

# SINTONIZACIÓN DE RESONANCIAS ELECTROMAGNÉTICAS EN NANO CILINDROS RECUBIERTOS: UN ESTUDIO PARAMÉTRICO

## TUNING OF ELECTROMAGNETIC RESONANCES IN COATED NANOCYLINDERS: A PARAMETRICAL STUDY

R.M. ABRAHAM EKEROTH, M.F. LESTER

CONICET, Rivadavia 1917, Buenos Aires, Argentina  
Instituto de Física Arroyo Seco (IFAS) - Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires  
Pinto 399 - (7000) Tandil - Buenos Aires - Argentina  
e-mail: mabraham@exa.unicen.edu.ar

En este trabajo se presenta un estudio de la dispersión de ondas electromagnéticas (OEM) en partículas recubiertas utilizando un formalismo riguroso basado en el Teorema de Extinción para una geometría 2D. Mediante este método integral se obtienen resultados para el *scattering* de OEM en sistemas formados por dos cilindros, de sección circular y coaxiales, para los dos modos fundamentales de polarización: modo *s* y modo *p*. Las partículas están formadas por materiales lineales, isotrópicos y homogéneos, con la posibilidad de tener propiedades magnéticas en todo del rango electromagnético clásico.

En particular, para nanopartículas se presentan resultados de secciones eficaces ópticas en función de la longitud de onda incidente. Se realiza una caracterización de resonancias de modos propios (plasmones para partículas metálicas).

Palabras Claves: Nanopartículas Recubiertas, Plasmónica, Secciones Ópticas, Método Integral

In this paper a study on electromagnetic scattering of coated particles is showed and a rigorous formalism based on the Extinction Theorem, for a 2D geometry, is implemented. Through this integral Method results for the electromagnetic scattering of systems, which consist in two coaxial circular shaped cylinders are performed for two fundamental modes of polarization: *s* and *p* mode. The particles are filled with homogeneous linear and isotropic media, these being able to have magnetic properties in the whole classic electromagnetic range.

Particularly in nanoparticles, results of optical cross sections vs. wavelength of the illumination are showed. A characterization of eigenmodes (plasmons when the particles have metal) is performed.

Key Word: Coated Nanoparticles, Plasmonics, Optical Cross Sections, Integral Method

### I. INTRODUCCIÓN

En los últimos años y debido a los avances tecnológicos en la fabricación de nanosistemas con detalles controlados, se ha destinado un gran esfuerzo en comprender las propiedades ópticas de las nanopartículas recubiertas. El potencial que ofrecen estos sistemas debido a la posibilidad de sintonización de modos propios, las hace particularmente atractivas con respecto a las nanopartículas simples o aisladas. Actualmente el interés de este tipo de partículas se centra en la detección, aniquilación de tumores y biotecnología [1-2], guiado de ondas [3], lentes de campo cercano [4], absorción de energía solar [5,6] y nanoantenas [7].

Recientemente se han iniciado una serie de estudios destinados a comprender los procesos físicos involucrados en las excitaciones de modos propios en estas nanoestructuras sencillas [8,9]. Pero muchos de

ellos se realizan dentro del límite electrostático, donde los fenómenos de retardo no son considerados.

En este trabajo se presenta un formalismo integral riguroso, basado en el teorema de Green y el de Extinción [10,11], para tratar la dispersión de ondas electromagnéticas por sistemas recubiertos de sección circular, coaxiales y con simetría traslacional (partículas 2D). El método, utilizado por ejemplo en los trabajos [12,13], se ha generalizado para contemplar propiedades magnéticas en todo el rango electromagnético clásico y calcular los campos en cualquier punto del espacio. En particular aquí se utiliza para calcular magnitudes observables, como las secciones eficaces ópticas (extinción, *scattering* y absorción), con el fin de caracterizar estas estructuras mediante el campo lejano a partir de la excitación de sus modos propios.

La organización de este *paper* es la siguiente: en la sección II se definen las condiciones del problema de dispersión propuesto. En la sección III se describe

brevemente el método integral utilizado. También en esta sección se definen las secciones eficaces sobre las que se basan los estudios. En la sección IV se muestran cálculos de secciones eficaces en función de la longitud de onda incidente para diferentes sistemas cuando se irradian con ondas planas. Finalmente, en la sección V, se hacen comentarios finales y conclusiones.

