

Simulación computacional para la caracterización de las propiedades ópticas de nanoestructuras

Santiago Angulo Flórez

Trabajo de grado para optar al título de Ingeniero de Sistemas e Informática

Director

Arturo Plata Gómez

Doctor en Ciencias para el Ingeniero

Codirectores

Carolina Mendoza Luna

Candidato a Doctor en Ciencias Naturales-Física

Andrés Leonardo González Gómez

Candidato a Doctor en Ciencias de la Computación

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ingenierías Fisicomecánicas

Escuela de Ingeniería de Sistemas e Informática

Bucaramanga

2023

Dedicatoria

*A mi padre por ser mi guía y consejero, e inculcarme
la importancia de la disciplina.*

*A mi madre por buscar darme su apoyo
y brindarme palabra de aliento.*

*A mis directores, que me apoyaron no solo como
mentores, sino como amigos.*

*A mis hermanos y amigos, por estar a mi lado
y escucharme.*

- Santiago Angulo

Agradecimientos

A mi padres, por estar conmigo en todo momento y brindarme las herramientas necesarias para culminar esta etapa de mi vida

A los profesores Andrés y Carolina, no solo por su compañía en el desarrollo de este trabajo, sino también en otros aspectos que no cualquier director de trabajo de grado haría.

Al profesor Arturo, por compartir su tiempo y experiencias de vida, que generaron motivación en mí para seguir adelante.

A mis compañeros de carrera, por estar conmigo durante estos años en la universidad.

A mis amigas Milena y Aylin, por oírme y darme aliento aún siendo externas a mi carrera.

Tabla de Contenido

Introducción	13
1 Objetivos	16
2 Propiedades ópticas de nanoestructuras	17
2.1 Ecuaciones de Maxwell	17
2.2 Interacción electromagnética en nanoestructuras metálicas	20
2.2.1 Resonancia de plasmones superficiales localizados	21
2.3 Propiedades ópticas de los metales	24
2.3.1 Teoría de Mie	24
2.3.2 Dispersión	26
2.3.3 Absorción	26
2.3.4 Extinción	27
3 Métodos computacionales	28
3.1 Método de elementos finitos	29
3.1.1 Otros métodos numéricos: diferencias finitas en el dominio del tiempo (FDTD)	33
3.1.2 Otros métodos numéricos: método de momentos (MoM)	36
3.2 Herramientas de trabajo en la simulación	39

3.2.1	COMSOL Multiphysics ®	39
3.2.2	MATLAB App Designer	40
4	Metodología	41
4.1	Software especializado	42
4.1.1	Definición de parámetros globales	43
4.1.2	Definición de geometría y materiales	44
4.1.2.1	Capa perfectamente acoplada (PML)	45
4.1.2.2	Materiales dieléctricos a frecuencias ópticas	45
4.1.3	Definición de variables	47
4.1.3.1	Onda electromagnética en el dominio de la frecuencia	48
4.2	Simulación de propiedades ópticas	49
4.2.1	Nanoesferas	50
4.2.2	Nanobarras	53
5	Resultados	59
5.1	Desarrollo de la interfaz	59
5.2	Análisis de resultados	65
5.2.1	Análisis de las nanoesferas	65
5.2.2	Análisis de las nanobarras	69
6	Conclusiones y trabajo futuro	74

7 Apéndice

76

Referencias Bibliográficas

78

Lista de Figuras

Figura 1	Gráfica del espectro electromagnético visible por el ojo humano.	21
Figura 2	Resonancia de plasmones localizada en una nanoesfera metálica.	22
Figura 3	Nanoesfera de plata de Radio R rodeada por aire con un campo eléctrico incidente.	23
Figura 4	Esquema del dominio y contornos para una nanoesfera de oro rodeada de aire.	30
Figura 5	Modelo de una nanoesfera de 70 nanómetros elaborada con COMSOL: (a) Creación del modelo, (b) Generación de elementos finitos.	31
Figura 6	Esquema de un elemento finito (e) en forma de tetraedro, con sus vértices (N) y aristas señaladas.	33
Figura 7	Rejilla de Yee, empleada en su adaptación del método de diferencias finitas en el dominio del tiempo.	35
Figura 8	Diagrama de la metodología empleada.	41
Figura 9	Selección y descripción del modelo físico: Ondas electromagnéticas, dominio de la frecuencia (emw).	43
Figura 10	Esquema del modelo de una nanoesfera en COMSOL con sus capas señaladas.	45
Figura 11	Constantes ópticas para cada material (a) plata, (b) oro	46
Figura 12	Selección de región de integración para la dispersión, superficie de la nanoesfera.	48

Figura 13	Campo eléctrico cercano de una nanoesfera de oro de 50 nanómetros.	50
Figura 14	Sección eficaz de absorción para una esfera de 50 nanómetros de dos materiales: oro y plata.	51
Figura 15	Sección eficaz para cada propiedad óptica en la plata (a-c) Teoría de Mie (d-f) Simulada.	52
Figura 16	Sección eficaz para cada propiedad óptica en el oro (a-c) Teoría de Mie (d-f) Simulada.	53
Figura 17	Esquema del modelo de una nanobarra en COMSOL con sus capas señaladas.	54
Figura 18	Esquema de una nanobarra construida en COMSOL con sus sectores señalados.	55
Figura 19	Sección eficaz de absorción para nanobarras de oro en diferentes medios (a) Relación de aspecto 2.1 (b) Relación de aspecto 3.0.	57
Figura 20	Absorción, extinción y dispersión para nanobarras con relación de aspecto de 2.1 y 3.0, con un medio cuyo índice de refracción es $n = 1,5$.	58
Figura 21	Secciones eficaces de absorción, dispersión y extinción de nanobarras de oro (a) Relación de aspecto 2.1 (b) Relación de aspecto 3.0.	58
Figura 22	Vista de la interfaz - Constantes ópticas de los materiales usados.	60
Figura 23	Vista de la interfaz - Resultados de las nanoesferas simuladas.	61
Figura 24	Vista de la interfaz - Cuadros de lista.	62
Figura 25	Vista de la interfaz - casillas de verificación.	63
Figura 26	Vista de la interfaz - Campo eléctrico cercano.	64

Figura 27	Vista de la interfaz - Nanobarras simuladas.	64
Figura 28	Vista de la interfaz - Tabla de los picos de absorción.	65
Figura 29	Comportamiento de la absorción en las nanoesferas de oro.	66
Figura 30	Propiedades ópticas de nanoesferas de oro (a) Dispersión (b) Extinción.	67
Figura 31	Propiedades ópticas de nanoesferas de plata (a) Absorción (b) Dispersión (c) Extinción.	68
Figura 32	Propiedades ópticas de nanobarras de oro (a) Absorción (b) Dispersión (c) Extinción.	70
Figura 33	Propiedades ópticas de nanobarras de plata (a) Absorción (b) Dispersión (c) Extinción.	72

Lista de Tablas

Tabla 1	Comparación entre los métodos numéricos más conocidos.	29
Tabla 2	Definición de parámetros globales para la construcción del modelo de una nanoesfera.	44
Tabla 3	Cálculo de variables e integrales para los modelos simulados	48
Tabla 4	Pico de absorción en nanoesferas de oro.	66
Tabla 5	Pico de dispersión en nanoesferas de oro.	67
Tabla 6	Pico de extinción en nanoesferas de oro.	68
Tabla 7	Pico de absorción en nanoesferas de plata.	69
Tabla 8	Pico de dispersión en nanoesferas de plata.	69
Tabla 9	Pico de extinción en nanoesferas de plata.	69
Tabla 10	Pico de absorción en nanobarras de oro.	70
Tabla 11	Pico de dispersión en nanobarras de oro.	71
Tabla 12	Pico de extinción en nanobarras de oro.	71
Tabla 13	Pico máximo de absorción en nanobarras de plata.	72
Tabla 14	Pico máximo de dispersión en nanobarras de plata.	72
Tabla 15	Pico máximo de extinción en nanobarras de plata.	73

Resumen

Título: Simulación computacional para la caracterización de las propiedades ópticas de nanoestructuras *

Autor: Santiago Angulo Flórez **

Palabras Clave: Nanoestructuras, propiedades ópticas, simulación, electromagnetismo computacional.

