se observa que el cálculo realizado de manera analítica (línea discontinua) coincide con el cálculo hecho por los métodos numéricos (BEM – círculos y FEM – estrellas) para todos los casos. De las seis curvas de la sección transversal de absorción, las NPs con núcleo de

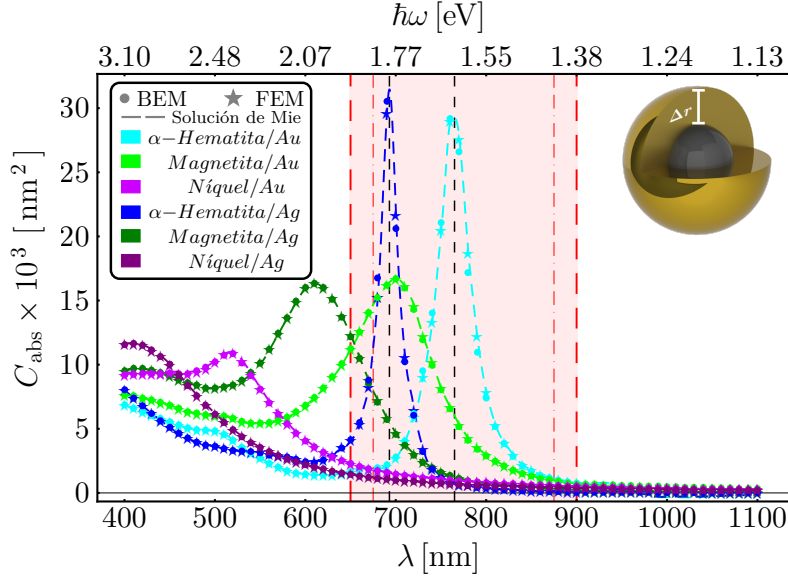


Figura 5.2: Sección transversal de absorción de NPs esféricas tipo *core-shell*, embebidas en agua ($n = 1.33$), con radio interior $a = 27$ nm y un grosor de capa $\Delta r = 9$ nm, en función tanto de la longitud de onda del haz incidente (escala inferior) como de la frecuencia (escala superior). Las líneas discontinuas muestran el cálculo hecho de manera analítica y los círculos (BEM) como al igual que las estrellas (FEM) son cálculos hecho por métodos numéricos.

α -hematita y magnetita y cascarón de Au, al igual que la NP con núcleo de α -hematita y cascarón de Ag, presentan una resonancia del plasmón dipolar dentro del rango óptico de mínima absorción del tejido de la piel y las NPs con núcleo de α -hematita presentan el doble de C_{abs} que para el caso con núcleo de magnetita. Las resonancias del plasmón dipolar para las NPs con núcleo de α -hematita y con cascarón de Au y Ag, están localizadas en $\lambda = 765$ nm y $\lambda = 693$ nm, respectivamente (ver líneas verticales discontinuas negras en la Fig. 5.2). Para estos dos casos, se analizó el efecto del corrimiento de la resonancia del plasmón dipolar al modificar el grosor de la capa, para NPs tipo *core-shell* embebidas en agua ($n = 1.33$), con núcleo de α -hematita de radio $a = 27$ nm y capa tanto de oro como de plata. En la Fig. 5.3 se muestra el efecto de la variación del grosor de la capa de 4.5 nm a 18 nm, en pasos de 4.5 nm. Conforme se aumenta el grosor de la capa de la NP (con α -hematita en el núcleo y cascarón de Ag o Au) la respuesta del modo plasmónico *bonding* de menor energía en la sección transversal de absorción tiene un corrimiento hacia el azul [ver Figs. 5.3(a) y 5.3(b)]. Por un lado, para el caso en el que se tienen un cascarón de Ag, el valor máximo del espectro de C_{abs} disminuye conforme el grosor del cascarón aumenta [ver Fig. 5.3(a)], ya que hay una fuerza de acoplamiento débil entre el núcleo y la capa. Por otro lado, para el caso en el que se tienen un cascarón de Au [ver Fig. 5.3(b)], la línea discontinua de color morado se colocó como referencia para visualizar el corrimiento hacia el rojo del modo plasmónico *antibonding* de mayor energía al momento de aumentar el tamaño del cascarón.

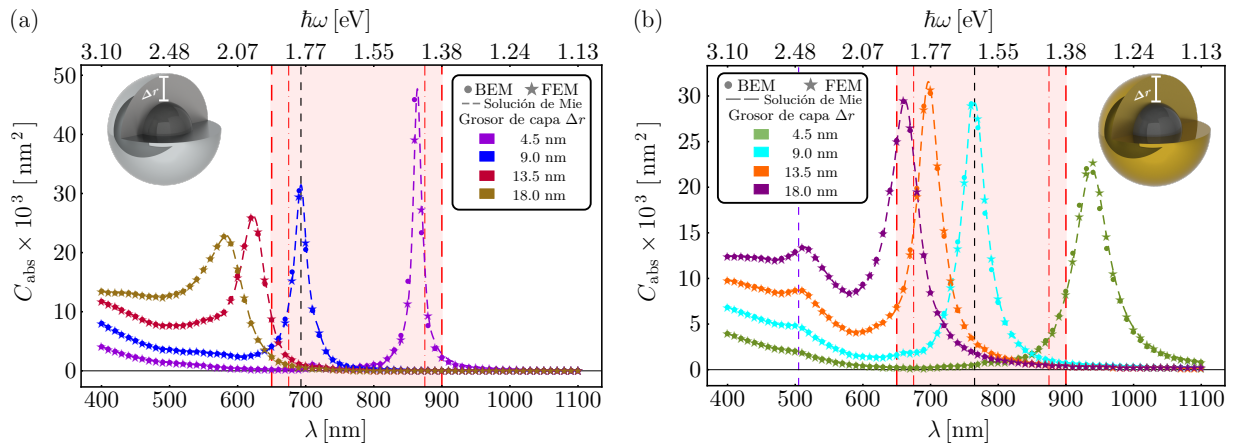


Figura 5.3: Sección transversal de absorción de NPs esféricas tipo *core-shell*, embebidas en agua ($n = 1.33$), con radio interior $a = 27$ nm y con diferentes grosores de capa, en función tanto de la longitud de onda del haz incidente (escala inferior) como de la frecuencia (escala superior). El núcleo de las NPs está compuesto por α -hematita mientras que el material de la capa es de: (a) Ag y (b) Au.

Es importante mencionar que al aumentar el grosor de la capa en la NP con α -hematita en el núcleo y cascarón de Au, se encontró que las resonancias dipolares siguen estando dentro del rango óptico de mínima absorción del tejido de la piel [ver Fig. 5.3(b)].

La distribución de la magnitud del campo eléctrico cercano a la NP, en el plano que corta a la NP y contiene su centro, inducido por una onda EM monocromática plana en una NP esférica, con núcleo de α -hematita de radio $a = 27$ nm y cascarón de Au y Ag de $\Delta r = 9$ nm, embebida en agua ($n = 1.33$), se muestran en la Fig. 5.4. Para el caso de la NP esférica con cascarón de Au, se presenta un modo plasmónico dipolar de acoplamiento antisimétrico y simétrico, de mayor y menor energía, en $\lambda = 505$ nm y $\lambda = 765$ nm, respectivamente [ver Figs. 5.4(a) y 5.4(b)]. Asimismo, para el caso de la NP esférica con cascarón de Ag, sólo se presenta un modo plasmónico dipolar de acoplamiento simétrico de menor energía en $\lambda = 693$ nm [ver Fig. 5.4(c)].

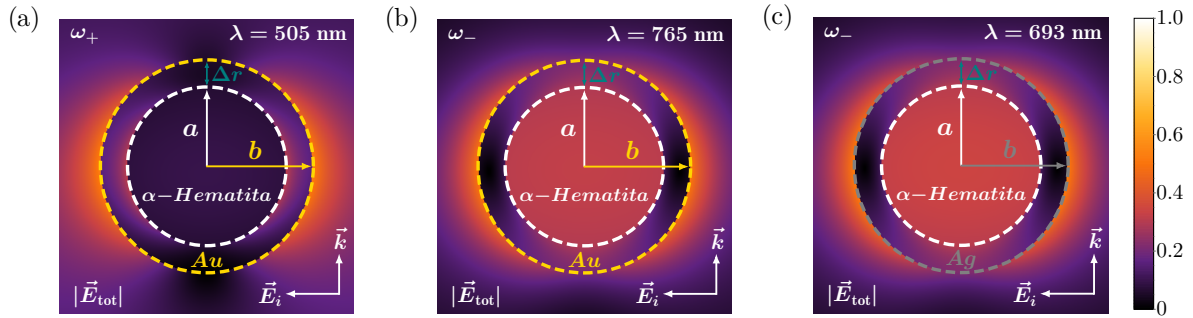


Figura 5.4: Distribución de la magnitud del campo eléctrico cercano a la NP, en el plano que corta a la NP y contiene su centro, inducido por una onda EM monocromática plana en NPs esféricas tipo *core-shell*. Las longitudes de onda en donde se presentan las resonancias dipolares son en (a) $\lambda = 505$ nm, (b) $\lambda = 765$ nm y (c) $\lambda = 693$ nm. El núcleo ($a = 27$ nm) de las NPs esféricas está compuesto por α -hematita mientras que el material del grosor de la capa ($\Delta r = 9$ nm) es de: (a), (b) Au y (c) Ag.

5.3. Sistema de NPs elipsoidales prolato cofocales: aproximación cuasi-estática

Como se mencionó al principio de este capítulo, no existen soluciones analíticas a las ecuaciones de Maxwell para el problema de esparcimiento y absorción de ondas electromagnéticas por un elipsoide de tamaño arbitrario, salvo para cuando el semieje mayor del elipsoide es mucho menor que la longitud de onda de la luz incidente, lo que corresponde al régimen cuasi-estático, introducido en el Capítulo 3. Se mostró que para el caso de un elipsoide cofocal tipo *core-shell* existe una expresión para la polarizabilidad [ver ec. (3.49)] con la que es posible calcular la sección transversal de absorción [ver ec. (3.8)].

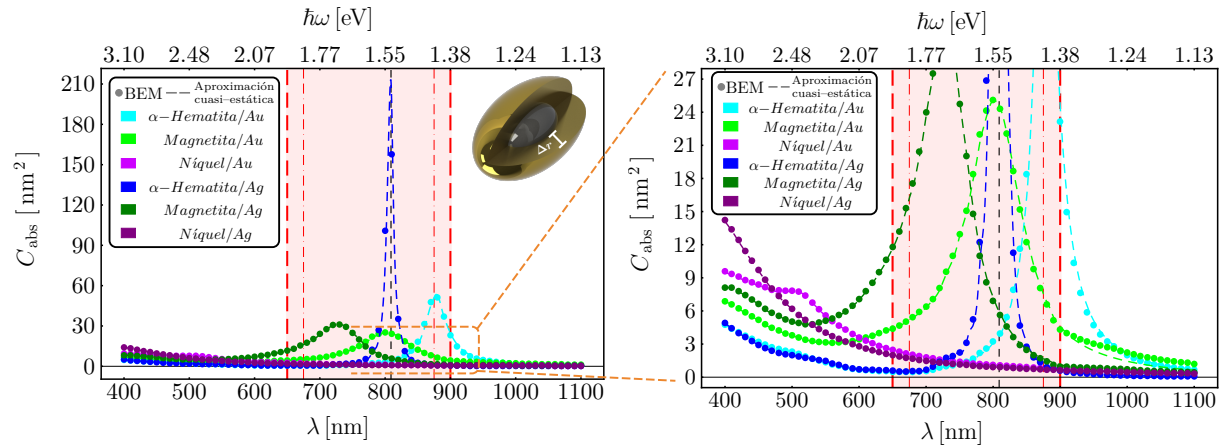


Figura 5.5: Sección transversal de absorción de NPs elipsoidales, prolato, cofocales, tipo *core-shell*, embebidas en agua ($n = 1.33$), de diámetros interior y exterior, longitudinal y transversal iguales a 7, 7.8 nm y 5, 6.07 nm, respectivamente, en función tanto de la longitud de onda del haz incidente (escala inferior) como de la frecuencia (escala superior). La gráfica de la derecha corresponde a una amplificación de la sección transversal de absorción. Las líneas discontinuas muestran el cálculo hecho bajo la aproximación cuasi-estática y los círculos por el método numérico BEM.