## II. DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA

En la figura 1 se muestra la configuración del sistema: dos cilindros coaxiales de sección circular con contornos respectivos  $C_1$  y  $C_2$ , separan tres medios lineales, isótropos y homogéneos 0, 1 y 2. Las normales a dichos contornos, *i.e.*  $\mathbf{n}_1$  y  $\mathbf{n}_2$ , apuntan hacia el interior de la región anular entre los mismos.  $S_0$  es el espacio que contiene a la onda incidente y dispersada,  $S_1$  (acotada por  $C_1$  y  $C_2$ ) corresponde al área de la región anular o cubierta y el núcleo lo conforma el área  $S_2$ . El medio 0 está caracterizado por sus parámetros electromagnéticos constitutivos constantes  $\epsilon_0$  y  $\mu_0$ , mientras que el medio  $i$  lo está por  $\epsilon_i = \epsilon_i(\omega)$  y  $\mu_i = \mu_i(\omega)$ , con  $i = 1, 2$  respectivamente, siendo éstas últimas funciones complejas dependientes de la frecuencia  $\omega$ .

Una onda electromagnética plana incide sobre la estructura, cuyo vector de onda  $\mathbf{k}_0 = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\epsilon_0 \mu_0} = \frac{\omega}{c}$  se encuentra contenido en el plano  $(x, y)$  y forma un ángulo  $\theta_0$  con el eje de las  $y$ , de la manera que indica la figura 1. Por lo tanto, se llamará modo  $s$  cuando el campo eléctrico se encuentre paralelo al eje  $z$  o modo  $p$  cuando el campo magnético se encuentre paralelo al eje  $z$ . De esta forma el problema vectorial se transforma en un problema escalar, sin pérdida de generalidad. Todos los campos dispersados, debido a la geometría axial, mantienen la polarización de la onda incidente.

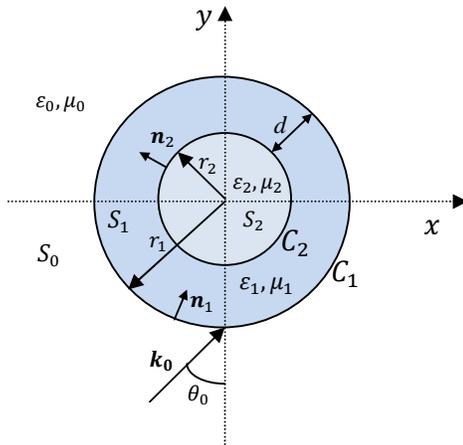


Figura 1: Planteo del problema de simetría axial para un obstáculo compuesto por dos cilindros coaxiales circulares

## III. SOLUCIÓN AL PROBLEMA DE SCATTERING. MÉTODO INTEGRAL

En esta sección se describe brevemente el método integral utilizado para encontrar el campo dispersado en todo punto del espacio. El método es bien conocido en la literatura y ha sido empleado para resolver problemas con múltiples cuerpos [12-14]. Para el desarrollo del mismo se supone una incidencia con ondas planas que es descrita a continuación.

### Campo incidente

Suponiendo una dependencia temporal armónica, la onda incidente está descrita por las funciones complejas

$$\mathbf{E}^{inc}(\mathbf{r}, t) = (0, 0, \psi_s^{inc}(\mathbf{r}))e^{-j\omega t}, \quad (1)$$

$$\mathbf{H}^{inc}(\mathbf{r}, t) = (0, 0, \psi_p^{inc}(\mathbf{r}))e^{-j\omega t}, \quad (2)$$

para el modo  $s$  y  $p$  respectivamente donde

$$\psi_\alpha^{inc}(\mathbf{r}) = e^{jk_0(xs\sin\theta_0 + y\cos\theta_0)}, \quad (3)$$

donde  $\alpha$  puede ser  $s$  o  $p$ . El valor  $k_0$  corresponde al módulo del vector representado en la figura 1. En la misma también se describen el sistema coordenado utilizado.  $j$  corresponde a la unidad imaginaria.

### Ecuaciones de los campos

Resolviendo la ecuación de Helmholtz en cada medio y aplicando el teorema de Green en cada caso, los campos electromagnéticos quedan representados en la forma [15]:

$$\psi_\alpha^{(0)}(\mathbf{r}) = \psi_\alpha^{inc}(\mathbf{r}) - \frac{1}{4\pi} \int_{C_1} \left[ \frac{\partial G^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial \mathbf{n}'} \psi_\alpha^{(0)}(\mathbf{r}') - G^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \psi_\alpha^{(0)}(\mathbf{r}')}{\partial \mathbf{n}'} \right] dl'; \quad \mathbf{r} \in S_0, \quad (4)$$

$$\psi_\alpha^{(1)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_{C_1} \left[ \frac{\partial G^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial \mathbf{n}'} \psi_\alpha^{(1)}(\mathbf{r}') - G^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \psi_\alpha^{(1)}(\mathbf{r}')}{\partial \mathbf{n}'} \right] dl'_1 + \frac{1}{4\pi} \int_{C_2} \left[ \frac{\partial G^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial \mathbf{n}'} \psi_\alpha^{(1)}(\mathbf{r}') - G^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \psi_\alpha^{(1)}(\mathbf{r}')}{\partial \mathbf{n}'} \right] dl'_2; \quad \mathbf{r} \in S_1, \quad (5)$$

$$\psi_\alpha^{(2)}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int_{C_2} \left[ \frac{\partial G^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial \mathbf{n}'} \psi_\alpha^{(2)}(\mathbf{r}') - G^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \psi_\alpha^{(2)}(\mathbf{r}')}{\partial \mathbf{n}'} \right] dl'_2; \quad \mathbf{r} \in S_2. \quad (6)$$