Descripción: El uso de simulaciones para estudiar comportamientos físicos en la materia ha adquirido mayor relevancia en los últimos años gracias al aumento en la potencia de cómputo. De estos comportamientos, existe especial interés por el de las nanoestructuras metálicas, las cuales interactuar con la luz exhiben propiedades ópticas particulares. En este estudio se realizaron simulaciones empleando el método de elementos finitos, donde se tomaron nanoesferas con radio de 10 a 100 nanómetros, y se emplearon dos materiales diferentes: oro y plata. Cada nanoesfera fue sometida a una onda electromagnética armónica, cuya longitud de onda se encontraba en el espectro visible por el ojo humano y sus cercanías. A su vez en este estudio fueron tomadas nanobarras de distintas longitudes las cuales fueron aumentando mientras se mantuvo su radio fijo. Al realizar estas simulaciones se pudo determinar el comportamiento óptico de cada nanoestructura al variar su material y tamaño, calculando las propiedades de absorción, dispersión y extinción. En este trabajo se realiza un estudio de las ecuaciones de Maxwell y el método de elementos finitos aplicado en nanoestructuras, posteriormente se realizan simulaciones gracias al conocimiento adquirido y los resultados de estas simulaciones se validan comparándolos con otros en el estado del arte con el fin de comprobar que sean congruentes, con el fin de determinar su funcionalidad como nanoantenas.

* Trabajo de grado

** Facultad de Ingenierías Fisicomecánicas. Escuela de Ingeniería de Sistemas e Informática. Director: Arturo Plata Gómez, PhD en Ciencias para el Ingeniero. Codirector: Carolina Mendoza Luna, PhD(c) en Ciencias Naturales-Física. Codirector: PhD(c) en Ciencias de la Computación Andrés Leonardo González Gómez.

Abstract

Title: Computational simulation for characterization of optical properties of nanostructures. *

Authors: Santiago Angulo Flórez **

Keywords: Nanostructures, optical properties, simulation, computational electromagnetics.

Description: The use of simulation to study the physical behavior of matter has become more relevant in recent years thanks to the increase in computing capacity. Among these behaviors, there is special interest in the behavior of metallic nanostructures, which exhibit particular optical properties when they interact with light. In this study, simulations were performed using the finite element method, where nanospheres with a radius from 10 to 100 nanometers were taken, and two different materials were used: gold and silver. Each nanosphere was subjected to a harmonic electromagnetic wave, whose wavelength was in the spectrum visible to the human eye and its vicinity. At the same time in this study were taken nanorods of different lengths which were length were increased while their radius was kept fixed. By performing these simulations it was possible to determine the optical behavior of each nanostructure by varying its material and size, calculating the properties of absorption, scattering and extinction. In this research a study of Maxwell's equations and the finite element method applied to nanostructures is conducted, then simulations are performed thanks to the knowledge acquired and the results of these simulations are validated by comparing them with others in the state of art in order to verify that they were congruent, aiming at their functionality as nanoantennas.

* Bachelor Thesis

** Facultad de Ingenierías Fisicomecánicas. Escuela de Ingeniería de Sistemas e Informática. Director: Arturo Plata Gómez, PhD en Ciencias para el Ingeniero. Codirector: Carolina Mendoza Luna, PhD(c) en Ciencias Naturales-Física. Codirector: PhD(c) en Ciencias de la Computación Andrés Leonardo González Gómez.

Introducción

En el estudio del electromagnetismo, el uso de métodos numéricos ha probado ser fundamental para el desarrollo de nuevas tecnologías. El aumento en la potencia de los computadores permite realizar cálculos complejos en tiempos mucho más reducidos y con una precisión adecuada. Los procesos que antes debían realizarse a prueba y error, o solucionando manualmente modelos con muchas variables, hoy en día pueden resolverse a través de una simulación computacional, la cual consiste en emular en un computador el comportamiento de cualquier modelo Vandebosch (2012). Esta técnica puede ser aplicada a la resolución de problemas electromagnéticos, el cual es un proceso conocido como el electromagnetismo computacional Vandebosch (2012); Mencarelli et al. (2015). Este último ha tomado un papel importante en el estudio de las propiedades ópticas de nanoestructuras, cuyo tamaño se encuentra entre dimensiones de 1 a 100 nanómetros Hulla et al. (2015).

Cuando la luz interactúa con una nanoestructura metálica, genera una oscilación colectiva entre sus electrones que se denomina resonancia de plasmones. Este fenómeno llega a ser extenso ya que según el material, la geometría y tamaño que posea la nanoestructura, habrá un comportamiento diferente cuando esta interactúe con una onda electromagnética Kelly et al. (2003). En general las propiedades ópticas que exhiban nanoestructuras metálicas, pueden ser analizadas con teorías como las ecuaciones de Maxwell, las cuales describen los distintos fenómenos de interacciones electromagnéticas Giannini et al. (2011).

El análisis de las propiedades ópticas de nanoestructuras, se centra principalmente en su capacidad de absorber y dispersar un campo electromagnético. Esta funcionalidad puede aplicarse en el área de la nanotecnología, aportando distintas ramas como la medicina y la biología Hulla et al. (2015); Wang et al. (2020). Las nanoestructuras metálicas son las más utilizadas debido a que los metales son conocidos por ser excelentes conductores y presentan otras propiedades físicas destacables, que les permite resaltar en medios como el aire. Sin embargo, cuando se trabaja en escalas nanométricas el comportamiento de los metales ya no es el mismo que el conocido normalmente, lo que ha motivado estudios que buscan caracterizar sus propiedades ópticas Mencarelli et al. (2015).

Hay una gran variedad de aplicaciones donde se emplean nanoestructuras metálicas, entre ellas las nanoantenas. Una de las razones para estudiar antenas nanométricas, es debido a su capacidad de absorber la luz y dispersarla, lo que las convierte en una herramienta de control para la radiación óptica, cuyo estudio puede usarse como base en otras aplicaciones a nivel nanométrico, tales como: la espectroscopia de Raman para estudiar la composición química de un compuesto, la hipertermia para el tratamiento de tumores o incluso para la fabricación de celdas solares Biagioni et al. (2012).