En la Fig. 5.5 se muestran seis curvas de la sección transversal de absorción, en función tanto de la longitud de onda del haz incidente (escala inferior) como de la frecuencia (escala superior), para seis NPs elipsoidales, prolato, cofocales, con núcleo magnético (α -hematita, magnetita y níquel) y cascarón metálico (Ag y Au), donde la longitud del semieje mayor y menor del elipsoide interior son $a_1 = 3.5$ nm y $b_1 = 2.5$ nm, respectivamente. El elipsoide exterior con semiejes a_2 y b_2 debe cumplir con la relación $a_1^2 + t = a_2^2$ y $b_1^2 + t = b_2^2$, garantizando que el sistema de elipsoides prolato sea cofocal. Con base a esto, las dimensiones del semieje mayor y menor del elipsoide exterior fueron $a_2 = 3.9$ nm y $b_2 = 3.035$ nm, respectivamente. Asimismo, se puede observar que el cálculo hecho usando la aproximación cuasi-estática (línea discontinua) coincide con el cálculo realizado usando el método numérico BEM (círculos) [ver Fig. 5.5]. Las NPs con núcleo de α -hematita y magnetita, y cascarón de Ag y Au presentan resonancias dipolares dentro del rango óptico de mínima absorción del tejido de la piel. Sin embargo la resonancia dipolar de la NP con núcleo de α -hematita y cascarón de Au se encuentra en el límite (líneas discontinuas delgadas con puntos de color rojo) del rango óptico de mínima absorción del tejido de la piel. Además, las NPs con núcleo magnético y con cascarón de Ag presentan un pico de mayor intensidad en la absorción en comparación a las NPs con núcleo magnético y con cascarón de Au [ver Fig. 5.5]. La gráfica de la derecha en la Fig. 5.5 muestra una amplificación de C_{abs} , evidenciando que para el caso de una NP elipsoidal, prolato, cofocal, con núcleo de Ni y cascarón de Ag, no se observa una resonancia dipolar en la ventana de frecuencias estudiada.

En el caso de NPs elipsoidales, prolato, cofocales, tipo *core-shell*, la NP que mostró una mayor magnitud en la resonancia dipolar en la sección transversal de absorción fue la NP con α -hematita en el núcleo y con cascarón de Ag [ver Fig. 5.5], cuyo máximo se encuentra a $\lambda = 809$ nm.

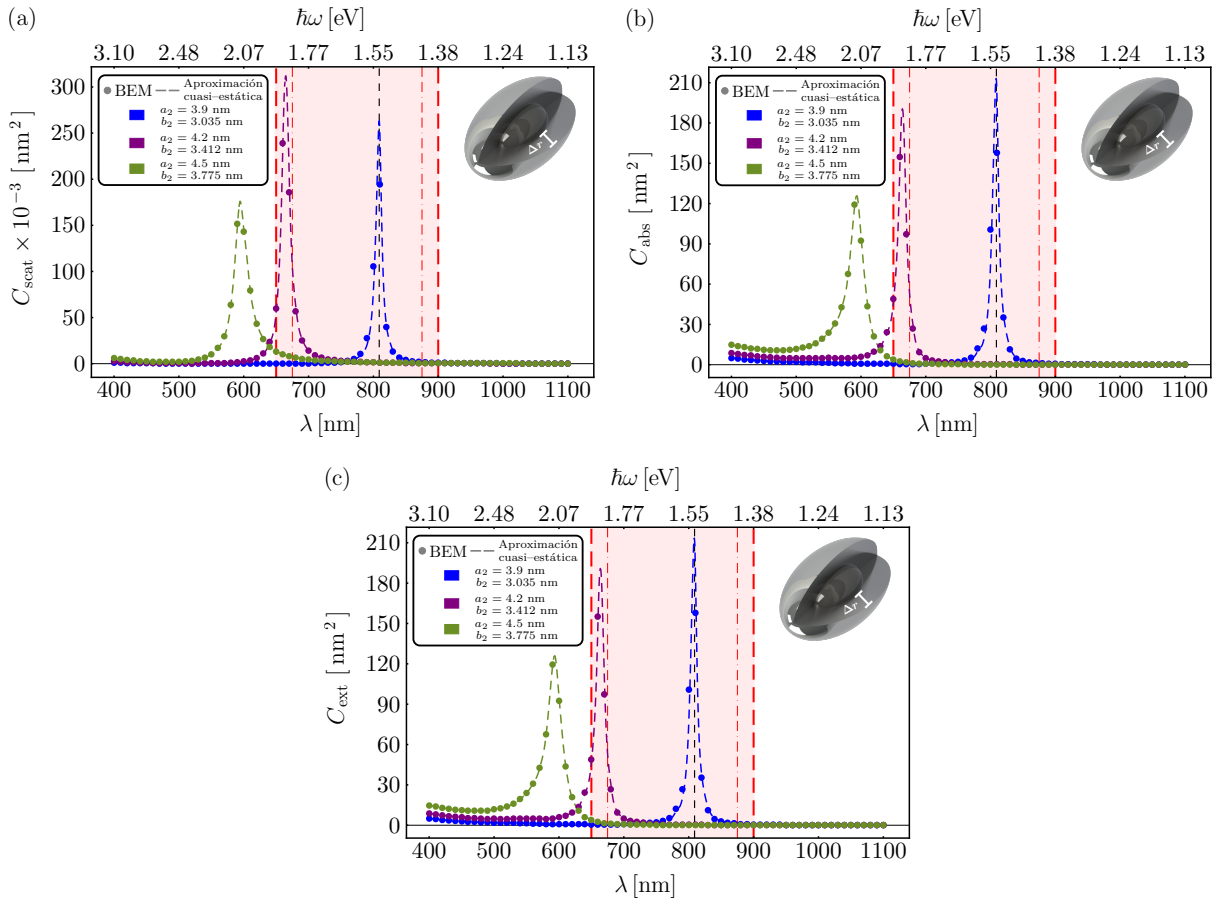


Figura 5.6: Sección transversal de (a) esparcimiento, (b) absorción y (c) extinción de una NP elipsoidal, prolato, cofocal, tipo *core-shell*, embebida en agua ($n = 1.33$), con semieje mayor y menor iguales a $a_1 = 3.5$ nm y $b_1 = 2.5$ nm, respectivamente y con diferentes grosores de capa, en función tanto de la longitud de onda del haz incidente (escala inferior) como de la frecuencia (escala superior). El núcleo de la NP está compuesto por α -hematita mientras que el material del grosor de la capa es de Ag.

Al tener NPs elipsoidales, prolato, cofocales, tipo *core-shell* tales que sus semiejes interiores y exteriores mayores son mucho menores que la longitud de onda de la luz incidente, la sección transversal de esparcimiento será proporcional al cuadrado del volumen de la NP, dividido entre la longitud de onda a la

cuarta potencia [ver ecs. (3.7) y (3.49)], mientras que la sección transversal de extinción será proporcional al volumen de la NP dividido entre la longitud de onda [ver ec. (3.6) y (3.49)]. Asimismo, por medio del teorema óptico es posible obtener la sección transversal de absorción de una NP a partir de la sección transversal de extinción menos la de esparcimiento. En este caso, la sección transversal de esparcimiento no tendrá una contribución significativa en la sección transversal de extinción [ver Fig. 5.6(a)], por lo que la sección transversal de absorción y extinción serán aproximadamente iguales [ver Figs. 5.6(b) y 5.6(c)]. La sección transversal de esparcimiento difiere en tres órdenes de magnitud con la sección transversal de absorción para el caso de la NP elipsoidal, prolato, cofocal con α -hematita en el núcleo y con cascarón de Ag [ver Fig. 5.6]. Al aumentar las dimensiones del semieje mayor y menor del elipsoide exterior (cumpliendo la relación $a_1^2 + t = a_2^2$ y $b_1^2 + t = b_2^2$, y sin variar la dimensión de los semiejes del núcleo) la respuesta del modo plasmónico *bonding* de menor energía en la sección transversal de absorción tiene un corrimiento hacia el azul [ver Fig. 5.6(b)], pero no es posible visualizar si hay un cambio en la respuesta del modo plasmónico *antibonding* de mayor energía. Además, al hacer un incremento en las dimensiones de los semiejes exteriores de la NP (es decir, cambiando el grosor de la capa pero manteniendo fijo su núcleo), se obtiene un corrimiento hacia el azul del máximo de la resonancia en la C_{abs} [ver Fig. 5.6(a)], como ocurrió en el caso de una esfera [ver Fig. 5.3(a)]. El tamaño del semieje mayor y menor interno del nanoelipsoide prolato, cofocal con núcleo de α -hematita y con cascarón de Ag, se fijó en $a_1 = 3.5$ nm y $b_1 = 2.5$ nm, respectivamente. Las dimensiones de los semiejes mayores y menores exteriores de la NP fueron $a_2 = 3.9$ nm y $b_2 = 3.035$ nm; $a_2 = 4.2$ nm y $b_2 = 3.412$ nm; y $a_2 = 4.5$ nm y $b_2 = 3.775$ nm, respectivamente.

5.4. Sistema de NPs elipsoidales prolato

Para aplicaciones biomédicas es conveniente utilizar NPs elipsoidales prolato de mayores dimensiones (pero menores a 200 nm [66]) en comparación a las estudiadas bajo la aproximación cuasi-estática (ver Sección 5.3), ya que es necesario que el eje longitudinal tenga mayor área de contacto e interacción con el receptor [54]. Sin embargo, para el caso general de NPs elipsoidales no existen soluciones analíticas a las ecuaciones de Maxwell, por lo que se utilizaron los métodos numéricos BEM y FEM para calcular las secciones transversales y analizar las resonancias de plasmones y propiedades ópticas de NPs elipsoidales, prolato, con núcleo magnético y rodeadas por una capa metálica, embebidas en agua ($n = 1.33$). Los parámetros $L = 2r_1$ y $W = 2r_2$ denotan el largo y ancho del núcleo de la NP elipsoidal prolato (*nanorice*), donde r_1 y r_2 son los radios del eje mayor y menor del núcleo, respectivamente [ver Fig. 5.7]. El parámetro Δr es el grosor de la capa de la NP elipsoidal prolato. En este sistema, se propone que la NP elipsoidal prolato sea iluminada por una onda EM monocromática plana [$\vec{E}_i = \vec{E}_0 \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r})$] a incidencia normal y oblicua, donde el eje mayor r_1 de la NP se encuentra orientado en dirección paralela al eje \hat{e}_z , como se muestra en la Fig 5.7.

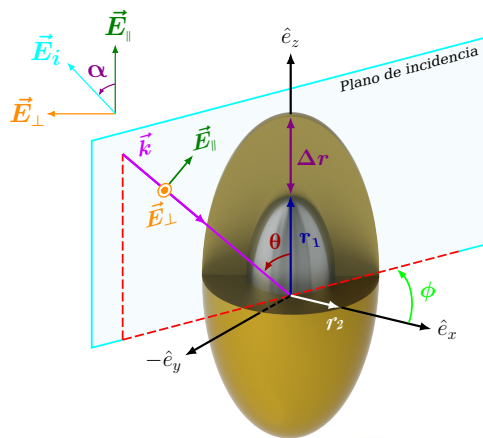


Figura 5.7: Diagrama esquemático de una NP elipsoidal prolato iluminada por una onda EM plana incidente, donde θ (ángulo de incidencia) es el ángulo que hace el vector de onda \vec{k} respecto al eje \hat{e}_z , ϕ (ángulo azimutal) es el ángulo que hace la proyección del vector de onda en el plano XY respecto al eje \hat{e}_x y α (ángulo de polarización) es el ángulo entre el plano de incidencia y el vector eléctrico.