Donde las funciones de Green para el caso 2D de simetría axial son las siguientes

$$G^{(i)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = j\pi H_0^{(1)}(k_0 \sqrt{\epsilon_i \mu_i} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \quad i = 0, 1, 2 \quad (7)$$

Aquí  $H_0^{(1)}(\cdot)$  representa la función de Hankel de primera clase y orden cero y  $\psi_\alpha^{(i)}$ , con  $i = 0, 1, 2$  representa la amplitud compleja para el campo en el respectivo medio  $i$ . Los campos además de cumplir con las ecuaciones (4-6) deben satisfacer las condiciones de contorno en cada interface, *i.e.*  $C_1$  y  $C_2$ , para cada modo de polarización

$$\psi_\alpha^{(0)}(\mathbf{r})|_{r \in C_1^{(+)}} = \psi_\alpha^{(1)}(\mathbf{r})|_{r \in C_1^{(-)}}, \quad (8)$$

$$\frac{\partial \psi_\alpha^{(0)}(\mathbf{r})}{\partial n'}|_{r \in C_1^{(+)}} = (\eta_{10})_\alpha \frac{\partial \psi_\alpha^{(1)}(\mathbf{r})}{\partial n'}|_{r \in C_1^{(-)}}, \quad (9)$$

$$\psi_\alpha^{(2)}(\mathbf{r})|_{r \in C_2^{(-)}} = \psi_\alpha^{(1)}(\mathbf{r})|_{r \in C_2^{(+)}}}, \quad (10)$$

$$y \frac{\partial \psi_\alpha^{(2)}(\mathbf{r})}{\partial n'}|_{r \in C_2^{(-)}} = (\eta_{12})_\alpha \frac{\partial \psi_\alpha^{(1)}(\mathbf{r})}{\partial n'}|_{r \in C_2^{(+)}}}, \quad (11)$$

donde

$$(\eta_{10})_\alpha = \begin{cases} \frac{\mu_0}{\mu_1}, \alpha = s \\ \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_1}, \alpha = p \end{cases}, y (\eta_{12})_\alpha = \begin{cases} \frac{\mu_2}{\mu_1}, \alpha = s \\ \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}, \alpha = p \end{cases}. \quad (12)$$

Aplicando el teorema de extinción [10] sobre las ecuaciones (4-6) y aplicando las relaciones entre los campos (8-11) se llega a un sistema de cuatro ecuaciones integrales (*EI*) con cuatro incógnitas que resuelven completamente el problema de scattering planteado.

Para resolver el sistema de *EI* acopladas (4-6), se realizó una discretización en código *Fortran*, obteniendo un sistema de ecuaciones lineales el cual se resuelve numéricamente. El problema no es trivial y hay que hacer una análisis cuidadoso de las singularidades que poseen las funciones de Hankel de los núcleos sobre los contornos de las *EI*. En todos los ejemplos presentados en este *paper* se ha comprobado la convergencia numérica de tal sistema tomando como aceptable un error relativo igual a menor al 0.005% entre dos parametrizaciones consecutivas [15].

### Campos lejanos y secciones eficaces

Para calcular los campos en la zona lejana se utilizan las expresiones asintóticas de las funciones de Hankel cuando  $k_0|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \gg 1$ . De esta forma, el campo lejano dispersado  $\psi_\alpha^{scat}(\mathbf{r}) = \psi_\alpha^{(0)}(\mathbf{r}) - \psi_\alpha^{inc}(\mathbf{r})$  puede escribirse de la siguiente forma separable [23]

$$\psi_\alpha^{scat}(r, \theta) = T_\alpha(\theta) \sqrt{\frac{2}{\pi k_0 r}} e^{-jk_0 r + j\frac{\pi}{4}} \quad (17)$$

Donde la función amplitud  $T_\alpha(\theta)$ , da cuenta para los dos modos fundamentales de polarización de la dependencia angular del campo dispersado y viene dada por [24-25]:

$$T_\alpha(\theta) = \frac{j}{4} \int_{C_1^+} \left[ jk_0 \mathbf{n}' \cdot \mathbf{n}_{far} \psi_\alpha^{(1)}(\mathbf{r}') - (\eta_{10})_\alpha \frac{\partial \psi_\alpha^{(1)}(\mathbf{r}')}{\partial n'} \right] e^{-jk_0 r'} dl'_1, \quad (18)$$

y donde se ha definido el límite  $\frac{(r-r')}{|r-r'|} \Big|_{r \rightarrow \infty} \sim \mathbf{n}_{far}$ .