La complejidad que existe al momento de fabricar componentes nanométricos, hace que el uso de una simulación sea fundamental. Es posible aproximar soluciones mediante el uso de

métodos numéricos como por ejemplo, el método de elementos finitos. De esta forma, a través de una simulación es posible obtener resultados precisos para el comportamiento del campo electromagnético descrito por las ecuaciones de Maxwell Pomplun et al. (2007). También hay que tener en cuenta que los metales como el oro, son costosos y su adquisición puede ser limitada Wang et al. (2020), aún más en países como Colombia donde la exportación de estos metales juegan un papel importante en su economía. Por lo anterior, es necesario como primer paso realizar una simulación computacional con el fin de no solo facilitar la resolución de modelos a través métodos numéricos, sino a su vez reducir los costos experimentales al trabajar con múltiples materiales y geometrías.

El propósito de este trabajo es simular el comportamiento de nanoestructuras con diferentes geometrías, dimensiones y materiales, usando métodos de electromagnetismo computacional para analizar su funcionalidad como nanoantenas, es decir, que tan bien una nanoestructura puede absorber y dispersar un campo eléctrico. En primera instancia se estudiaron las propiedades ópticas de las nanoestructuras a través de las ecuaciones de Maxwell, junto al uso de métodos numéricos para resolver problemas de electromagnetismo, enfocado principalmente el método de elementos finitos (FEM). Con el conocimiento adquirido, se procede a hacer simulaciones en el software COMSOL Multiphysics, variando propiedades de las nanoestructuras y cuyos resultados son validados con otros reportados en el estado del arte. Posteriormente estos resultados son llevados a MATLAB, donde usando su entorno de desarrollo App Designer se recopilan y organizan en una interfaz. Finalmente, se analizan los resultados para evaluar la capacidad de las nanoestructuras para funcionar como nanoantenas.

1. Objetivos

Objetivo General

Realizar una simulación numérica del comportamiento de nanoestructuras con diferentes geometrías, dimensiones y materiales, usando un método de electromagnetismo computacional para analizar su funcionalidad como nanoantenas.

Objetivos específicos

- Estudiar la absorción, dispersión y extinción en nanoestructuras metálicas junto con el método de elementos finitos (FEM), aplicado a la solución de las ecuaciones de Maxwell.
- Realizar una simulación apoyada en software especializado, variando la geometría, tamaño y material de las nanoestructuras con el fin de caracterizar su comportamiento óptico.
- Validar los resultados de la simulación, comparándolos con otros reportados en el estado del arte.
- Desarrollar una interfaz gráfica para la visualización interactiva de los resultados de la simulación computacional.
- Analizar los resultados obtenidos, y evaluar la capacidad de las nanoestructuras para actuar como nanoantenas.

2. Propiedades ópticas de nanoestructuras

Las propiedades ópticas de una nanoestructura se presentan cuando estas interactúan con una onda electromagnética como la luz, la cual posee un campo eléctrico (\mathbf{E}) y un campo magnético (\mathbf{B}). Para el caso de las nanoestructuras, el interés se centra en el campo eléctrico haciendo uso de las ecuaciones de Maxwell.

2.1. Ecuaciones de Maxwell

Las ecuaciones de Maxwell, son cuatro ecuaciones propuestas por James Clark Maxwell y son consideradas la base de la teoría electromagnética clásica, ya que reúnen en una sola teoría los fenómenos eléctricos y magnéticos, los cuales antes se abordaban de manera independiente Gómez and González (2012). El motivo para analizar las ecuaciones de Maxwell, es debido a su capacidad de relacionar el campo eléctrico y el magnético cuando interactúan con la materia, cuyo estudio es fundamental para caracterizar propiedades ópticas. A continuación se presentan las ecuaciones de Maxwell para medios lineales:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (4)$$

donde \mathbf{D} representa el desplazamiento eléctrico, \mathbf{B} la inducción magnética, \mathbf{E} la intensidad campo eléctrico y \mathbf{H} la intensidad campo magnético; ρ es densidad de carga y \mathbf{J} la densidad de corriente Jackson (1999).

La inducción magnética (\mathbf{B}), la densidad de corriente (\mathbf{J}) y el desplazamiento eléctrico (\mathbf{D}), para medios lineales están vinculados entre sí a partir de las siguientes relaciones constitutivas:

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mu_r \mathbf{H}, \quad (5)$$

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}, \quad (6)$$

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \mathbf{E}. \quad (7)$$

Las constantes presentes en las relaciones son: la permeabilidad magnética μ , la conductividad eléctrica σ y la permitividad eléctrica del material ε . En el caso de los materiales a estudiar, su permitividad eléctrica es descrita a través de una función compleja $\varepsilon(\omega)$ dependiente de la frecuencia de la onda con la que interactúe Giannini et al. (2011).

Considerando que el comportamiento de los campos eléctrico y magnético es armónico, se pueden describir el cambio en el tiempo del desplazamiento eléctrico (\mathbf{D}) y la inducción magnética (\mathbf{B}) como una frecuencia de la siguiente manera: $j\omega$, donde ω es la frecuencia angular. Con esto las ecuaciones ya no estarán en dependencia del tiempo, y se trabajarán en el dominio de la frecuencia. Teniendo en cuenta las relaciones de (5) a (7) se obtienen las ecuaciones de Maxwell en frecuencia

y se dejan en dependencia únicamente del campo eléctrico (\mathbf{E}) y el campo magnético (\mathbf{H}) Mu et al. (2015); Bohren and Huffman (2008).

$$\nabla \cdot \epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{E} = \rho, \quad (8)$$

$$\nabla \cdot \mu_0 \mu_r \mathbf{H} = 0, \quad (9)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -j\omega \mu_0 \mu_r \mathbf{H}, \quad (10)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \sigma \mathbf{E} + j\omega \epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{E}. \quad (11)$$

Aplicando la operación $\nabla \times \mu_r^{-1}$ a la ecuación (10),

$$\nabla \times (\mu_r^{-1} \nabla \times \mathbf{E}) = \nabla \times \mathbf{H} (-j\omega \mu_0), \quad (12)$$

y reemplazando en la ecuación (11) para dejarlo en términos de un solo campo,

$$\nabla \times (\mu_r^{-1} \nabla \times \mathbf{E}) = (\sigma \mathbf{E} + j\omega \epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{E}) (-j\omega \mu_0), \quad (13)$$

multiplicando y sacando \mathbf{E} como factor común

$$\nabla \times (\mu_r^{-1} \nabla \times \mathbf{E}) = (-j\omega \mu_0 \sigma + \omega^2 \mu_0 \epsilon_0 \epsilon_r) \mathbf{E}. \quad (14)$$

Para simplificar aún más la ecuación, se puede hacer uso de la definición de una onda

electromagnética en el vacío, donde se relaciona la velocidad en el vacío (v_0) y el número de onda (k_0) de la siguiente manera:

$$v_0 = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}, \quad (15)$$

$$k_0 = \frac{\omega}{v_0}, \quad (16)$$

$$k_0^2 = \omega^2 \epsilon_0 \mu_0, \quad (17)$$

reemplazando por k_0^2 y sacándolo como factor común en (14)

$$\nabla \times (\mu_r^{-1} \nabla \times \mathbf{E}) = k_0^2 \left(\epsilon_r - \frac{j\sigma}{\omega \epsilon_0} \right) \mathbf{E}. \quad (18)$$

Con lo que se obtiene la ecuación de onda electromagnética armónica con el campo eléctrico (18), la cual es una ecuación diferencial parcial de orden superior. La importancia de esta ecuación se debe a que es fundamental para describir la propagación de una onda electromagnética ya sea en el vacío o en un medio homogéneo Jackson (1999); Mu et al. (2015).