5.4.1. Incidencia normal y oblicua

Para el caso de incidencia normal y oblicua se consideró que el núcleo magnético (α -hematita, magnetita y níquel) de las NPs elipsoidales prolato tuviera un largo y ancho igual a $L = 2r_1 = 120$ nm y

$W = 2r_2 = 24$ nm, respectivamente, y un cascarón metálico (Ag y Au) de $\Delta r = 12$ nm.

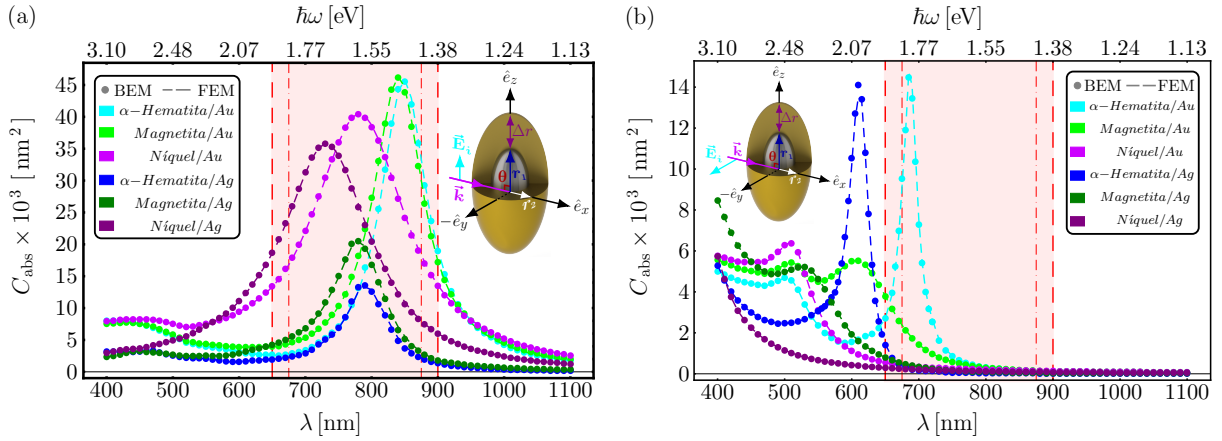


Figura 5.8: Sección transversal de absorción de los modos (a) longitudinal ($\theta = 90^\circ$ y $\alpha = 0^\circ$) y (b) transversal ($\theta = 90^\circ$ y $\alpha = 90^\circ$) de NPs elipsoidales, prolato, tipo *core-shell*, embebidas en agua ($n = 1.33$), con núcleo magnético, de largo y ancho igual a $L = 2r_1 = 120$ nm y $W = 2r_2 = 24$ nm, respectivamente, y rodeada por una capa metálica de $\Delta r = 12$ nm, en función tanto de la longitud de onda del haz incidente (escala inferior) como de la frecuencia (escala superior). Las líneas discontinuas corresponde a cálculos hechos por medio de FEM, mientras que los círculos corresponden a los cálculos hechos con BEM.

En la Fig. 5.8 se muestra el cálculo realizado por los métodos numéricos BEM (círculos) y FEM (líneas discontinuas) de la sección transversal de absorción de seis NPs elipsoidales prolato embebidas en agua ($n = 1.33$), iluminadas a incidencia normal. Se puede apreciar que la magnitud de las resonancias del modo longitudinal ($\theta = 90^\circ$ y $\alpha = 0^\circ$) [ver Fig. 5.8(a)] son en general de mayor magnitud que para el modo transversal ($\theta = 90^\circ$ y $\alpha = 90^\circ$) [ver Fig 5.8(b)]. En el caso del modo longitudinal ($\theta = 90^\circ$ y $\alpha = 0^\circ$) todas las NPs con núcleo magnético y cascarón metálico presentan resonancias plasmónicas dentro del rango óptico de mínima absorción del tejido de la piel y las NPs elipsoidales, prolato, con núcleo de α -hematita y magnetita con cascarón de Au presentan la mayor respuesta de resonancia plasmónica en $\lambda = 850$ nm y $\lambda = 840$ nm, respectivamente [ver Fig. 5.8(a)]. Sin embargo, en el caso del modo transversal ($\theta = 90^\circ$ y $\alpha = 90^\circ$) sólo la NP elipsoidal, prolato, con núcleo de α -hematita y cascarón de Au presenta una resonancia plasmónica, en $\lambda = 685$ nm, dentro del rango óptico de mínima absorción del tejido de la piel y además una resonancia plasmónica fuera, en $\lambda = 510$ nm, del rango de los 650 – 900 nm del espectro electromagnético [ver Fig. 5.8(b)].

Al calcular la distribución de carga inducida es posible determinar la naturaleza de las resonancias plasmónicas obtenidas en la NP elipsoidal, prolato, con núcleo de α -hematita y cascarón de Au para los modos longitudinal y transversal, por lo que se calculó la distribución de la magnitud del campo eléctrico cercano a la NP en las longitudes de onda resonantes $\lambda = 510$ nm (modo transversal de mayor energía), $\lambda = 685$ nm (modo transversal de menor energía) y $\lambda = 850$ nm (modo longitudinal de menor energía). En la Fig. 5.9 se muestran las distribuciones de la magnitud del campo eléctrico cercano a la NP en los planos XZ y YZ inducidas por una onda EM monocromática plana asociadas al modo longitudinal y transversal, respectivamente, de la NP elipsoidal, prolato, con núcleo de α -hematita y cascarón de Au, embebida en agua ($n = 1.33$). Cuando el campo eléctrico incidente se encuentra en dirección paralela ($\theta = 90^\circ$ y $\alpha = 0^\circ$) al eje mayor de la NP, se presenta un modo plasmónico dipolar de acoplamiento simétrico de menor energía en $\lambda = 850$ nm, en la que el campo cercano se encuentra distribuido en los extremos del eje mayor de la NP [ver Fig. 5.9(a)]. Asimismo, cuando el campo eléctrico incidente está en dirección perpendicular ($\theta = 90^\circ$ y $\alpha = 90^\circ$) al eje mayor de la NP, ocurre un modo plasmónico dipolar de acoplamiento antisimétrico y simétrico, de mayor y menor energía, en $\lambda = 510$ nm y $\lambda = 685$ nm, respectivamente [ver Figs. 5.9(b) y 5.9(c)], en la que a lo largo de los ejes menores de la NP se encuentra distribuido el campo cercano. Por lo tanto, a partir las distribuciones de magnitud del campo eléctrico cercano [ver Fig. 5.9] se concluye que al tener una respuesta diferente en cada polarización, es posible tener control sobre las zonas de amplificación de campo eléctrico y por tanto de las zonas donde habrá un incremento local de la temperatura.

De manera experimental es complicado fabricar y sintetizar un conjunto de NPs elipsoidales, prolato, tipo *core-shell* completamente uniformes en dimensiones, y por lo general hay mayor incertidumbre en el largo del *nanorice* pero menor incertidumbre en el cascarón [64], es por eso que se consideró que la NP tuviera mayor (menor) variación en el largo (cascarón). En la Fig. 5.10 se muestran las simulaciones nu-

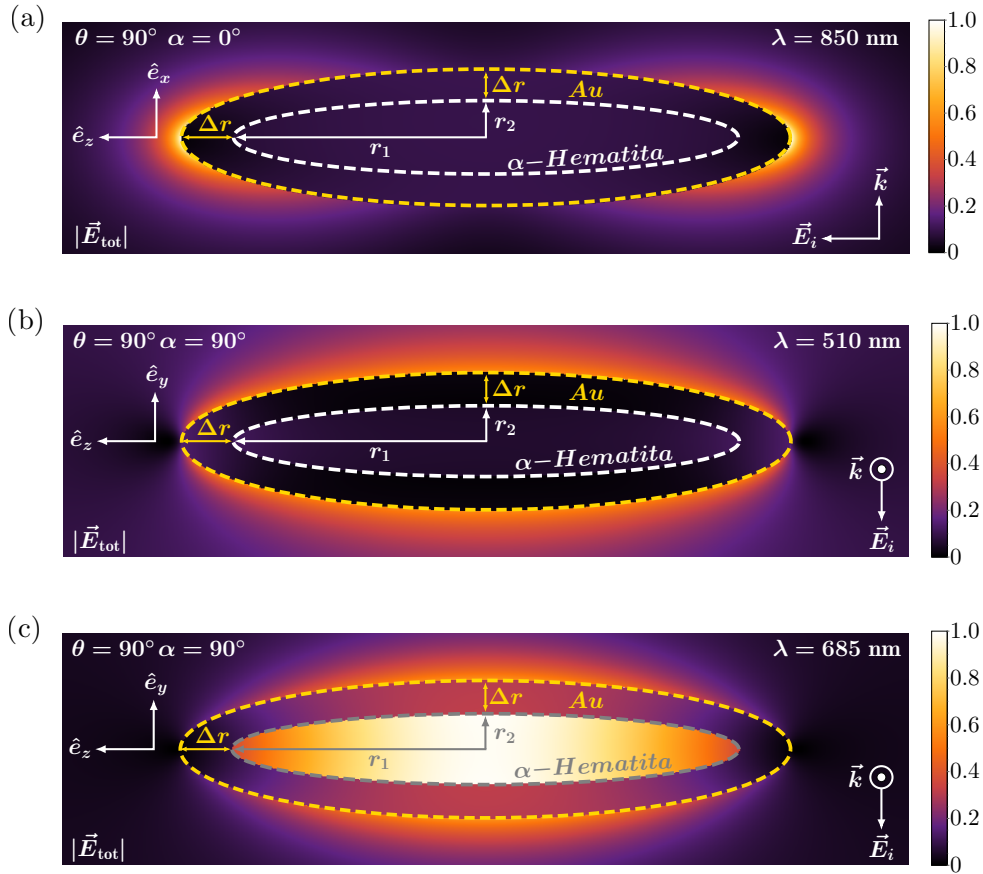


Figura 5.9: Distribución de la magnitud del campo eléctrico cercano en los planos (a) XZ y (b), (c) YZ , inducido por una onda EM monocromática plana a incidencia normal para el modo (a) longitudinal a $\lambda = 850$ nm, (b) transversal a $\lambda = 510$ nm y (c) transversal a $\lambda = 685$ nm. El núcleo ($r_1 = 60$ nm y $r_2 = 12$ nm) de la NP elipsoidal prolato está compuesto por α -hematita y rodeada con Au ($\Delta r = 12$ nm).

méricas de la sección transversal de absorción para una NP elipsoidal, prolato, con núcleo de α -hematita y cascarón de Au, embebida en agua ($n = 1.33$), a incidencia normal para el modo longitudinal, con variaciones en el largo y ancho del núcleo, así como en el grosor de la capa. El interés de estudiar esta NP se debe a que para ambas polarizaciones, el pico de LSPR cae dentro del rango de interés $650 - 900$ nm del espectro de la C_{abs} . Las dimensiones que se consideraron fueron: $L = 120 \pm 16$ nm, $W = 24 \pm 8$ nm y $\Delta r = 12 \pm 4$ nm [64]. De manera natural, se puede pensar que se hará un análisis de la sección transversal de absorción de las 27 posibles combinaciones al variar las dimensiones L , W y Δr . Sin embargo solamente se analizaron cinco casos por razones que se explicarán a continuación. Primero se consideraron los dos casos extremos, en los que la frecuencia de resonancia tiene un corrimiento máximo hacia el azul (cuando la NP elipsoidal se asemeja más a una esfera) [ver ① en la Fig. 5.10(a)] y hacia el rojo (cuando la NP elipsoidal es lo más alargada posible) [ver ⑤ en la Fig. 5.10(a)]. En todos los 25 casos restantes, las frecuencias de resonancia caerán entre las resonancias de los dos casos extremos. El mayor corrimiento hacia el azul (rojo) ocurre cuando se disminuye (aumenta) el largo del núcleo y se aumenta (disminuye) el ancho del núcleo y a su vez se mantienen fijo el valor máximo (mínimo) del cascarón. Si para algún caso de los 27 posibles, la frecuencia de resonancia cayera fuera de la región de interés, aún así es posible sintonizarlo al modificar el grosor de la capa [ver Fig 5.10(b)]. Adicionalmente a los dos casos extremos, se consideraron los casos en que hay un aumento [ver ② en la Fig. 5.10(a)] y disminución [ver ④ en la Fig. 5.10(a)] en todas las dimensiones del valor nominal ($L = 2r_1 = 120$ nm, $W = 2r_2 = 24$ nm y $\Delta r = 12$ nm), ver Tabla 5.1 y el quinto caso analizado corresponde a la NP elipsoidal con los valores nominales [ver ③ en la Fig. 5.10(a)].