De esta forma, es posible definir la sección eficaz de extinción  $Q_{ext\alpha}$  para cilindros infinitamente largos de sección arbitraria [13]

$$Q_{ext\alpha} = \frac{2}{r_1 k_0} Re[T_\alpha(\theta = \theta_0 + \pi)], \quad (19)$$

Donde  $Re[\cdot]$  implica tomar la parte real de la función y  $T_\alpha$  se evalúa en  $\theta = \theta_0 + \pi$ , *i.e.* la dirección *forward*. La sección eficaz de *scattering* se define como

$$Q_{sca\alpha} = \frac{1}{\pi r_1 k_0} \int_0^{2\pi} |T_\alpha(\theta)|^2 d\theta, \quad (20)$$

y utilizando el teorema óptico [16], se deduce la sección eficaz de absorción, que se puede despejar de

$$Q_{sca\alpha} + Q_{abs\alpha} = Q_{ext\alpha}. \quad (21)$$

## IV. RESULTADOS NUMÉRICOS

En esta sección se dan algunos ejemplos numéricos separando el estudio en dos grupos de partículas, las mayores a 10 nm de radio (subsección -a-), donde las aproximaciones dipolares no retardadas no son aplicables y las menores a 10 nm de radio (subsección -b-) para las cuales es posible encontrar en la literatura soluciones analíticas para estos sistemas en algunas situaciones sencillas [9].

Se utilizan los coeficientes relativos  $\varepsilon_{ir} = \frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_0}$ ,  $\mu_{ir} = \frac{\mu_i}{\mu_0}$  sobre cada medio  $i$ . Todos los medios se han considerado no permeables, *i.e.*  $\mu_{ir} = 1$ . Los casos corresponden a la polarización  $p$ , donde es posible la excitación de modos propios. La función dieléctrica compleja de los metales es obtenida de [13], donde se realizan correcciones de la misma en base al tamaño de las partículas.

En la sección -b- se utilizan indistintamente  $Q_{ext}$  y  $Q_{abs}$ , ya que para esta clase de partículas la sección eficaz de *scattering* (ec. 20) es aproximadamente nula.

### a- Partículas mayores a 10 nm

En la figura 2 se muestra un sistema formado por una partícula dieléctrica, de constante  $\varepsilon_2 = 2.25$  que va ocupando el volumen correspondiente a una partícula de oro de radio constante  $r_1 = 100$  nm. Inicialmente se tiene una partícula sólida de oro de radio 100 nm (curva con círculos). Sucesivamente una “subpartícula” dieléctrica va aumentando su radio dentro de la otra y el metal forma una cubierta metálica de espesor decreciente.

Se puede observar una evolución de picos conforme el núcleo dieléctrico crece y el espesor del recubrimiento de oro disminuye (recordar que el radio externo es constante). Esta evolución de picos aislados es un

indicador de excitaciones simples causada posiblemente, por la múltiple interacción EM de la capa metálica con la cavidad generada en el núcleo dieléctrico.

A diferencia de lo que sucede para una partícula sin recubrimiento, los múltiples picos obtenidos en la figura 2 pueden ser sintonizados en un rango amplio de longitudes de onda. Estos sistemas muestran significativas absorciones en el infrarrojo (IR), lo que los hace muy apropiado para aplicarlo en la detección de células específicas [1,3].

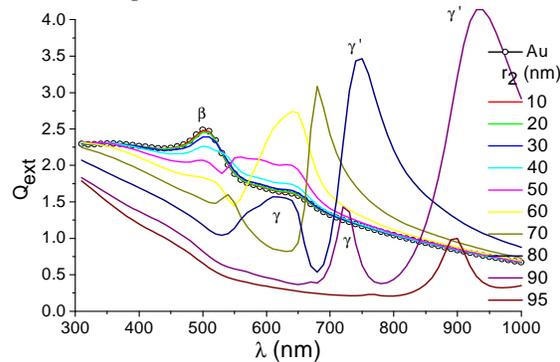


Figura 2: Evolución del coeficiente  $Q_{ext}$  para una partícula dieléctrica con  $\epsilon_2 = 2.25$  de radio creciente recubierta por una capa de oro de radio  $r_1 = 100$  nm fijo. Los parámetros en la figura corresponden al radio de la partícula dieléctrica. La curva con símbolos corresponde a una partícula sólida de oro.