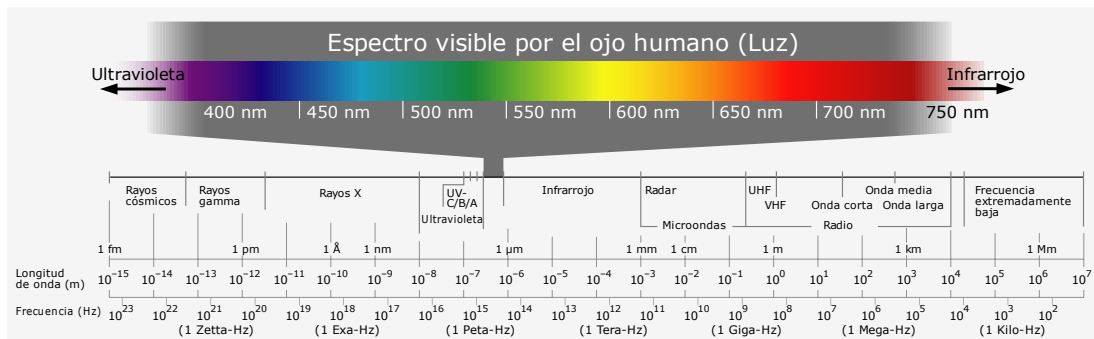
2.2. Interacción electromagnética en nanoestructuras metálicas

Hay una gran variedad de aplicaciones donde se emplean nanoestructuras metálicas, entre ellas las nanoantenas. Las antenas convencionales suelen trabajar con ondas electromagnéticas a frecuencias fuera del espectro visible, es decir, a longitudes de onda que no son perceptibles por el ojo humano, mientras que las nanoantenas buscan funcionar por dentro de este rango (ver figura 1). Cuando una nanoestructura metálica interactúa con una onda electromagnética armónica a una

frecuencia adecuada, es posible generar un fenómeno conocido como resonancia de plasmones superficiales localizados, cuyo comportamiento se verá afectado por el tamaño y material de la nanoestructura.

Figura 1

Gráfica del espectro electromagnético visible por el ojo humano.

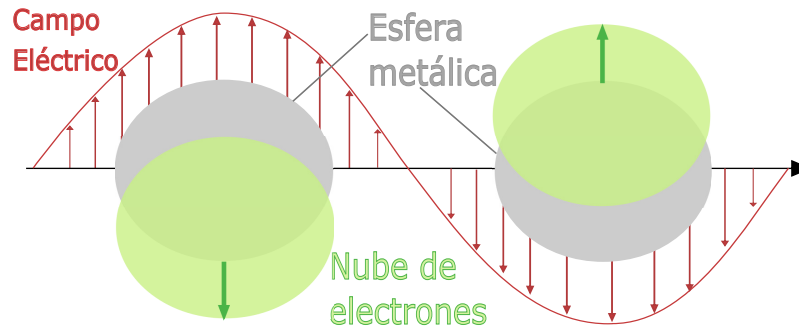


Nota. Adaptado de Frank and Jailbird (2005)

2.2.1. Resonancia de plasmones superficiales localizados. La interacción entre una estructura metálica y un campo eléctrico externo, ocasiona que se acoplen los electrones libres de la partícula y estos son denominados plasmones superficiales. Cuando el campo eléctrico posee un comportamiento armónico como en la ecuación (18), genera una vibración colectiva en la nube de electrones a la que se le conoce como resonancia de plasmones superficiales localizados (ver figura 2), dicha resonancia es central en el estudio, ya que el comportamiento de los electrones libres permitirá caracterizar las propiedades ópticas de la nanoestructura metálica Wang et al. (2020); Maier (2007).

Figura 2

Resonancia de plasmones localizada en una nanoesfera metálica.



Nota. Adaptado de Kelly et al. (2003).

Con el fin de que se genere una resonancia de plasmones, es necesario tener en cuenta las siguientes características:

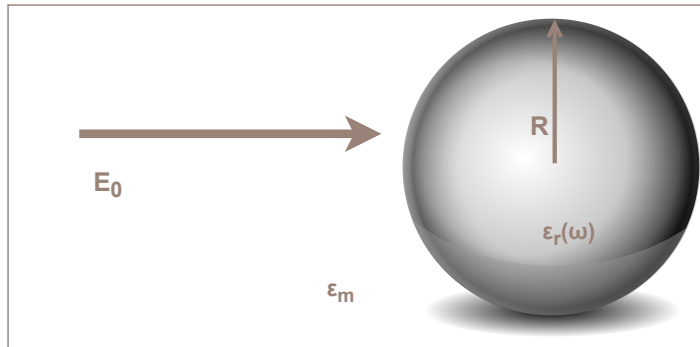
- Se produce resonancia a altas frecuencias, en aquellas que se encuentren en el rango del espectro visible y sus alrededores (ver figura 1).
- El radio de la esfera (R), debe ser mucho menor que la longitud de onda del campo electromagnético incidente (λ).
- En niveles de medición nanométricos los metales ya no se comportan como un conductor perfecto, sino como un material dieléctrico Giannini et al. (2011).

Para ejemplificar un escenario donde puede suceder una resonancia de plasmones superficiales localizados, suponga una esfera metálica con propiedades descritas por una función dieléctrica $\epsilon_r(\omega)$ cuyo medio que la rodea es el aire (ϵ_m) y en la cual incide un rayo de luz con frecuencia

(ω) (Ver figura 3).

Figura 3

Nanoesfera de plata de Radio R rodeada por aire con un campo eléctrico incidente.



Nota. Adaptado de Hnri (2009)

Suponiendo que la nanoesfera de plata posea un radio $R = 50$ [nm], la frecuencia del campo electromagnético incidente debería encontrarse en longitudes de onda entre los 300 a 800 nanómetros aproximadamente, ya que este rango hace parte del espectro visible y sus alrededores (ver figura 1). Para lograr esto, se parte de la siguiente relación:

$$\lambda = \frac{V}{\omega}, \quad (19)$$

$$\omega = \frac{V}{\lambda}, \quad (20)$$

siendo λ la longitud de onda y V la velocidad de la onda incidente. Teniendo en cuenta que la

velocidad de una onda electromagnética en el vacío es igual a la velocidad de la luz ($C_0 \approx 3 \times 10^8$) [km/s], con la relación descrita en (20), se puede determinar que un rango adecuado para que se genere una resonancia de plasmones sería en frecuencias de 375 a 1000 terahercios (10^{12} [Hz]) aproximadamente.

2.3. Propiedades ópticas de los metales

Existen diversos fenómenos que se pueden presentar cuando una onda electromagnética incidente, interactúa en algún medio con propiedades ópticas como los metales. Algunos son bastante conocidos como la refracción, que indica el cambio de dirección y velocidad de una onda electromagnética cuando pasa de un medio a otro. Sin embargo, existen otros fenómenos en el estudio de la óptica como la absorción, dispersión, y extinción; los cuales son de mayor relevancia cuando se analizan nanoestructuras metálicas. De estas últimas tres propiedades mencionadas, hay principal interés en sus secciones eficaces.