Es importante destacar que si se mantiene el largo máximo del núcleo de la NP elipsoidal ($L = 136$ nm), pero se disminuye el ancho del núcleo, es decir que la NP elipsoidal es más alargada (casos ②, ④ y ⑤), el pico de LSPR en el espectro de la sección transversal de absorción estará fuera del rango óptico de mínima absorción, con un corrimiento hacia el rojo. Para los casos ① y ⑤, se analizó el efecto del corrimiento del modo plasmónico dipolar modificando sólo el grosor de la capa y fijando el largo y ancho del núcleo. En la Fig. 5.10(b) se muestra el efecto de la variación del grosor de la capa de 8 nm a 16

Caso	Largo L [nm]	Ancho W [nm]	Grosor de capa Δr [nm]	Descripción	LSPR [nm]
①	104	32	16	Corrimiento máximo hacia el azul	750
②	136	32	16	Aumento en todas las dimensiones	840
③	120	24	12	Valor nominal	850
④	104	16	8	Disminución en todas las dimensiones	900
⑤	136	16	8	Corrimiento máximo hacia el rojo	1,050

Tabla 5.1: Tabla de los cinco casos estudiados de los 27 posibles considerando las incertidumbres experimentales [64].

nm, en pasos de 4 nm. Conforme se aumenta el grosor de la capa de la NP, la frecuencias de resonancia del modo plasmónico dipolar en la sección transversal de absorción tiene un corrimiento hacia el azul, logrando sintonizar los picos de LSPRs dentro de los 650 – 900 nm del espectro electromagnético [ver Fig. 5.10(b)].

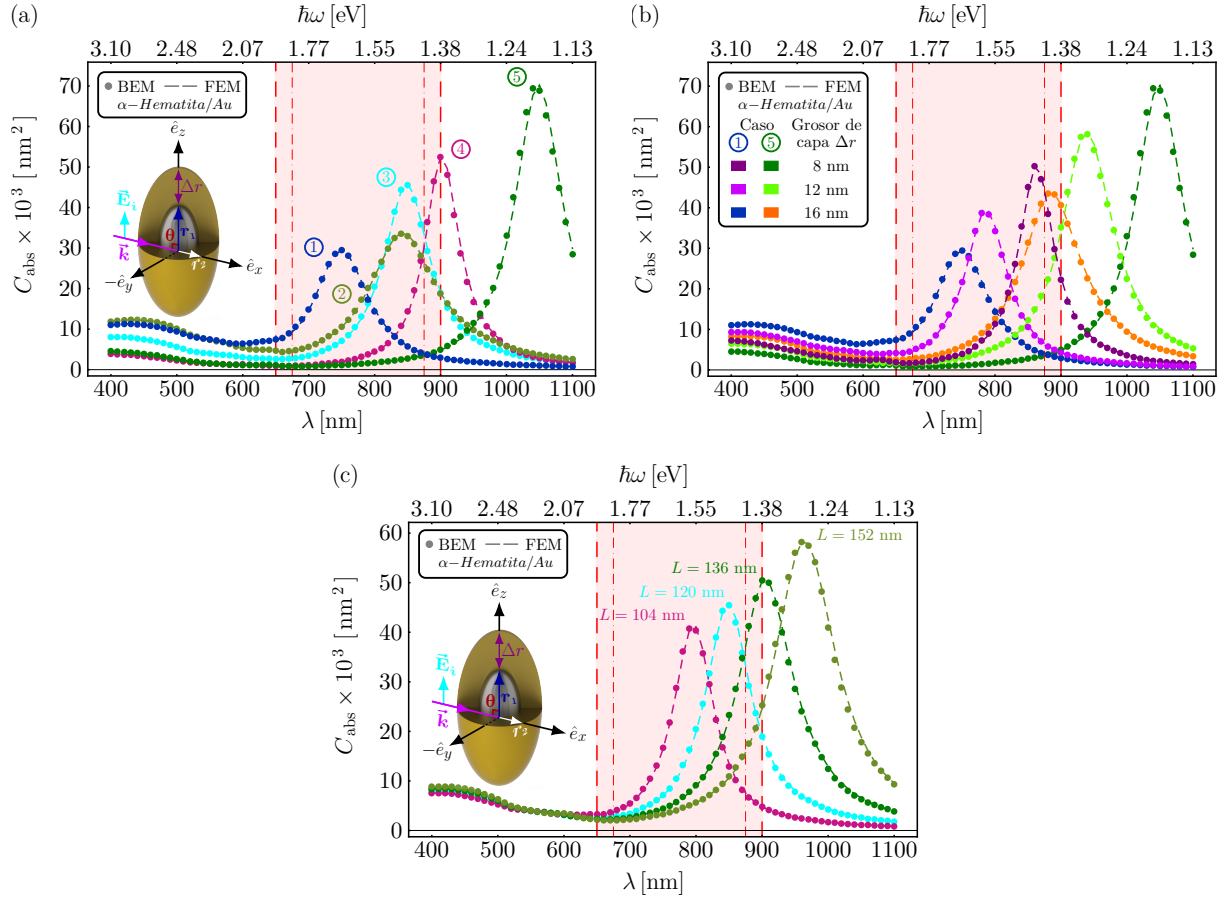


Figura 5.10: Sección transversal de absorción de una NP elipsoidal, prolato, con núcleo de α -hematita y cascarón de Au, embebida en agua ($n = 1.33$), en función tanto de la longitud de onda del haz incidente (escala inferior) como de la frecuencia (escala superior). (a) Variaciones consideradas en el largo L y ancho W del núcleo, así como del cascarón Δr : ① $L = 104$ nm, $W = 32$ nm y $\Delta r = 16$ nm, ② $L = 136$ nm, $W = 32$ nm y $\Delta r = 16$ nm, ③ $L = 120$ nm, $W = 24$ nm y $\Delta r = 12$ nm, ④ $L = 104$ nm, $W = 16$ nm y $\Delta r = 8$ nm y ⑤ $L = 136$ nm, $W = 16$ nm y $\Delta r = 8$ nm. (b) Casos ① y ⑤ con largo y ancho del núcleo iguales a $L = 104$ nm y $W = 32$ nm y $L = 136$ nm, $W = 16$ nm, respectivamente, y con diferentes grosores de capa. (c) El ancho W del núcleo de la NP y el grosor de la capa se encuentran fijos en $W = 24$ nm y $\Delta r = 12$ nm, respectivamente, mientras que el largo L del núcleo se alarga en pasos de 16 nm comenzando desde $L = 104$ nm hasta $L = 152$ nm.

Dado que experimentalmente se tienen menor control en el largo del núcleo de una NP elipsoidal [64], se consideró el caso en donde sólo se modifica el largo L del núcleo de la NP, comenzado desde $L = 104$ nm hasta $L = 152$ nm, en pasos de 16 nm, manteniendo fijas las dimensiones del ancho W del núcleo de la NP y del grosor de la capa en $W = 24$ nm y $\Delta r = 12$ nm, respectivamente. Al sólo modificar el largo de la NP, los únicos casos en que las resonancias plasmónicas se encuentran dentro de rango óptico

de mínima absorción del tejido de la piel es para $L = 104$ nm y $L = 120$ nm [ver Fig. 5.10(c)]. A partir de los resultados obtenidos en las Figs. 5.10(a), 5.10(b) y 5.10(c), en el caso de fabricar y sintetizar un conjunto de NPs elipsoidales, prolato, con núcleo de α -hematita y cascarón de Au, embebidas en agua, con dimensiones de largo y ancho en el núcleo iguales a $L = 2r_1 = 120$ nm y $W = 2r_2 = 24$ nm, respectivamente, y cascarón de $\Delta r = 12$ nm, se puede obtener picos de LPSRs sintonizados dentro los 650 – 900 nm del espectro de la sección transversal de absorción, a pesar de que las NPs tengan variaciones en el largo L y ancho W del núcleo, así como del cascarón Δr .

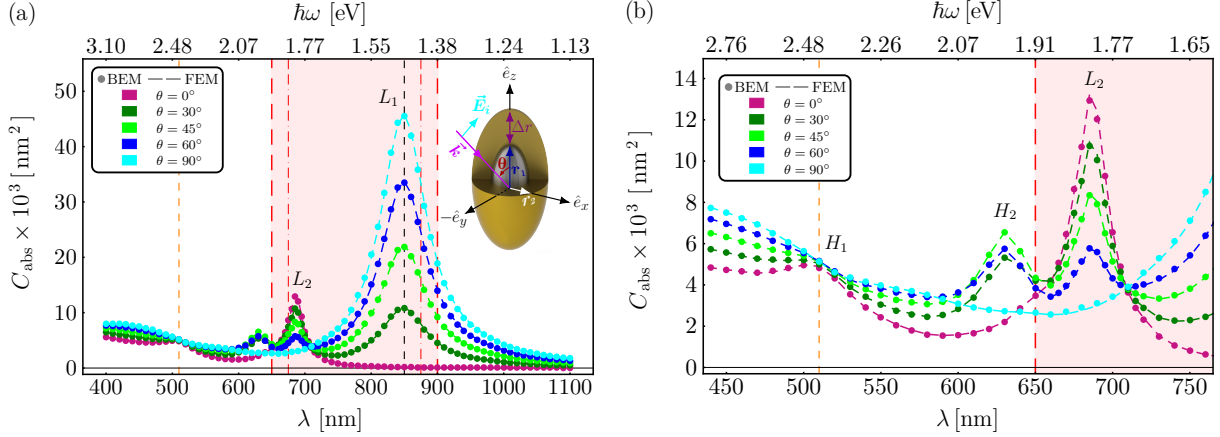


Figura 5.11: (a) Sección transversal de absorción de una NP elipsoidal, prolato, con núcleo ($L = 2r_1 = 120$ nm y $W = 2r_2 = 24$ nm) de α -hematita y cascarón de Au ($\Delta r = 12$ nm), embebida en agua ($n = 1.33$), en función tanto de la longitud de onda del haz incidente (escala inferior) como de la frecuencia (escala superior), para diferentes valores del ángulo de incidencia, definido como el ángulo entre el vector de onda incidente y el eje \hat{e}_z . (b) Sección transversal de absorción ampliada en un rango de 450 – 750 nm de longitud de onda.

Dado que experimentalmente las NPs pueden quedar orientadas al azar, se realizó un estudio de la respuesta óptica de NPs elipsoidales en función del ángulo de incidencia θ de la luz incidente. Se consideró una NP elipsoidal, prolato, con núcleo de α -hematita y cascarón de Au ($\Delta r = 12$ nm), embebida en agua ($n = 1.33$), con dimensiones de largo y ancho igual a $L = 2r_1 = 120$ nm y $W = 2r_2 = 24$ nm, respectivamente. En la Fig. 5.11 se consideraron cinco ángulos de incidencia $\theta = 0^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ$ y 90° , y con excepción de $\theta = 0^\circ$ y $\theta = 90^\circ$, para cada ángulo, se aprecian cuatro picos de resonancia plasmónica de superficie localizada en la sección transversal de absorción: pico principal de mayor energía H_1 , pico secundario de mayor energía H_2 , pico secundario de menor energía L_2 y pico principal de menor energía L_1 . La presencia de estos cuatro picos de resonancia se debe a que tanto los plasmones de superficie transversales (H_1 y L_2) como los plasmones de superficie longitudinales (L_1) se encuentran excitados [ver Fig. 5.11]. Al incrementar el valor de θ , el pico de resonancia dipolar (L_1) de la sección transversal de absorción tienen un incremento rápido en su magnitud y con un ligero corrimiento hacia el rojo [ver Fig. 5.11(a)]. Asimismo, a medida que el valor de θ aumenta (excepto en $\theta = 0^\circ$ y $\theta = 90^\circ$), la intensidad del pico secundario de menor energía L_2 disminuye gradualmente hasta que desaparece del espectro de la sección transversal de absorción [ver Fig. 5.11(b)].