Siguiendo con este esquema, las figuras 3 y 4 muestran curvas de extinción para un sistema similar al de la figura 2 pero el espesor de la cubierta va aumentando en proporción al radio externo: una partícula con núcleo dieléctrico de  $\epsilon_2 = 2.25$  de 60 nm de radio es cubierta con plata de radio  $r_1$  variable. La figura 3 corresponde a un sistema inmerso en aire y la figura 4 al mismo sistema inmerso en agua.

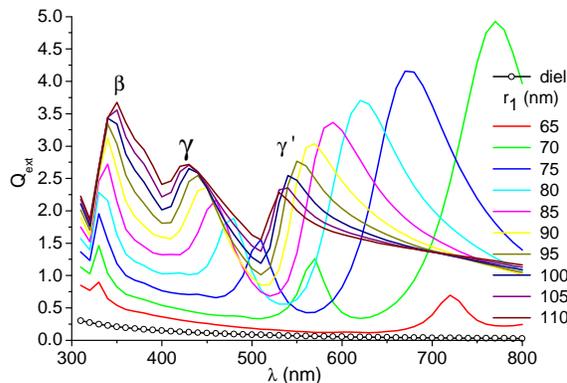


Figura 3: Coeficiente de extinción en función de la longitud de onda para cilindro de "vidrio" recubierto con plata, embebido en un medio exterior de aire. Las líneas de colores indican distintos radios de cubierta. Los parámetros son:  $\epsilon_{ext} = 1$ ,  $\epsilon_2 = 2.25$ ,  $r_2 = 60$  nm (fijo). La curva con símbolos corresponde a una partícula sólida de dieléctrico.

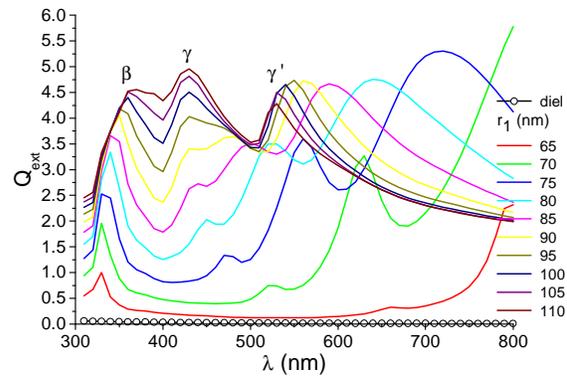


Figura 4: Idem figura 3, pero los cálculos aquí simulan la partícula inmersa en agua y no en aire. Las curvas de colores indican distintos radios de la cubierta de plata. Los parámetros de cálculo son:  $\epsilon_{ext} = 1.7769$ ,  $\epsilon_2 = 2.25$ ,  $r_2 = 60$  nm (fijo).

La principal diferencia entre las figuras 3 y 4 radica en que, en el sistema inmerso en agua, todo el espectro sufre un corrimiento hacia el rojo y la estructura de picos se encuentra notablemente ensanchada. Entre otras cosas esto muestra la sensibilidad marcada de las resonancias elementales con el medio que rodea al metal [15]. En este caso el corrimiento hacia el IR es mayor como así también la estructura de cada curva.

El comportamiento de  $Q_{ext}$  para todos los casos de cubierta metálica es cualitativamente similar, pero con algunas salvedades: conforme la cobertura crece en torno a la partícula dieléctrica comienzan a manifestarse picos de resonancia característicos. Se obtiene un sistema de múltiples picos sintonizables, llegando al IR cercano del espectro. La posición de los picos parece converger a una longitud de onda que está gobernada por la relación de radios de la partícula, pero fundamentalmente por el radio externo.

Si la capa metálica en la partícula aumenta de espesor pero con un radio externo constante, el sistema muestra una clara convergencia hacia las resonancias de plasmón superficial de partícula aislada o de interfaz plana metal-dieléctrico [9,17]. Pero si la capa aumenta con el radio externo, la tendencia de los picos es a aglomerarse alrededor de alguna longitud de onda que varía en forma exponencial. En la figura 5 se han graficado los puntos de las tres resonancias o superposiciones más intensas de las curvas de la figura 3, comenzando desde la izquierda hacia la derecha ( $\beta, \gamma, \gamma'$ ). También se ha señalado mediante la medida  $\Delta$ , como eventualmente los dos últimos picos  $\gamma, \gamma'$  tienden a converger, junto con la primer contribución  $\beta$ . Las contribuciones  $\gamma, \gamma'$  se caracterizan por tener un corrimiento hacia el azul, cuando aumenta el espesor del recubrimiento. Por el contrario, las contribuciones  $\beta$  se corren hacia el rojo.