Las secciones eficaces son una métrica dada en unidades de área (m^2) que permite determinar que tanto se puede absorber, disipar o extinguir a cierta longitud de onda (λ). El identificar los valores máximos de estas secciones eficaces es relevante, pues a dichas longitudes de onda es donde habrá mayor probabilidad que se presente una resonancia de plasmones Olson et al. (2015a); Giannini et al. (2011).

2.3.1. Teoría de Mie. En 1908, el físico Gustav Mie propuso una forma para calcular las secciones eficaces de dispersión (σ_{sca}) y de extinción (σ_{ext}) para nanoestructuras metálicas esféricas Mie (1908). Esta se basa en la solución de las ecuaciones de Maxwell, haciendo uso de la permitividad eléctrica de la nanoestructura (ϵ_r) y del medio que la rodea (ϵ_m) (ver Figura 3). Las

ecuaciones para calcular las secciones eficaces de dispersión (σ_{sca}) y extinción (σ_{ext}) son:

$$\sigma_{sca} = \frac{2\pi}{|\vec{k}|^2} \sum_{l=1}^{\infty} (2l+1) (|a_l|^2 + |b_l|^2), \quad (21)$$

$$\sigma_{ext} = \frac{2\pi}{|\vec{k}|^2} \sum_{l=1}^{\infty} (2l+1) (a_l + b_l), \quad (22)$$

donde los valores de a y b se denotan como:

$$a_l = \frac{\epsilon_m m^2 j_l(x) [x j_l(x)]' - \epsilon j_l(x) [m x j_l(mx)]'}{\epsilon_m m^2 j_l(mx) [x h_l^{(1)}(x)]' - \epsilon h_l^{(1)}(x) [m x j_l(mx)]'}, \quad (23)$$

$$b_l = \frac{\epsilon j_l(x) [x j_l(x)]' - \epsilon_m j_l(x) [m x j_l(mx)]'}{\epsilon j_l(mx) [x h_l^{(1)}(x)]' - \epsilon_m h_l^{(1)}(x) [m x j_l(mx)]'}. \quad (24)$$

(j_l) hace referencia a funciones de Bessel y (h_l) las funciones de Hankel. $x = |\vec{k}|R$, donde $|\vec{k}|$ es el vector de la onda electromagnética y R es el radio de la esfera; m es la relación entre el índice de refracción del material de la esfera (n) y del medio (n_m). Wang et al. (2020); Mie (1908) Finalmente l corresponde al comportamiento del campo eléctrico, como dipolo ($l = 1$), cuadripolo ($l = 2$), y así sucesivamente. Para el caso de la resonancia de plasmones (ver figura 2), se aprecia que hay un comportamiento dipolar, es decir, dos puntos de mayor concentración de campo eléctrico, por lo que la teoría de Mie se aplicará únicamente para ($l = 1$) debido a las características del

fenómeno.

A día de hoy, únicamente las propiedades de nanoestructuras esféricas tienen una solución analítica conocida, la cual es mediante esta teoría, esto ha desencadenado la creación de programas capaces de calcular en pocos segundos las secciones eficaces de absorción (σ_{abs}), dispersión (σ_{sca}) y extinción (σ_{ext}), como por ejemplo scattnlay Peña and Pal (2009). Esto permite validar los resultados obtenidos para el comportamiento de propiedades ópticas de una nanoesfera a través de una simulación.

2.3.2. Dispersión. En el fenómeno de dispersión la nanoestructura libera una onda electromagnética en ciertas direcciones. Dicha capacidad de disipar puede ser cuantificada mediante su sección eficaz σ_{sca} la cual se calcula con la siguiente ecuación:

$$\sigma_{sca} = \frac{1}{I_0} \int \int (\hat{n} \cdot \vec{S}_{sca}) ds, \quad (25)$$

donde \hat{n} es el vector normal, el cual apunta hacia afuera desde la nanoestructura. \vec{S}_{sca} es la intensidad del vector de Poynting dispersado, el cual es la energía electromagnética que fluye en la misma dirección de la onda. I_0 es la intensidad incidente, o la magnitud del vector de Poynting ($|\vec{S}_{sc}|$). La integral se toma sobre la superficie de la nanoestructura.

2.3.3. Absorción. La absorción es la capacidad que tiene una nanoestructura de retener la onda electromagnética incidente. Dicha capacidad de absorber puede ser cuantificada en

la sección eficaz de absorción (σ_{abs}), que se calcula así:

$$\sigma_{abs} = \frac{1}{I_0} \int \int \int O_h dv, \quad (26)$$

donde O_h son las pérdidas óhmicas, puede ser visto como la resistencia de los electrones a moverse cuando hay una interacción eléctrica, o la energía disipada del sistema en forma de calor.

2.3.4. Extinción. Finalmente, está la extinción, cuya sección eficaz (σ_{ext}) es la suma de las secciones eficaces de absorción (σ_{abs}) y dispersión (σ_{sca})

$$\sigma_{ext} = \sigma_{sca} + \sigma_{abs}. \quad (27)$$

Resolver estas integrales de forma analítica para estructuras no esféricas es difícil e incluso puede llegar a ser imposible, es por esto que se hace indispensable el uso de herramientas computacionales, con el fin de calcular estos parámetros para caracterizar de manera adecuada el comportamiento de las propiedades ópticas de las nanoestructura.

3. Métodos computacionales

El uso de herramientas computacionales para estudiar el comportamiento de un objeto al interactuar con un campo electromagnético, es conocido como electromagnetismo computacional. Este tiene como objetivo resolver las ecuaciones de Maxwell haciendo uso de métodos numéricos. El aumento en la capacidad de los computadores, ha hecho que el electromagnetismo computacional se convierta en una herramienta de análisis muy importante. Esto se debe principalmente a la efectividad de las ecuaciones de Maxwell para describir cualquier comportamiento electromagnético si son resueltas de manera adecuada Jin (2010).

Para solucionar las ecuaciones de Maxwell a través de un computador, es fundamental el uso de métodos numéricos. Existen diferentes métodos numéricos aplicados en el electromagnetismo computacional, donde los más conocidos son el método de momentos (MoM), el método de diferencias finitas en el dominio del tiempo (FDTD) y el método de elementos finitos (FEM). A continuación se presenta la Tabla (1), en la cual se comparan ciertas características de cada método.

Tabla 1

Comparación entre los métodos numéricos más conocidos.

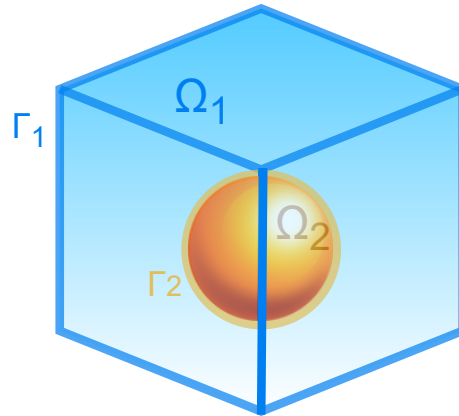
	FDTD	FEM	MoM
Cálculo	Halla E y H	Halla E y H	Halla J y D
	Si presenta, es usada	No presenta, es usada	No presenta, es usada
Dependencia del tiempo	principalmente en el dominio del tiempo.	en el dominio de las frecuencias.	en el dominio de las frecuencias.
Convergencia	Garantizada.	Garantizada.	No garantizada.