5.4.2. Sistema ideal de una NP elipsoidal prolato

Por último, se consideró el caso en que una NP elipsoidal, prolato, con núcleo de α -hematita ($L = 2r_1 = 120$ nm y $W = 2r_2 = 24$ nm) y cascarón de Au ($\Delta r = 12$ nm), embebida en agua ($n = 1.33$), estuviera orientada al azar, por lo que se consideró una onda incidente tal que $\theta = 45^\circ, \phi = 0^\circ$ y $\alpha = 35.26^\circ$ para asegurar que las componentes del campo de excitación satisfagan $E_{i,x} = E_{i,y} = E_{i,z}$ [93], excitando tanto los modos longitudinales como los transversales. En este caso en particular, en el espectro de la sección transversal de absorción, Fig. 5.12, se muestran cuatro picos de LSPR: H_1 (510 nm), H_2 (630 nm), L_2 (685 nm) y L_1 (850 nm), correspondientes a cuatro resonancias plasmónicas diferentes y donde dos de ellas están dentro del rango de los 650 – 900 nm del espectro electromagnético de interés [ver Fig. 5.12(a)]. Para confirmar el tipo de modo longitudinal/transversal de las cuatro resonancias plasmónicas, se calcularon las distribuciones de carga superficial en la NP elipsoidal prolato tipo *core-shell*, asociadas a las longitudes de onda resonantes [ver Fig. 5.12(b)].

La teoría de hibridación plasmónica permite explicar el origen físico de los cuatro picos de LSRPs que aparecen en los espectros de la sección transversal de absorción de las Figs. 5.11 y 5.12, cuando la

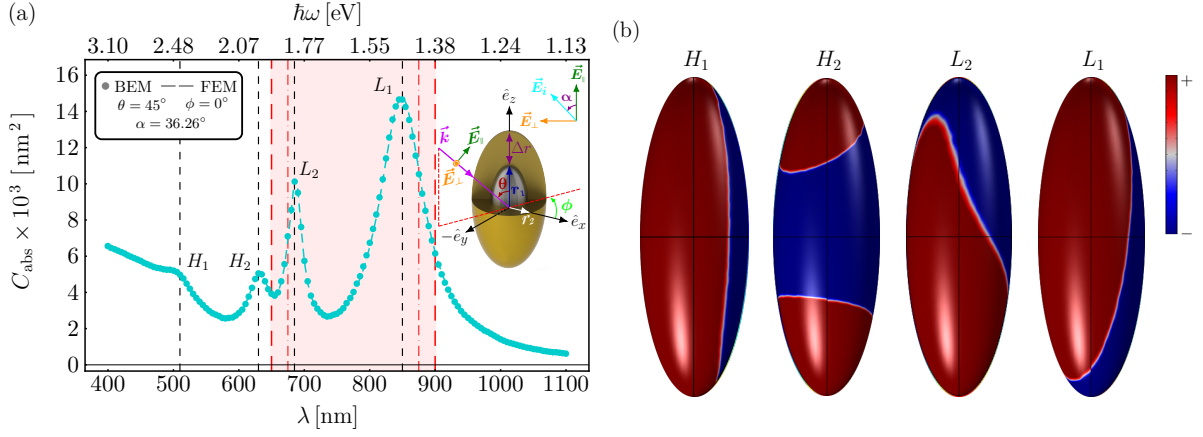


Figura 5.12: (a) Sección transversal de absorción calculada por los métodos numéricos FEM (líneas discontinuas) y BEM (círculos), en función tanto de la longitud de onda del haz incidente (escala inferior) como de la frecuencia (escala superior). El núcleo de la NP elipsoidal prolato está compuesto por α -hematita de dimensiones $L = 2r_1 = 120$ nm y $W = 2r_2 = 24$ nm, rodeado por una capa de Au de $\Delta r = 12$ nm y embebida en agua ($n = 1.33$). (b) Distribuciones de carga superficial en la NP elipsoidal prolato tipo *core-shell*, asociadas a los picos de resonancia en 850 nm (L_1), 685 nm (L_2), 630 nm (H_2) y 510 nm (H_1).

onda EM monocromática plana incide de manera oblicua en la NP elipsoidal prolato tipo *core-shell*, que puede ser modelada como un híbrido entre un elipsoide prolato sólido y una cavidad elipsoidal dentro de un metal continuo [ver Fig. 5.13(a)]. Cuando la NP se encuentra iluminada por una onda EM plana a incidencia normal, tanto en el elipsoide prolato como en la cavidad se presenta un modo dipolar ($\ell = 1$) y cuadrupolar ($\ell = 2$). Por un lado, en el caso del modo longitudinal ($\theta = 90^\circ$), el modo dipolar ($\ell = 1$) se encuentra a lo largo el eje mayor del elipsoide o de la cavidad, y en el modo transversal ($\theta = 0^\circ$) el modo dipolar ($\ell = 1$) se encuentra a lo largo el eje menor del elipsoide o de la cavidad [ver Fig. 5.13(a)]. Cuando θ es igual a 0° o 90° , sólo existen las hibridaciones dipolar-dipolar ($\ell = 1$) y cuadrupolar-cuadrupolar ($\ell = 2$) en la NP elipsoidal prolato tipo *core-shell* [ver Fig. 5.13(a)], ya que los diferentes modos tienen prohibido interactuar [94]. Las hibridaciones coherentes de estos modos plasmónicos elementales generan dos modos plasmónicos *antibonding* de mayor energía en $\lambda = 510$ nm y $\lambda = 685$ nm, y dos modos plasmónicos *bonding* de menor energía en $\lambda = 630$ nm y $\lambda = 850$ nm [ver Figs. 5.11 y 5.12].

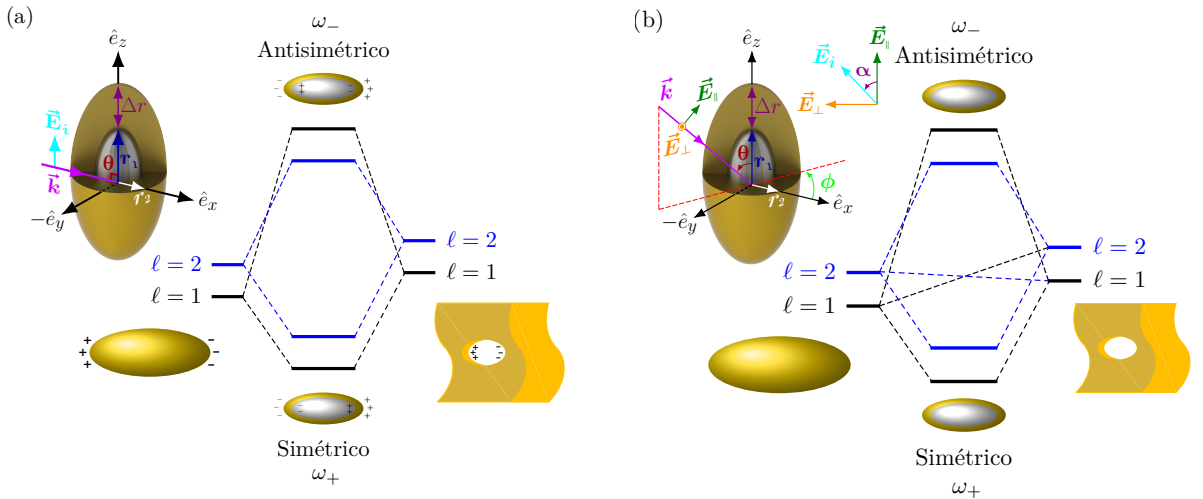


Figura 5.13: Modelo de hibridación plasmónica de una NP elipsoidal prolato iluminada por una onda EM plana a (a) incidencia normal y (b) con ángulo de incidencia $0^\circ < \theta < 90^\circ$. En este caso se omitieron todos los signos de las cargas inducidas, ya que la distribución de carga superficial en la NP tipo *core-shell* no es homogénea en cada resonancia [ver Fig. 5.12(b)].

Sin embargo, cuando $0^\circ < \theta < 90^\circ$, el modo dipolar ($\ell = 1$) se deriva del acoplamiento de dos modos dipolares que se encuentran a lo largo del eje mayor y menor del elipsoide o de la cavidad, respectivamente. La regla de selección de la hibridación plasmónica se *relaja* cuando la onda EM monocromática plana incide de manera oblicua a la NP elipsoidal prolato tipo *core-shell* [ver Fig. 5.13(b)], permitiendo que los diferentes los modos plasmónicos interactúen entre sí, por lo cual, el modo dipolar ($\ell = 1$) del elipsoide prolato puede interactuar no sólo con el modo dipolar ($\ell = 1$) de la cavidad, sino que también

con el modo cuadrupolar ($\ell = 2$) de la cavidad [94]. De la misma manera, cuando el campo eléctrico incidente no es perpendicular o paralelo al eje mayor del NP elipsoidal prolato tipo *core-shell*, el modo cuadrupolar ($\ell = 2$) del elipsoide prolato interactúa con el modo dipolar ($\ell = 1$) de la cavidad.

En la Fig. 5.14 se muestra la distribución de la magnitud del campo eléctrico cercano a la NP en el plano XZ inducidas por una onda EM monocromática plana a incidencia oblicua sobre una NP elipsoidal, prolato, con núcleo de α -hematita y cascarón de Au, embebida en agua ($n = 1.33$). A partir de las Figs. 5.12(b) y 5.14, se concluye que las diferentes distribuciones de la magnitud del campo eléctrico cercano van de acuerdo a las distribuciones de la carga superficiales antes calculadas, en las longitudes de onda resonantes: 850 nm (L_1), 685 nm (L_2), 630 nm (H_2) y 510 nm (H_1). Es decir, en el pico principal de menor energía L_1 y en el pico secundario de mayor energía H_2 tanto la carga positiva (+) como la negativa (-) se encuentran distribuidas en las puntas de la NP elipsoidal prolato [ver Figs. 5.14(a) y 5.14(d)], mientras que en el pico principal de mayor energía H_1 hay una distribución de carga positiva y negativa a lo largo de los laterales [ver Fig. 5.14(c)]. Por último, en el pico secundario de mayor energía, en medio de la NP elipsoidal prolato se encuentra una distribución carga negativa (-) y la carga positiva (+) está en ambas puntas [ver Figs. 5.14(b) y 5.12(b)].