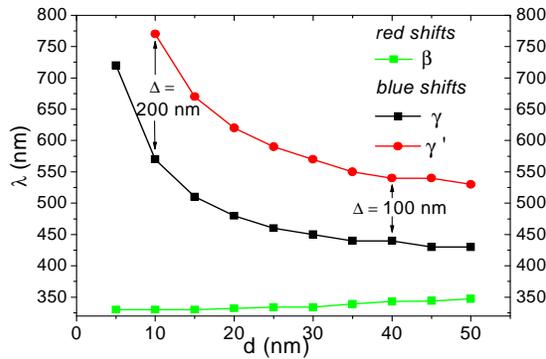


Figura 5: Convergencia exponencial cuando  $r_1$  es variable de los tres picos principales de la figura 3. Los parámetros son:  $\epsilon_{ext} = 1$ ,  $\epsilon_2 = 2.25$ ,  $r_2 = 60$  nm (fijo). Se ha señalado con la longitud  $\Delta$  la tendencia a converger de las dos resonancias que se corren al azul. La escala a derecha coincide con la escala a izquierda.

Se hicieron pruebas para los casos de partículas de núcleo metálico y cubierta dieléctrica. Las secciones  $Q_{ext}$ ,  $Q_{sca}$  y  $Q_{abs}$  ya tienen espectros complejos, pero las interacciones metal-dieléctrico dan en total una estructura menos enriquecida en resonancias de plasmón superficial [15]. De esta manera y buscando controlar las sintonizaciones en un amplio rango de longitudes de onda, se dejaron de lado este tipo de sistemas [3].

### b- Partículas menores a 10 nm: Nanotubos metálicos.

Para estudiar los orígenes de las resonancias involucradas en estos sistemas se abordó el estudio de nanotubos con tamaños característicos por debajo de los 10 nm. Estos tamaños límite son más comunes de encontrar en la bibliografía. Se incorporan con el fin de comparar con resultados analíticos y resonancias fundamentales, más simples de analizar. Ya se ha mostrado la dependencia de tales resonancias con los parámetros constitutivos. Luego para simplificar los resultados se ha elegido al nanotubo como partícula representativa de esta subsección. Como material plasmónico se eligió a la plata ya que posee picos menos ensanchados y mejor resueltos que el caso del oro, si bien éste último es más utilizado en aplicaciones biomédicas [1-3].

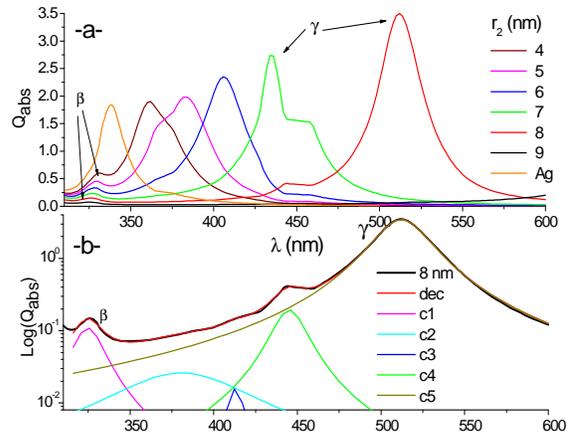


Figura 6: -a- Coeficiente de absorción vs. longitud de onda, para un nanotubo de Ag para diferentes espesores de las paredes y cilindro macizo (curva naranja); -b- Detalle de la deconvolución para  $r_2 = 8$  nm en escala logarítmica.

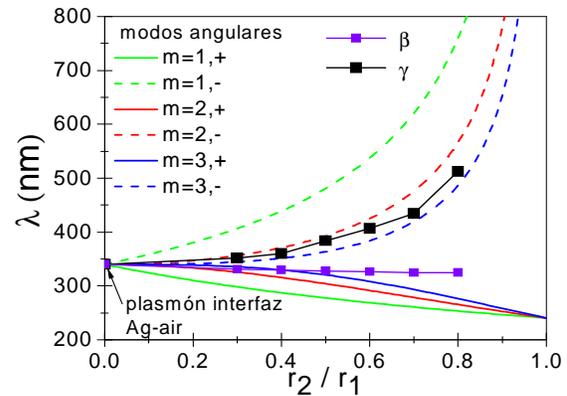


Figura 7: Curvas de dispersión para nanotubos metálicos, como función de la relación entre los radios de los cilindros. Las curvas de colores indican las relaciones de dispersión plasmónicas expuestas en [9], según los momentos angulares  $m$  para el problema homogéneo. Los símbolos en violeta y negro corresponden a las componentes de deconvolución que se pueden destacar de la fig 6 -a-.