3.1. Método de elementos finitos

El método de elementos finitos, es un método numérico usado para la aproximación de la solución de ecuaciones diferenciales parciales, donde se define un dominio de trabajo (Ω), y el contorno del material (Γ), del cual se extraen las condiciones frontera para resolver ecuaciones como (18) Monk (1992). Para este caso, el estudio se centra en el dominio \mathbf{R}^3 , es decir geometrías que presenten tres dimensiones, donde habrá una nanoestructura de metal que se encontrará rodeada de aire, como se puede observar en la Figura 4. Otro dominio a tener en cuenta es \mathbf{R}^2 , debido a que la superficie de la nanoestructura es de interés para extraer condiciones frontera.

Figura 4

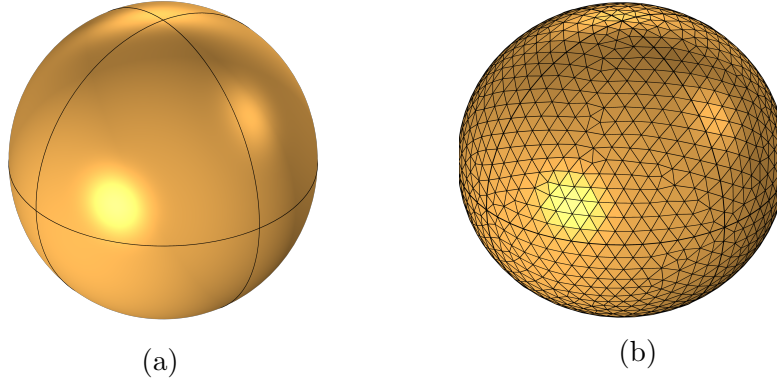
Esquema del dominio y contornos para una nanoesfera de oro rodeada de aire.



El método de elementos finitos toma una geometría, y divide su dominio (Ω) en pequeños subdominios, a los que se les denomina elementos finitos, y entonces busca una solución aproximada para cada uno de ellos. En geometrías tridimensionales como las esferas suelen usarse tetraedros en los subdominios, pues son capaces de adaptarse fácilmente a geometrías complejas (ver fig 5), aunque existen otras como los octaedros e icosaedros. Al usar alguna de las geometrías ya mencionadas, se genera una malla que buscará replicar la forma de la geometría original Jin (2010).

Figura 5

Modelo de una nanoesfera de 70 nanómetros elaborada con COMSOL: (a) Creación del modelo, (b) Generación de elementos finitos.



Para resolver la ecuación (18) se empleará la formulación del método de pesos residuales, debido a que esta permite reducir la complejidad del planteamiento matemático, donde se trabaja directamente desde la ecuación diferencial parcial, integrando la ecuación en todo el dominio (Ω) junto con una función de pesos (w_i), teniendo en cuenta que la variable de interés para calcular es el campo eléctrico (\mathbf{E}) como se puede ver a continuación:

$$\int_{\Omega} \mathbf{w}_i \cdot \left(\nabla \times [\mu_r^{-1} \nabla \times \mathbf{E}] - k_0^2 \left[\epsilon_r - \frac{j\sigma}{\omega \epsilon_0} \right] \mathbf{E} \right) d\Omega = 0. \quad (28)$$

Para simplificar la formulación de (28), se puede hacer uso de la condición frontera homogénea de Dirichlet (Γ_D), de la cual estipula que un medio homogéneo la superficie no tendrá influencia en el campo eléctrico si dicha superficie es un conductor perfecto. Jin (2010); Mu et al.

(2015). Gracias a esto no se tienen en cuenta las integrales de contorno (\int_{Γ}), sino únicamente la integral del dominio (\int_{Ω}), lo cual se conoce como forma débil.

$$\int_{\Omega} \left([\mu_r^{-1} \nabla \times \mathbf{E}] \cdot (\nabla \times \mathbf{w}_i) - k_0^2 \left[\epsilon_r - \frac{j\sigma}{\omega\epsilon_0} \right] (\mathbf{w}_i \cdot \mathbf{E}) \right) d\Omega = 0. \quad (29)$$

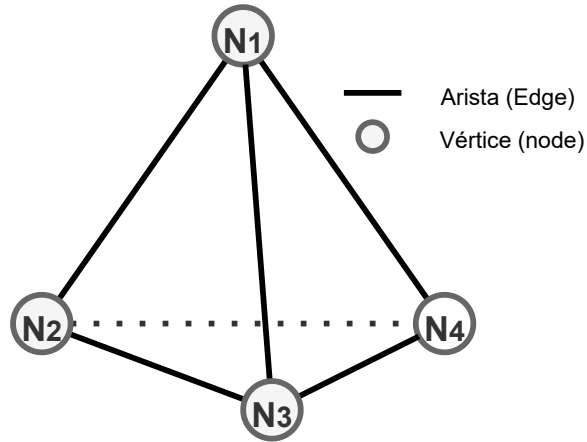
Posterior a esto se generan los elementos finitos, los cuales serán tetraedros para estructuras tridimensionales. Una vez son generados, se asignará la componente tangencial del campo eléctrico \mathbf{E} a cada arista del elemento finito, y entonces se hará una interpolación al campo eléctrico (\mathbf{E}) para obtener su valor en dicho elemento finito (e):

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^{(e)}(x, y, z) = & \mathbf{N}_{12}^{(e)}(x, y, z)E_{12}^{(e)} + \mathbf{N}_{13}^{(e)}(x, y, z)E_{13}^{(e)} + \mathbf{N}_{14}^{(e)}(x, y, z)E_{14}^{(e)} \\ & + \mathbf{N}_{23}^{(e)}(x, y, z)E_{23}^{(e)} + \mathbf{N}_{24}^{(e)}(x, y, z)E_{24}^{(e)} + \mathbf{N}_{34}^{(e)}(x, y, z)E_{34}^{(e)}, \end{aligned} \quad (30)$$

Siendo $E_{lk}^{(e)}$ la componente tangencial del campo eléctrico (\mathbf{E}) para cada par de vértices l y k unidos por una arista del elemento finito (e), y siendo $N_{lk}^{(e)}$ la función base para poder interpolar linealmente las aristas. A continuación en la Figura 6, se muestra un esquema de un tetraedro señalando sus aristas y vértices, con el cual se entiende mejor la notación de los subíndices empleada en la ecuación (30) Jin (2010).

Figura 6

Esquema de un elemento finito (e) en forma de tetraedro, con sus vértices (N) y aristas señaladas.



El reconstruir una geometría y hacer uso de la malla convierte la ecuación diferencial parcial que describe la estructura completa, a un sistema de cientos de ecuaciones algebraicas, el cual puede resolver un computador en cuestión de minutos.