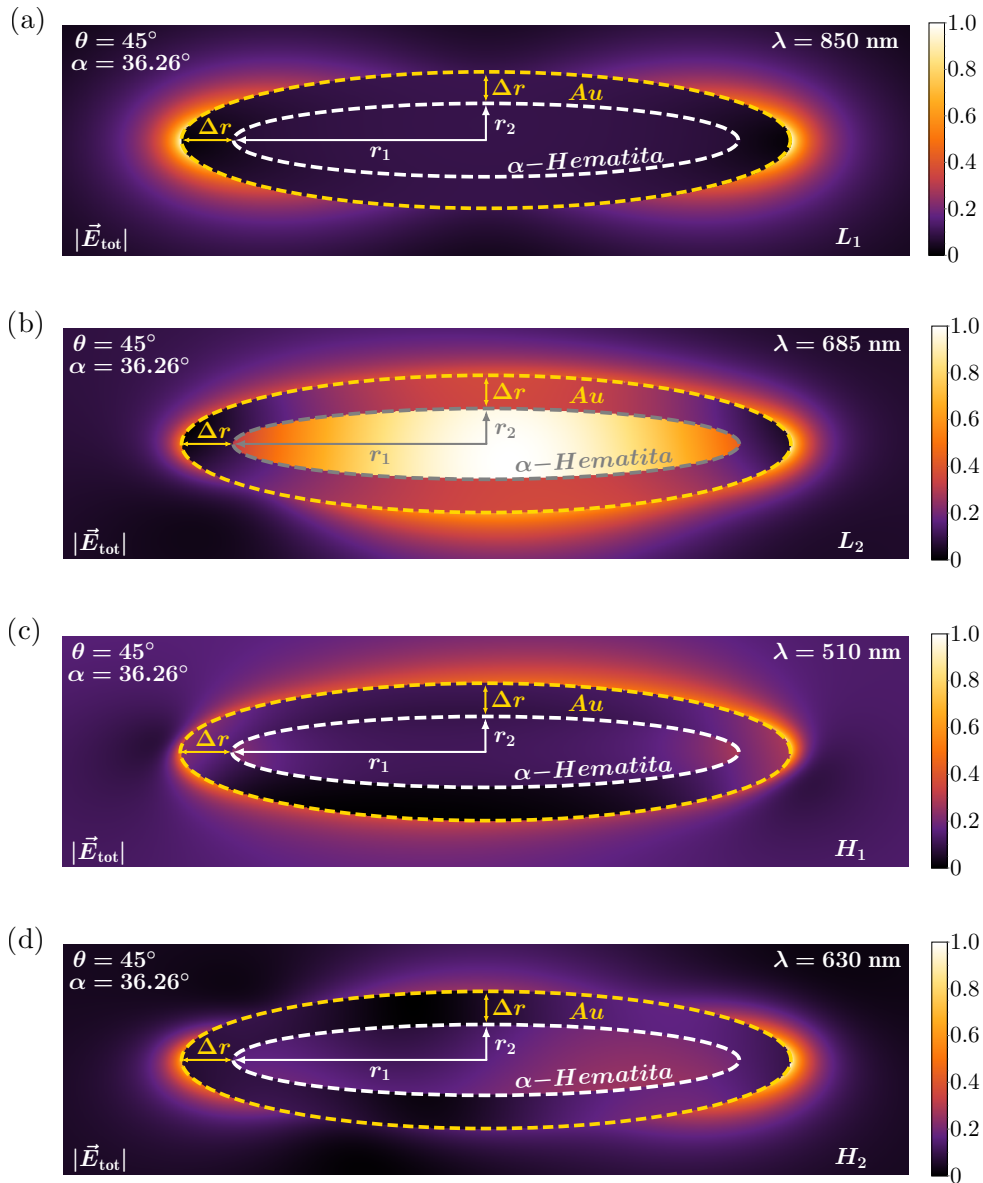


Figura 5.14: Distribución de la magnitud del campo eléctrico cercano a la NP en el plano XZ , inducido por una onda EM monocromática plana a incidencia oblicua para el pico (a) principal de menor energía en $\lambda = 850$ nm, (b) secundario de menor energía en $\lambda = 685$ nm, (c) principal de mayor energía en $\lambda = 510$ nm y (d) secundario de mayor energía en $\lambda = 630$ nm. El núcleo ($r_1 = 120$ nm y $r_2 = 24$ nm) de la NP elipsoidal prolato está compuesto por α -hematita y rodeada con Au ($\Delta r = 12$ nm), embebida en agua ($n = 1.33$), y además $\theta = 45^\circ$, $\phi = 0^\circ$ y $\alpha = 35.26^\circ$.

Conclusiones

En este trabajo se estudió la respuesta electromagnética de nanopartículas tipo *core-shell* embebidas en agua, para dos tipos de geometrías: esférica y elipsoidal (aproximación cuasi-estática y exacto). Las nanopartículas tipo *core-shell* tienen en el núcleo un material magnético (α -hematita, magnetita o níquel) y se encuentran rodeadas por un cascarón de material metálico (oro y plata), de tal forma que la nanopartícula tenga un componente magnético y otro metálico. La metodología para calcular la respuesta electromagnética de una sistema esférico tipo *core-shell*, se basó en la solución tipo Mie para el cálculo de los campos electromagnéticos en todo punto del espacio y las propiedades ópticas: sección transversal de esparcimiento (C_{scat}), extinción (C_{ext}) y absorción (C_{abs}). Para calcular analíticamente la respuesta electromagnética en un sistema elipsoidal cofocal tipo *core-shell*, cuyo semieje mayor del cascarón es mucho menor que la longitud de onda de la luz incidente, se consideró que el elipsoide se encuentra sujeto a un campo eléctrico que no tiene variaciones significativas en la región ocupada por el elipsoide, a lo que se le conoce como aproximación *cuasi-estática*. Para el caso general de nanopartículas elipsoidales tipo *core-shell* no existen soluciones analíticas a las ecuaciones de Maxwell, por lo que se implementaron métodos numéricos como BEM y FEM.

Para el caso de una nanopartícula esférica tipo *core-shell*, con núcleo de α -hematita y cascarón de oro o plata, se mostró que es posible sintonizar su resonancia dipolar plasmónica dentro del rango 650 – 900 nm del espectro de la sección transversal de absorción, región de transparencia del tejido de la piel, al modificar el grosor del cascarón. Conforme se aumentó el grosor de la capa de la nanopartícula, la frecuencia de resonancia del modo plasmónico de acoplamiento simétrico de menor energía en la sección transversal de absorción tuvo un corrimiento hacia el azul. Para el caso de una nanopartícula elipsoidal tipo *core-shell* (aproximación cuasi-estática), las nanopartículas con núcleo de α -hematita y magnetita y cascarón de oro y plata, presentan resonancias dipolares dentro del rango óptico de mínima absorción del tejido de la piel, y al incrementar las dimensiones de los semiejes exteriores de la nanopartícula elipsoidal con cascarón de plata, se obtuvo un cambio en el máximo de la resonancia de la sección transversal de absorción, con corrimiento hacia el azul, donde sólo para un caso ($a_2 = 4.5$ nm y $b_2 = 3.775$ nm) la resonancia está fuera de la región de interés. Con estos resultados, se valida el método numérico BEM para el cálculo de la sección transversal de absorción, para el caso de una nanopartícula elipsoidal prolato tipo *core-shell*, bajo la aproximación cuasi-estática.

En el caso de elipsoides en general, para el que no se cuenta con una solución analítica, se realizaron simulaciones numéricas empleando los métodos numéricos BEM y FEM de la sección transversal de absorción para el caso de una nanopartícula elipsoidal, prolato, con núcleo magnético (α -hematita, magnetita y níquel) y cascarón metálico (oro y plata), embebida en agua, con largo y ancho igual a $L = 2r_1 = 120$ nm y $W = 2r_2 = 24$ nm, respectivamente, y un cascarón de $\Delta r = 12$ nm, a incidencia normal en el modo longitudinal y transversal, en donde sólo la nanopartícula con núcleo de α -hematita y cascarón de oro, muestra resonancia plasmónicas dentro del rango de los 650 – 900 nm del espectro de la sección transversal de absorción en ambos modos. A partir de los resultados obtenidos en la [Subsección 5.4.1](#), en el caso de fabricar y sintetizar un conjunto de estas nanopartículas con dimensiones de largo y ancho en el núcleo iguales a $L = 2r_1 = 120$ nm y $W = 2r_2 = 24$ nm, respectivamente, y cascarón de $\Delta r = 12$ nm, se pueden obtener resonancias plasmónicas de superficie localizadas, sintonizadas dentro del rango 650 – 900 nm del espectro de la sección transversal de absorción, aún cuando las nanopartículas tengan incertidumbres en el largo L y ancho W del núcleo, así como del cascarón Δr . También se mostró el caso en que si se aumenta el largo y se disminuye el ancho del núcleo de la nanopartícula, los picos de resonancias plasmónicas de superficie localizadas están fuera del rango de interés pero se pueden sintonizar dentro de los 650 – 900 nm del espectro electromagnético, aumentando el grosor de la capa.

De manera experimental las nanopartículas pueden quedar orientadas al azar, por lo que al considerar diferentes valores de θ (excepto en $\theta = 0^\circ$ y $\theta = 90^\circ$) se presentan cuatro picos de resonancia plasmónica de superficie localizada en la sección transversal de absorción, excitando tanto a los plasmones de superficie transversales como los plasmones de superficie longitudinales. Al incrementar el valor de θ , el pico principal de menor energía de la sección transversal de absorción tienen un incremento rápido en

su magnitud y con un ligero corrimiento hacia el rojo y a medida que el valor de θ aumenta (excepto en $\theta = 0^\circ$ y $\theta = 90^\circ$), la intensidad del pico secundario de menor energía disminuye gradualmente hasta que desaparece del espectro de la sección transversal de absorción. A partir de la teoría de hibridación plasmónica es posible entender el origen físico de los cuatro picos de resonancias plasmónicas de superficie localizadas que aparecen en los espectros de la sección transversal de absorción, cuando la onda electromagnética monocromática plana incide de manera normal y oblicua a la nanopartícula elipsoidal prolato tipo *core-shell*. Además, esta teoría se puede aplicar como principio de diseño de nanoestructuras con geometrías complejas, obteniendo como resultado la implementación selectiva de propiedades ópticas optimizadas en estructuras y dispositivos de dimensión nanométrica.

En esta tesis se propone el uso de nanopartículas tipo *core-shell*, con núcleo de α -hematita y capa de oro, con tamaños de largo y ancho en el núcleo iguales a $L = 2r_1 = 120$ nm y $W = 2r_2 = 24$ nm, respectivamente, y cascarón de $\Delta r = 12$ nm, para aplicaciones biomédicas, en particular, la resonancia magnética nuclear, ya que si se construyen nanopartículas magnético/metálicas se tendrá la posibilidad de mantener una parte magnética (permitiendo el contraste en resonancia magnética nuclear) y una contraparte metálica, en la que es posible excitar plasmones de superficie localizados, si se ilumina la nanopartícula con la frecuencia correcta, generando calor localizado y, una vez funcionalizadas las nanopartículas, se podría eliminar células malignas de manera eficiente y controlada. Para que las nanopartículas sólo se adhieran a células malignas, estas deberán estar funcionalizadas con algún material biocompatible [22, 53]. En general, una vez ancladas las nanopartículas al tejido maligno, estas tendrán una orientación al azar, y en este trabajo de tesis se demuestra que empleado las nanopartículas propuestas es posible garantizar que existen resonancias cuyas frecuencias caen dentro de la región de transparencia del tejido de la piel (650 – 900 nm del del espectro electromagnético).

6.1. Trabajo a futuro

En aplicaciones biomédicas se han encapsulado nanopartículas con óxido de silicio (SiO_2) o sílice, ya que la capa de sílice garantiza robustez física, insensibilidad a las condiciones ambientales, mejor solubilidad y una superficie con propiedades simples de biofuncionalización y biocompatibilidad [53]. Como trabajo a futuro, se propone realizar el cálculo, por los métodos numéricos BEM, FEM y DDA (Discrete Dipole Approximation) [95], de la sección transversal de absorción de una nanopartícula elipsoidal, prolato, con núcleo de α -hematita o magnetita y cascarón de oro, encapsulada con sílice. Para conservar los picos de las resonancias plasmónicas de superficie localizadas dentro del rango de los 650 – 900 nm del espectro de las secciones transversales, el grosor de la tercera capa de sílice se espera que deberá de tener entre los cuatro y seis nanómetros [96].

Por otro lado, de manera teórica se ha analizado con el método de múltiples multipolos, la tensión en la superficie de nanoesferoides prolotos (contrastando con la aproximación cuasi-estática) de oro, nanoalambres y nanovarillas de plata para examinar el torque óptico ejercido por pinzas ópticas [97, 98]. En resumen, M. K. Kuo y colaboradores muestran, por métodos numéricos, que el torque óptico neto depende de la longitud de onda de la luz y del ángulo que existe entre la polarización del vector eléctrico incidente y la orientación del nanoesferoide prolato. Asimismo, un nanoesferoide prolato tiende a tener una orientación paralela (perpendicular) a la dirección de polarización de la onda incidente, si la longitud de onda de las pinzas ópticas es menor (mayor) a la de la resonancia plasmónica de superficie localizada. Para el modo paralelo, cuanto más larga sea la longitud de onda, mayor será la eficiencia del torque óptico, por lo que un láser de infrarrojo cercano sería lo óptimo para inducir un torque óptico grande con menos calor. Por los antecedentes anteriores y con la posibilidad de girar nanopartículas elipsoidales, se podría manipular de manera controlada (sin pérdidas de calor) la posición de las nanopartículas y así eliminar células malignas sin el riesgo de destruir células sanas. Asimismo, se podría hacer una análisis del torque óptico neto de una nanopartícula elipsoidal prolato tipo *core-shell* para el caso exacto (utilizando BEM, FEM y DDA) y bajo aproximación cuasi-estática (comparando con BEM y DDA), comparar las distribuciones de carga superficial obtenidas por el cambio de torque y del ángulo de incidencia en la nanopartícula y demostrar si existe o no alguna relación entre ellas.