En la figura 6-a- se muestra el coeficiente de absorción en función de la longitud de onda incidente para un nanotubo de plata con  $r_1 = 10$  nm y radio interno  $r_2$  variable. Cada una de estas curvas se encuentra en general formada por tres o más picos que parecen ser a su vez contribuciones de una o varias excitaciones (como se observó en la subsección -a-; figuras 2,3 y 4). Las curvas han sido deconvolucionadas suponiendo un pico lorentziano [18] para cada componente de las contribuciones de absorción, según el método de Levenberg-Marquardt [19]. En la figura 6-b- se muestra en escala logarítmica la curva  $Q_{abs}$  correspondiente al caso de  $r_2 = 8$  nm de la figura 6-a- (curva roja), junto con el resultado de su deconvolución ajustada en cinco picos, a modo de ejemplo.

Del análisis de deconvolución se han seguido solo dos picos que dan lugar a las dos curvas en símbolos mostradas en la figura 7. Estos son dos picos distintivos (resonancias) para las curvas mostradas en este ejemplo. La curva con símbolos violetas corresponde al corrimiento de la contribución  $\beta$  y la

curva con símbolos negros corresponde a la contribución  $\gamma$  (algunas de ellas señaladas en la figura 6). Además se ha incluido el punto de la resonancia del plasmón superficial para un cilindro macizo de plata, en  $r_2/r_1 = 0$ . Se puede observar una tendencia de las curvas a converger hacia la resonancia correspondiente a este valor, conforme  $r_2/r_1$  tiende a cero.

Bajo la aproximación electrostática, Moradi [9] resuelve el problema homogéneo para un nanotubo, modelando la constante dieléctrica con la aproximación del modelo de Drude y sin pérdidas. Con este modelo se encuentra una serie de curvas de dispersión para los modos propios soportados por nanotubos metálicos en función de "momentos angulares  $m$ " del sistema, los cuales se encuentran en dos ramas (+, -) y cuantizados. En base a este modelo en la figura 7 se han incluido tales curvas resultantes del cálculo de problema homogéneo para esta estructura [9]. Las curvas obtenidas aquí parecen tener una ley similar de comportamiento, difiriendo más para las excitaciones bajas  $\beta$ . Esto se atribuye principalmente a las diferencias en la función dieléctrica compleja que se tomó para este trabajo [13] y a la posibilidad de contemplar campos retardados en el problema inhomogéneo sin ninguna aproximación al respecto. No obstante, las curvas de dispersión provistas por el método presentado pueden arrojar luz sobre los mecanismos físicos involucrados en estas excitaciones complejas y caracterizar al sistema mediante picos de absorción característicos, observables en el campo lejano.

## VI. CONCLUSIONES

Se ha desarrollado y sometido a prueba un método integral basado en el teorema de Extinción, el cual predice correctamente la ubicación y comportamiento de resonancias en nanopartículas recubiertas [15]. La herramienta permite realizar una caracterización de los sistemas de partículas recubiertas y de los procesos físicos involucrados en la interacción de sus estructuras con la radiación electromagnética.

Se ha comprobado en estos nanosistemas recubiertos, circulares y concéntricos (con tamaños característicos inferiores a  $\lambda$ ) un comportamiento cualitativamente general en las resonancias: una fuerte dependencia de la convergencia en las resonancias de plasmones con el radio externo de la partícula, y con la relación entre los radios. Esto parece concordar muy bien con el modelo de hibridación de plasmones aún dentro de sus aproximaciones [8]. No obstante, del análisis de deconvolución de las curvas de absorción y extinción solo se pueden identificar algunas resonancias fundamentales. La principal dificultad radica en las pérdidas en el sistema, esto provoca un ensanchamiento en los picos de resonancias solapando los momentos de menor intensidad y dificultado su correcta localización [15].

De los estudios realizados en nanotubos con metales "realistas" e iluminados con ondas planas, se ha encontrado dentro de los límites del error en la deconvolución, una particular relación de dispersión para la propagación de modos propios superficiales. Este comportamiento en la dispersión presenta características cualitativamente similares a la descrita en la resolución del problema homogéneo no retardado [9].

Es extremadamente difícil en las curvas obtenidas aquí poder identificar todos los modos de dispersión con diferente momento angular (en caso de que existan). Pero, en este sentido, podría decirse que los plasmones superficiales que se excitan en nanopartículas recubiertas muestran un comportamiento comparable al de un modelo "atómico" pero para fotones (solo en modo  $p$  si se considera  $\mu_{ir} = 1$ ): los estados de energía que pueden ser excitados por fotones incidentes parecen estar cuantizados. Queda aún por demostrar si realmente estos estados están asociados a estados con momento angular cuantizado. Estos resultados preliminares obtenidos con un formalismo clásico serán explorados desde primeros principios [17].