3.1.1. Otros métodos numéricos: diferencias finitas en el dominio del tiempo

(FDTD). Este método busca aproximar los operadores diferenciales de una ecuación diferencial parcial, a través de la definición de la derivada, la cual establece que a una función $f(x)$ se le puede calcular su derivada en un punto x incrementando (31) o disminuyendo (32) por un pequeño valor Δx , para posteriormente calcular la diferencia entre ellos. Jin (2010)

$$f'(x = x_0) \approx \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}, \quad (31)$$

$$f'(x = x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x}. \quad (32)$$

Al tomar el promedio de la fórmula diferencial delantera (31) y la fórmula diferencial trasera (32), se obtiene la fórmula diferencial central, la cual otorga una mayor precisión para el cálculo de una derivada, pero a su vez llega a incrementar el costo computacional.

$$f'(x = x_0) \approx \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0 - \Delta x)}{2\Delta x}. \quad (33)$$

al aplicar serie de Taylor se obtiene:

$$f'(x) = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} + O(\Delta x). \quad (34)$$

Este mismo proceso puede ser aplicado en derivadas de segundo orden, de tal forma que se obtiene:

$$f''(x) = \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{(\Delta x)^2} + O[(\Delta x)^2]. \quad (35)$$

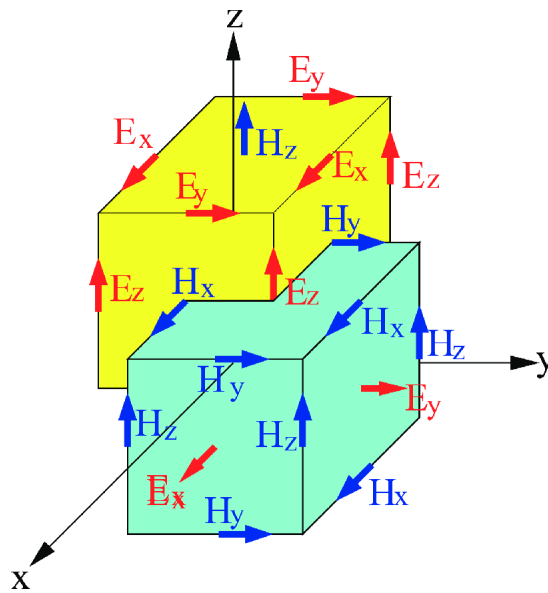
Este método fue adaptado posteriormente por Kane S. Yee Yee (1966), para resolver las ecuaciones de Maxwell en el dominio del tiempo, empleando su tercera (3) y cuarta (4) ecuación, junto con las relaciones constitutivas de la inducción magnética (\mathbf{B}) (5) y el desplazamiento

eléctrico (\mathbf{D}) (7).

Utilizando una doble rejilla conocida como la rejilla de Yee, donde hay dos cubos llamados celdas. Como se puede ver en la figura (7), la celda amarilla corresponde al campo eléctrico y la color cían al campo magnético, y el centro de cada celda coincide con la esquina una esquina de la otra. Kitsunezaki (2018)

Figura 7

Rejilla de Yee, empleada en su adaptación del método de diferencias finitas en el dominio del tiempo.



Nota. Adaptado de Kitsunezaki (2018).

A partir la rejilla de Yee, usando un sistema de coordenadas rectangulares se puede reescribir (3) y (4) como un sistema escalar de ecuaciones:

$$-\frac{\partial B_x}{\partial t} = \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z}, \quad (36)$$

$$-\frac{\partial B_y}{\partial t} = \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x}, \quad (37)$$

$$\frac{\partial B_z}{\partial t} = \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x}, \quad (38)$$

$$\frac{\partial D_x}{\partial t} = \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} - J_x, \quad (39)$$

$$\frac{\partial D_y}{\partial t} = \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} - J_y, \quad (40)$$

$$\frac{\partial D_z}{\partial t} = \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} - J_z, \quad (41)$$

donde cada ecuación (36)-(41) se puede resolver con fórmulas diferenciales como (35), pues son derivadas parciales cruzadas Yee (1966).

Posteriormente, el método de diferencias finitas en el dominio del tiempo, encierra la estructura que se esté analizando en una caja rectangular, y las divide en pequeñas celdas que serán analizadas como rejillas de Yee.

3.1.2. Otros métodos numéricos: método de momentos (MoM). Este también es conocido como el método de elementos de frontera (BEM), sin embargo toma el nombre de método de momentos (MoM), cuando es empleado en problemas de electromagnetismo. A diferencia del (FEM) y el (FDTD), este no analiza el comportamiento de toda la estructura, sino de únicamente su superficie. El método de momentos se basa en calcular potenciales eléctricos (φ) y el vector potencial magnético (\mathbf{A}), en distintos puntos (\mathbf{r}) a lo largo del espacio, para esto, usa las ecuaciones

de Maxwell en el dominio de la frecuencia (8)-(11), y la siguiente definición:

$$\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}, \quad (42)$$

y usando la relación constitutiva de la inducción magnética (\mathbf{B}) (5), junto con la tercera ecuación de Maxwell en el dominio de las frecuencias (10)

$$\nabla \times \mathbf{A} = \mu_0 \mu_r \mathbf{H}, \quad (43)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -j\omega (\nabla \times \mathbf{A}), \quad (44)$$

pasando todo a un solo lado, y sacando $\nabla \times$ como factor común se tiene:

$$\nabla \times (\mathbf{E} + j\omega \mathbf{A}) = 0 \quad (45)$$

A partir de la definición, del potencial eléctrico escalar, se obtiene la siguiente ecuación:

$$\mathbf{E} = -j\omega \mathbf{A} - \nabla \phi, \quad (46)$$

Para resolver (46), es necesario calcular el vector potencial magnético (\mathbf{A}) y el potencial eléctrico (ϕ). Para conseguir esto, se asume que la estructura a estudiar puede ser dividida en hilos muy delgados donde circula corriente, que serán analizados haciendo uso de una función de Green.

En la función de green se establece un punto de observación (\mathbf{r}), el cual genera una función de respuesta en base un punto (\mathbf{r}'), que es la fuente de origen. A continuación se encuentran las funciones de Green correspondientes al campo eléctrico y magnético.

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi\epsilon|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (47)$$

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\mu}{4\pi c|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (48)$$

De esta corriente circulando a lo largo del hilo, se genera un potencial eléctrico (Φ) y potencial magnético (\mathbf{A}), los cuales pueden ser expresados mediante integrales de superficie, por el principio de superposición lineal, lo que permitirá calcular el potencial total eléctrico y magnético:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \iint_s G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho_s(\mathbf{r}') dS', \quad (49)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \iint_s G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{j}(\mathbf{r}') dS'. \quad (50)$$

Siendo ρ_s la densidad de carga Jin (2010); Amirjani et al. (2022); Li et al. (2021).

A pesar de que los métodos numéricos mencionados poseen planteamientos matemáticos distintos, estos tres comparten el proceso de tomar una geometría y dividirla en pequeñas estructuras, con el fin de convertir el proceso de resolver una ecuación diferencial parcial, a esquemas matemáticos más sencillos como un sistema de ecuaciones lineales, los cuales un computador tiene

la capacidad de resolver en cuestión de minutos. Aún así, es necesario explicar las diferencias entre cada método y la razón para seleccionar el método de elementos finitos.

En primer lugar, cabe resaltar que la ecuación propuesta en (18), no se presenta dependencia del tiempo, debido a que se considera que los campos tienen un comportamiento armónico. Además de esto, se emplea como variable principal el campo eléctrico (\mathbf{E}), que surgió a partir de un planteamiento diferencial. Teniendo en cuenta estas razones, el método de elementos finitos (FEM) es el que mejor se ajusta al planteamiento matemático de la ecuación de la onda electromagnética armónica.