Bibliografía

- [1] E. R. Andrew, *Nuclear Magnetic Resonance*, Cambridge University Press, New York, EEUU (1955).
- [2] M. L. Brongesma, *Surface Plasmon Nanophotonics*, Springer, Atlanta, EEUU (2007).
- [3] J. P. López-Neira, J. M. Galicia-Hernández, A. Reyes-Coronado, E. Pérez, and F. Castillo-Rivera, *Surface Enhanced Raman Scattering of Amino Acids Assisted by Gold Nanoparticles and Gd^{3+}* , *J. Phys. Chem. A*, **119**(18), 4127–4135 (2015). DOI: 10.1021/jp511548a.
- [4] C. F. Bohren, D. R. Huffman, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, Wiley, New York, EEUU (1983).
- [5] Z. S. Wu and Y. P. Wang, *Electromagnetic scattering for multilayered sphere: recursive algorithms*, *Radio Sci.*, **26**(6), 1393–1401 (1991). DOI: 10.1029/91RS01192.
- [6] U. Pal, O. Peña-Rodríguez, *Scattering of electromagnetic radiation by a multilayered sphere*, *Comput. Phys. Commun.*, **180**(11), 2348–2354 (2009). DOI: 10.1016/j.cpc.2009.07.010.
- [7] K. Ladutenko, U. Pal, A. Rivera, O. Peña-Rodríguez, *Mie calculation of electromagnetic near-field for a multilayered sphere*, *Comput. Phys. Commun.*, **214**, 225–230 (2017). DOI: 10.1016/j.cpc.2017.01.017.
- [8] W. Yang, *Improved recursive algorithm for light scattering by a multilayered sphere*, *Appl. Opt.*, **42**(9), 1710–1720 (2003). DOI: 10.1364/AO.42.001710.
- [9] H. Wei, A. Reyes-Coronado, P. Nordlander, J. Aizpurua, H. X. Xu, *Multipolar Plasmon Resonances in Individual Ag Nanorice*, *ACS Nano*, **4**(5), 2649–2654 (2010). DOI: 10.1021/nn1002419.
- [10] F. J. García de Abajo and J. Aizpurua, *Numerical simulation of electron energy loss near inhomogeneous dielectrics*, *Phys. Rev. B*, **56**(24), 15873–15884 (1997). DOI: 10.1103/PhysRevB.56.15873.
- [11] F. J. García de Abajo and A. Howie, *Relativistic Electron Energy Loss and Electron-Induced Photon Emission in Inhomogeneous Dielectrics*, *Phys. Rev. Lett.*, **80**(23), 5180–5183 (1998). DOI: 10.1103/PhysRevLett.80.5180.
- [12] O. Zienkiewicz, R. Taylor, J. Z. Zhu, *Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals*, Sixth Edition, Elsevier Butterworth-Heinemann, Oxford, UK (2005).
- [13] COMSOL, *The finite element method (FEM)*. <https://www.comsol.com/multiphysics/finite-element-method>, 2018. [Acceso en línea: 04–09–2018].
- [14] Organización Mundial de la Salud [OMS]. (2017). *Cáncer*. Nota descriptiva. Recuperado el 19 de septiembre de 2017, de: <http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs297/es>.
- [15] Organización Mundial de la Salud [OMS]. (s. f.). *Cáncer de mama: prevención y control*. Carga de cáncer de mama. Recuperado el 20 de octubre de 2017, de: <http://www.who.int/topics/cancer/breastcancer/es/index1.html>.
- [16] W. P. Hogle, *The state of the art in radiation therapy*, *Semin. Oncol. Nurs.*, **22**(4), 212–220 (2006). DOI: 10.1016/j.soncn.2006.07.004.
- [17] A. Nel, T. Xia, L. Mädler, N. Li, *Toxic Potential of Materials at the Nanolevel*, *Science*, **311**(5761), 622–627 (2006). DOI: 10.1126/science.1114397.

-
- [18] Q. A. Pankhurst, J. Connolly, S. K. Jones and J. Dobson, *Applications of magnetic nanoparticles in biomedicine*, J. Phys. D: Appl. Phys., **36**(13), R167–R181 (2003). DOI: 10.1088/0022-3727/49/50/501002.
- [19] A. S. Thakor, R. Paulmurugan, P. Kempen, C. Zavaleta, R. Sinclair, T. F. Massoud, S. S. Gambhir, *Oxidative Stress Mediates the Effects of Raman-Active Gold Nanoparticles in Human Cells*, Small, **7**(1), 126–136 (2011). DOI: 10.1002/smll.201001466.
- [20] R. Erlemann, M. F. Reiser, P. E. Peters, P. Vasallo, B. Nommensen, C. R. Kusnierz–Glaz, J. Ritter, A. Roessner, *Musculoskeletal neoplasms: static and dynamic Gd-DTPA-enhanced MR imaging*, Radiology, **171**(3), 767–773 (1989). DOI: 10.1148/radiology.171.3.2717749.
- [21] X. Huang and M. A. El-Sayed, *Gold nanoparticles: Optical properties and implementations in cancer diagnosis and photothermal therapy*, J. Adv. Res., **1**(1), 13–28 (2010). DOI: 10.1016/j.jare.2010.02.002.
- [22] L. R. Hirsch, R. J. Stafford, J. A. Bankson, S. R. Sershen, B. Rivera, R. E. Price, J. D. Hazle, N. J. Halas, J. L. West, *Nanoshell-mediated near-infrared thermal therapy of tumors under magnetic resonance guidance*, Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A., **100**(3), 13549–135554 (2003). DOI: 10.1073/pnas.2232479100.
- [23] N. Shah, A. Cerussi, C. Eker, J. Espinoza, J. Butler, J. Fishkin, R. Hornung, and B. Tromberg, *Noninvasive functional optical spectroscopy of human breast tissue*, Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A., **98**(8), 4420–4425 (2001). DOI: 10.1073/pnas.071511098.
- [24] R. Weissleder, *A clearer vision for in vivo imaging*, Nat. Biotechnol., **19**(5), 316–317 (2001). DOI: 10.1038/86684.
- [25] J. J. Quinn, *Bulk and surface plasmons in solids*, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B, **96**(3–4), 460–464 (1995). DOI: 10.1016/0168-583X(95)00246-4.
- [26] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, Seventh Edition, Wiley, New York, EEUU (1995).
- [27] A. V. Zayats, I. I. Smolyaninov, A. A. Maradudin, *Nano-optics of surface plasmon polaritons*, Phys. Rep., **408**(3–4), 131–314 (2005). DOI: 10.1016/j.physrep.2004.11.001.
- [28] L. Zhang, S. Mei, K. Huang, C. W. Qiu, *Advances in Full Control of Electromagnetic Waves with Metasurfaces*, Adv. Opt. Mater., **4**(6), 818–833 (2016). DOI: 10.1002/adom.201500690.
- [29] M. A. Garcia, *Surface plasmons in metallic nanoparticles: fundamentals and applications*, J. Phys. D: Appl. Phys., **44**(28), 283001 (2011). DOI: 10.1088/0022-3727/44/28/283001.
- [30] M. Mrejen, A. Israel, H. Taha, M. Palchan, A. Lewis, *Near-field characterization of extraordinary optical transmission in sub-wavelength aperture arrays*, Opt. Express, **15**(15), 9129–9138 (2007). DOI: 10.1364/OE.15.009129.
- [31] M. I. Stockman, *Nanoplasmonics: The physics behind the applications*, Phys. Today, **64**(2), 39–44 (2011). DOI: 10.1063/1.3554315.
- [32] R. W. Wood, *On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum*, Phil. Mag., **4**(21), 396–402 (1902). DOI: 10.1080/14786440209462857.
- [33] J. C. Maxwell Garnett, *Colours in metal glasses and in metallic films*, Philos. Trans. R. Soc. London, **203**(359–371), 385–420 (1904). DOI: 10.1098/rsta.1904.0024.
- [34] P. Drude, *Zur elektronentheorie der metalle*, Annalen der Physik, Band **306**, No. 3, 566–613 (1900). DOI: 10.1002/andp.19003060312.
- [35] Lord Rayleigh (J. W. Strutt), *On the electromagnetic theory of light*, Lond. Edinb. Dubl. Phil. Mag. Series 5, **12**(73), 81–101(1881). DOI: 10.1080/14786448108627074
- [36] L. V. Lorenz, *Det Kongelige Danske Videnskabernes Selskabs Skrifter*, **6**. Raekke, 6. Bind 1, 1 (1890).
- [37] P. Debye, *Der Lichtdruck auf Kugeln von beliebigem Material*, Annalen der Physik, Band **335**, No. 11, 57–136 (1909). DOI: 10.1002/andp.19093351103.
- [38] G. Mie, *Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen*, Annalen der Physik, Band **330**, No. 3, 377–445 (1908). DOI: 10.1002/andp.19083300302.