La fuerte dependencia de estas resonancias fundamentales con los parámetros geométricos y constitutivos del sistema provee un método factible para detectar anomalías en las capas metálicas (i.e uniformidad de la capa) y caracterizar o detectar la nanoestructura. Resultados similares muestran esta factibilidad [3]. En el sentido inverso y dado el gran avance tecnológico en el proceso de fabricación de estas nanoestructuras, es posible pensar en estos sistemas como nanofuentes plasmónicas "sintonizables" o como un sistema controlado para absorber ondas electromagnéticas en un espectro casi continuo (al menos óptico) de gran utilidad, por ejemplo, en espectroscopía Raman [20] o para mejorar eficiencias en celdas fotoeléctricas [6].

## Referencias

- 1- Loo C., Lin A., Hirsch L., Min-Ho L., Barton J., Halas N., West J., Drezek R., "Nanoshell-Enabled Photonics-Based Imaging and Therapy of Cancer", *Technology in Cancer Research & Treatment*, Vol 3, 1 (2004).
- 2- West J., Halas N., "Applications of Nanotechnology to Biotechnology (Commentary)", *Current opinion in Biotechnology*, 11:215-217 (2000).
- 3- Lal S., Link S., Halas N., "Nano-Optics from Sensing to Waveguiding", *Nature photonics*, Vol 1, 641 (2007).
- 4- Pendry J.B., Ramakrishna S.A., "Near-Field Lenses in Two Dimensions", *Journal of Physics: Condensed Matter* 1,48463-8479 (2002)
- 5- Muehling O., Seeboth A., Haeusler T., Ruhmann R., Potechius E., Vetter R., "Variable Solar Control using Thermotropic Core/Shell Particles", *Solar Energy Materials & Solar Cells* 93, 1510-1517 (2009).
- 6- Hägglund C., Kasemo B., *Nanoparticle Plasmonics for 2D-Photovoltaics: Mechanisms, Optimization, and Limits*, Vol. 17, No. 14, *Optics Express* 11944 (2009).

- 7- Li J., Salandrino A., Engheta N., "Optical Spectrometer at the Nanoscale using Optical Yagi-Uda Nanoantennas", *Physical Review B* 79, 1995104 (2009).
- 8- Prodan E., Nordlander P., "Plasmon Hybridization in Spherical Nanoparticles", *Journal of Chemical Physics* Vol 120, 11 (2004).
- 9- Moradi A., "Plasmon Hybridization in Metallic Nanotubes", *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 69, 2936-2938 (2008).
- 10- Nieto-Vesperinas M., "Scattering and Diffraction in Physical Optics", John Wiley & Sons, Inc., New York (1992).
- 11- Ripoll J., "Difusión de Luz en Medios Turbios con Aplicación a la Biomédica". Tesis Doctoral, UAM, Madrid, España (2000).
- 12- Lester M., Skigin D., "Coupling of Evanescent S-polarized Waves to the Far Field by Modes in Metallic Arrays", *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics*, 9, 81, ISSN 1464-4258 (2007).
- 13- Scaffardi L.B., Lester M., Skigin D., Tocho J.O., "Optical Extinction Spectroscopy used to Characterize Metallic Nanowires", *Nanotechnology* 18, 315402, 8pp (2007).
- 14- Madrazo A., Nieto-Vesperinas M., "Surface Structure and Polariton Interaction in the Scattering of Electromagnetic Waves from a Cylinder in Front of a Conducting Grating: theory for a Reflection Photon Scanning Tunneling Microscope", *Journal of the Optical Society of America A*, 13, 785 (1996).
- 15- Abraham Ekeröth R. M., "Implementación de un Formalismo Integral Riguroso para Calcular los Campos Electromagnéticos Dispersados por Obstáculos Cilíndricos Recubiertos", Trabajo de Licenciatura, UNICEN, Tandil (2009).
- 16- Van de Hulst, H. C., "Light Scattering by Small Particles", Dover Publications (1981).
- 17- Gervasoni J.L., Arista N.R., "Plasmon excitations in cylindrical wires by external charged particles", *Physical Review B* 68, 235302 (2003).
- 18- Boardman A.D., "Electromagnetic Surface Modes", John Wiley & Sons (1982).
- 19- Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P., "Numerical Recipes in Fortran", Cambridge University Press (1985).
- 20- Zhao K., Xu H., Gu B., Zhang Z., "One-dimensional Arrays of Nanoshell Dimers for Single Molecule Spectroscopy via Surface-Enhanced Raman Scattering", *The Journal of Chemical Physics* 125, 081102 (2006).