- [39] D. Pines, *Collective Energy Losses in Solids*, Rev. Mod. Phys., **28**(3), 184–198 (1956). DOI: 10.1103/RevModPhys.28.184.
- [40] D. Pines and D. Bohm, *A Collective Description of Electron Interactions: II. Collective vs Individual Particle Aspects of the Interactions*, Phys. Rev., **85**(2), 338–353 (1952). DOI: 10.1103/PhysRev.85.338.
- [41] U. Kreibig, P. Zacharias, *Surface plasma resonances in small spherical silver and gold particles*, Zeitschrift für Physik, **231**(2), 128–143 (1970). DOI: 10.1007/BF01392504.
- [42] S. L. Cunningham, A. A. Maradudin, R. F. Wallis, *Effect of a charge layer on the surface-plasmon-polariton dispersion curve*, Phys. Rev. B, **10**(8), 3342–3355 (1974). DOI: 10.1103/PhysRevB.10.3342.
- [43] F. Bloch, W. W. Hansen and Martin Packard, *Nuclear Induction*, Phys. Rev., **69**(3–4), 127 (1946). DOI: 10.1103/PhysRev.69.127.
- [44] F. Bloch, *Nuclear Induction*, Phys. Rev., **70**(7–8), 460–474 (1946). DOI: 10.1103/PhysRev.70.460.
- [45] N. Bloembergen, E. M. Purcell and R. V. Pound, *Relaxation Effects in Nuclear Magnetic Resonance Absorption*, Phys. Rev., **73**(7), 679–712 (1948). DOI: 10.1103/PhysRev.73.679.
- [46] W. C. Chumlea, S. S. Guo, C. M. Zeller, N. V. Reo, R. M. Siervogel, *Total body water data for white adults 18 to 64 years of age: The Fels Longitudinal Study*, Kidney Int., **56**(1), 244–252 (1999). DOI: 10.1046/j.1523-1755.1999.00532.x.
- [47] K. L. Chen, Y. W. Yeh, J. M. Chen, Y. J. Hong, T. L. Huang, Z. Y. Deng, C. H. Wu, S. H. Liao, L. M. Wang, *Influence of magnetoplasmonic γ - Fe_2O_3 /Au core/shell nanoparticles on low-field nuclear magnetic resonance*, Sci. Rep., **6**, 35477 (2016). DOI: 10.1038/srep35477.
- [48] L. Josephson, J. Lewis, P. Jacobs, P. F. Hahn and D. D. Stark, *The effects of iron oxides on proton relaxivity*, Magn. Reson. Imag., **6**(6), 647–653 (1988). DOI: 10.1016/0730-725X(88)90088-4.
- [49] R. H. Doremus, *Optical Properties of Small Gold Particles*, J. Chem. Phys., **40**(8), 2389–2396 (1964). DOI: 10.1063/1.1725519.
- [50] S. J. Oldenburg, R. D. Averitt, S. L. Westcott, N. J. Halas, *Nanoengineering of optical resonances*, Chem. Phys. Lett., **288**(2–4), 243–247 (1998). DOI: 10.1016/S0009-2614(98)00277-2.
- [51] R. D. Averitt, S. L. Westcott, and N. J. Halas, *Linear optical properties of gold nanoshells*, J. Opt. Soc. Am. B, **16**(10), 1824–1832 (1999). DOI: 10.1364/JOSAB.16.001824.
- [52] J. K. Lim, R. D. Tilton, A. Eggeman, S. A. Majetich, *Design and synthesis of plasmonic magnetic nanoparticles*, J. Magn. Magn. Mater., **311**(1), 78–83 (2007). DOI: 10.1016/j.jmmm.2006.10.1169.
- [53] A. S. Thakor, R. Luong, R. Paulmurugan, F. I. Lin, P. Kempen, C. Zavaleta, P. Chu, T. F. Massoud, R. Sinclair, S. S. Gambhir, *The Fate and Toxicity of Raman-Active Silica-Gold Nanoparticles in Mice*, Sci. Transl. Med., **3**(79), 79ra33 (2011). DOI: 10.1126/scitranslmed.3001963.
- [54] B. D. Chithrani, A. A. Ghazani and C. W. Chan, *Determining the Size and Shape Dependence of Gold Nanoparticle Uptake into Mammalian Cells*, Nano Lett., **6**(4), 662–668 (2006). DOI: 10.1021/nl052396o.
- [55] S. Lal, S. Link and N. J. Halas, *Nano-optics from sensing to waveguiding*, Nat. Photon., **1**(11), 641–648 (2007). DOI: 10.1038/nphoton.2007.223.
- [56] V. I. Shubayev, T. R. Pisanic, S. Jin, *Magnetic nanoparticles for theragnostics*, Adv. Drug Deliv. Rev., **61**(6), 467–477 (2009). DOI: 10.1016/j.addr.2009.03.007.
- [57] A. Toro-Cordova, M. Flores-Cruz, J. Santoyo-Salazar, E. Carrillo-Nava, R. Jurado, P. A. Figueroa-Rodriguez, P. Lopez-Sanchez, L. A. Medina, P. Garcia-Lopez, *Liposomes Loaded with Cisplatin and Magnetic Nanoparticles: Physicochemical Characterization, Pharmacokinetics, and In-Vitro Efficacy*, Molecules, **23**(9), 2272 (2018). DOI: 10.3390/molecules23092272.
- [58] R. H. Kodama, *Magnetic nanoparticles*, J. Magn. Magn. Mater., **200**(1–3), 359–372 (1999). DOI: 10.1016/S0304-8853(99)00347-9.
- [59] C. Noguez, *Surface Plasmons on Metal Nanoparticles: The Influence of Shape and Physical Environment*, J. Phys. Chem. C, **111**(10), 3806–3819 (2007). DOI: 10.1021/jp066539m.

-
- [60] C. S. Levin, C. Hofmann, T. A. Ali, A. T. Kelly, E. Morosan, P. Nordlander, K. H. Whitmire and N. J. Halas, *Magnetic-Plasmonic Core-Shell Nanoparticles*, ACS Nano, **3**(6), 1379–1388 (2009). DOI: 10.1021/mn900118a.
- [61] E. A. Kwizera, E. Chaffin, Y. Wang and X. Huang, *Synthesis and properties of magnetic-optical core-shell nanoparticles*, RSC Adv., **7**(28), 17137–17153 (2017). DOI: 10.1039/C7RA01224A.
- [62] E. A. Chaffin, S. Bhana, R. T. O’Connor, X. Huang, Y. Wang, *Impact of Core Dielectric Properties on the Localized Surface Plasmonic Spectra of Gold-Coated Magnetic Core-Shell Nanoparticles*, J. Phys. Chem. B, **118**(49), 14076–14084 (2014). DOI: 10.1021/jp505202k.
- [63] D. W. Brandl, P. Nordlander, *Plasmon modes of curvilinear metallic core/shell particles*, J. Chem. Phys., **126**(14), 144708 (2007). DOI: 10.1063/1.2717167.
- [64] H. Wang, D. W. Brandl, F. Le, P. Nordlander, and N. J. Halas, *Nanorice: a hybrid plasmonic nanostructure*, Nano Lett., **6**(4), 827–832 (2006). DOI: 10.1021/nl060209w.
- [65] G. Armelles, A. Cebollada, A. García-Martín, M. U. González, *Magnetoplasmonics: Combining Magnetic and Plasmonic Functionalities*, Adv. Opt. Mater., **1**(1), 10–35 (2013). DOI: 10.1002/adom.201200011.
- [66] A. F. Rebolledo, O. Bomati-Miguel, J. F. Marco and P. Tartaj, *A Facile Synthetic Route for the Preparation of Superparamagnetic Iron Oxide Nanorods and Nanorices with Tunable Surface Functionality*, Adv. Mater., **20**(9), 1760–1765 (2008). DOI: 10.1002/adma.200701782.
- [67] P. B. Johnson and R. W. Christy, *Optical Constants of the Noble Metals*, Phys. Rev. B, **6**(12), 4370–4379 (1972). DOI: 10.1103/PhysRevB.6.4370.
- [68] N. P. Ryde, E. Matijević, *Color Effects of Uniform Colloidal Particles of Different Morphologies Packed Into Films*, Appl. Opt., **33**(31), 7275–7281 (1994). DOI: 10.1364/AO.33.007275.
- [69] V. Goossens, J. Wielant, S. Van Gils, R. Finsy, H. Terryn, *Optical Properties of Thin Iron Oxide Films on Steel*, Surf. Interface Anal., **38**(4), 489–493 (2006). DOI: 10.1002/sia.2219.
- [70] P. B. Johnson and R. W. Christy, *Optical constants of transition metals: Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, and Pd*, Phys. Rev. B, **9**(12), 5056–5070 (1974). DOI: 10.1103/PhysRevB.9.5056.
- [71] M. Spivak, *Calculus*, Third Edition, Cambridge University Press, Cambridge, UK (1994).
- [72] A. Reyes Coronado, *Respuesta electromagnética efectiva no local de sistemas coloidales turbios: teoría y experimento*, Tesis doctoral, Universidad Nacional Autónoma de México, Distrito Federal, México (2007).
- [73] G. B. Arfken, H. J. Weber and F. E. Harris, *Mathematical Methods for Physicists: A Comprehensive Guide*, Seventh Edition, Academic Press, Oxford, UK (2013).
- [74] D. J. Griffiths, *Introduction to Electrodynamics*, Fourth Edition, Pearson Education, Illinois, EEUU (2012).
- [75] J. A. Stratton, *Electromagnetic Theory*, McGraw-Hill, New York, EEUU (1941).
- [76] J. S. Bell, M. J. Kearsley, L. P. Pitaevskii, L. D. Landau, E. M. Lifshitz, J. B. Sykes, *Course of Theoretical Physics: Electrodynamics of Continuous Media*, Volume 8, Second Edition, Pergamon Press, Oxford, England (1984).
- [77] R. C. James, *Mathematics Dictionary*, Chapman & Hall, New York, EEUU (1992).
- [78] W. Hauser, *Introduction to the principles of mechanics*, Addison-Wesley, Massachusetts, EEUU (1966).
- [79] D. S. Jones, *The Theory of Electromagnetism*, Pergamon Press, Oxford, England (1964).
- [80] O. D. Kellogg, *Foundations of Potential Theory*, Springer, Massachusetts, EEUU (1954).
- [81] W. E. Byerly, *An Elementary Treatise on Fourier’s Series, and Spherical, Cylindrical, and Ellipsoidal Harmonics, with Applications to Problems in Mathematical Physics*, Dover Publications, New York, EEUU (1893).

- [82] I. S. Sokolnikoff, R. M. Redheffer, *Mathematics of Physics and Modern Engineering*, McGraw–Hill, New York, EEUU (1958).
- [83] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, Dover Publications, Inc., New York, EEUU (1974).
- [84] F. J. García de Abajo and A. Howie, *Retarded field calculation of electron energy loss in inhomogeneous dielectrics*, Phys. Rev. B, **65**(17), 1.15418 (2002). DOI: 10.1103/PhysRevB.65.115418.
- [85] A. Sutradhar, G. H. Paulino and L. J. Gray, *Symmetric Galerkin Boundary Element Method*, Springer Berlin Heidelberg, (2008). DOI: 10.1007/978-3-540-68772-6.
- [86] J. Jackson, *Classical electrodynamics*, Second Edition, Wiley, New York, EEUU (1975).
- [87] A. Trügler, *Optical Properties of Metallic Nanoparticles: Basic Principles and Simulations*, Springer International Publishing, (2016). DOI: 10.1007/978-3-319-25074-8.
- [88] U. Hohenester, J. Krenn, *Surface plasmon resonances of single and coupled metallic nanoparticles: a boundary integral method approach*, Phys. Rev. B, **72**(19), 195429 (2005). DOI: 10.1103/PhysRevB.72.195429.
- [89] E. Prodan, C. Radloff, N. J. Halas and P. Nordlander, *A hybridization model for the plasmon resonance of complex nanostructures*, Science, **302**(5644), 419–422 (2003). DOI: 10.1126/science.1089171.
- [90] E. Prodan and P. Nordlander, *Plasmon Hybridization in Spherical Nanoparticles*, J. Chem. Phys., **120**(11), 5444–5454 (2004). DOI: 10.1063/1.1647518.
- [91] P. Nordlander, C. Oubre, E. Prodan, K. Li and M. Stockman, *Plasmon hybridization in nanoparticle dimers*, Nano Lett., **4**(5), 899–903 (2004). DOI: 10.1021/nl049681c.
- [92] B. J. Wiley, Y. Chen, J. M. McLellan, Y. Xiong, Z. Y. Li, D. Ginger, Y. Xia, *Synthesis and Optical Properties of Silver Nanobars and Nanorice*, Nano Lett., **7**(4), 1032–1036 (2007). DOI: 10.1021/nl070214f.
- [93] L. Chen, H. Wei, K. Q. Chen and H. X. Xu, *High-order plasmon resonances in an Ag/Al₂O₃ core/shell nanorice*, Chin. Phys. B, **23**(2), 027303 (2014). DOI: 10.1088/1674-1056/23/2/027303.
- [94] B. B. Wang, J. Zhou, H. P. Zhang and J. P. Chen, *Fano-like resonance characteristics of asymmetric Fe₂O₃@Au core/shell nanorice dimer*, Chin. Phys. B, **23**(8), 087303 (2014). DOI: 10.1088/1674-1056/23/8/087303.
- [95] B. T. Draine and P. J. Flatau, *Discrete-Dipole Approximation For Scattering Calculations*, J. Opt. Soc. Am. A, **11**(4), 1491–1499 (1994). DOI: 10.1364/JOSAA.11.001491.
- [96] Z. Cai, E. S. P. Leong, Z. Wang, W. Niu, W. Zhang, S. Ravaine, N. L. Yakovlev, Y. J. Liu, J. Teng, X. Lu, *Sandwich-structured Fe₂O₃@SiO₂@Au nanoparticles with magnetoplasmonic responses*, J. Mater. Chem. C, **3**(44), 11645–11652 (2015). DOI: 10.1039/C5TC01259G.
- [97] J. W. Liaw, Y. S. Chen, and M. K. Kuo, *Maxwell stress induced optical torque upon gold prolate nanospheroid*, Appl. Phys. A, **122**(3), 182 (2016). DOI: 10.1007/s00339-016-9732-4.
- [98] J. W. Liaw, W. J. Lo, W. C. Lin, M. K. Kuo, *Theoretical study of optical torques for aligning Ag nanorods and nanowires*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, **162**, 133–142 (2015). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2015.03.030.