3.2. Herramientas de trabajo en la simulación

El caracterizar propiedades ópticas de nanoestructuras a través de una simulación ha tomado mucha popularidad en los últimos años, donde el objetivo común suele ser el caracterizar las propiedades de absorción y dispersión, junto al campo eléctrico cercano generado por una nanoestructura cuando se encuentra en resonancia de plasmones.

3.2.1. COMSOL Multiphysics®. COMSOL Multiphysics es un software de simulación de propósito general usado en diversos campos de la investigación científica e ingenieril. Este presenta diversos módulos enfocados en ciertos campos como el electromagnetismo, la mecánica de fluidos, la ingeniería química, y entre otros COMSOL-Multiphysics (2022). Teniendo el conocimiento físico necesario y adecuado, conociendo el método numérico empleado, e identificando que resultados se desean obtener, es posible sacar un buen provecho de este software.

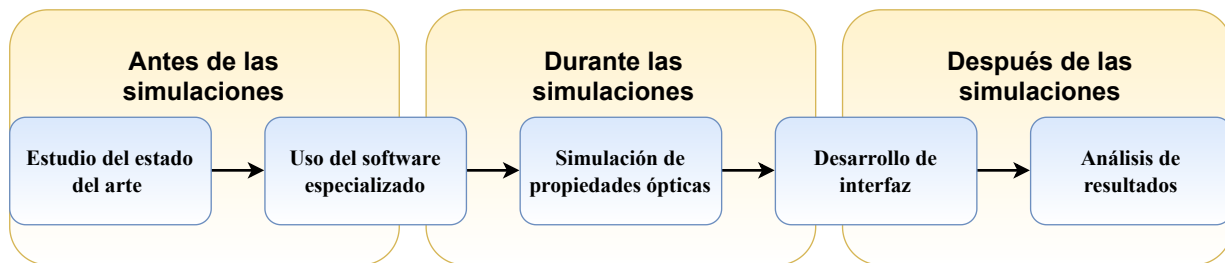
3.2.2. MATLAB App Designer. App Designer es un entorno integrado ofrecido por MathWorks® para el diseño de interfaces de usuario, con el que se puede crear aplicaciones MathWorks (2022). MATLAB se ha caracterizado por ser un lenguaje bastante usado en el ámbito de la ingeniería, debido a su capacidad para el tratamiento de datos, y ahora con esta nueva librería es posible el desarrollo de interfaces, por lo que una vez validados los resultados obtenidos en la simulación, estos serán trasladados a MATLAB.

4. Metodología

A continuación en la figura 8 , se encuentra un diagrama plasmando la metodología abordada a lo largo de este trabajo.

Figura 8

Diagrama de la metodología empleada.



La metodología planteada se enfoca en estudiar propiedades ópticas de nanoestructuras y como simularlas. Primero se adquirió conocimiento acerca del estado del arte para comprender el modelo físico y los parámetros que influyen en el, tales como: la geometría, material, tamaño, y otros que fueron explorados a lo largo del trabajo de investigación. Seguidamente, se hizo uso de un software especializado para realizar las simulaciones, el cual es COMSOL Multiphysics, con este fue posible establecer condiciones para simular y para usarlo era necesario comprender el fenómeno físico y los parámetros que influían en el comportamiento de este. Posteriormente, se realizaron las respectivas simulaciones y de estas se extrajeron los resultados de interés para analizarlos, los cuales son las propiedades de absorción, dispersión y extinción, junto con el comportamiento del campo eléctrico cercano para ver el comportamiento de cada geometría trabajada,

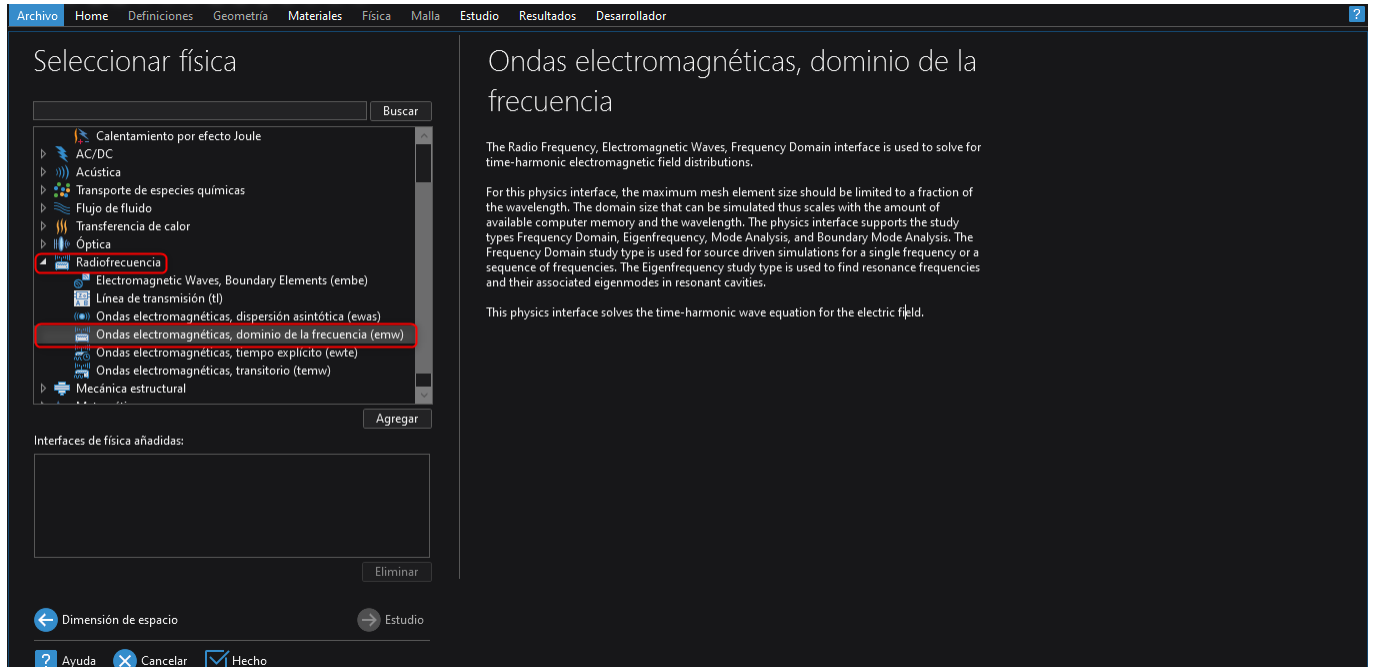
es decir, nanoesferas y nanobarras. Adicionalmente se desarrolló una interfaz para poder visualizar los resultados de la simulación de una forma mas interactiva, esto motivado a que como cada simulación fue realizada de manera individual, abrir un archivo por cada variación hecha sería poco práctico. Finalmente, se analizan las propiedades de absorción, dispersión y extinción en cada simulación para evaluar que tan buenas pueden ser estas para ser usadas como nanoantenas.

4.1. Software especializado

Se usó la versión 6.0 de COMSOL Multiphysics COMSOL-Multiphysic (2022), en este se puede crear un modelo en blanco o hacer uso de una plantilla si se conoce que tipo de fenómeno físico se desea simular. El primer paso para construir un modelo es definir un espacio dimensional de trabajo, el cual para este trabajo será 3D, es decir un dominio \mathbf{R}^3 (ver sección 3.1), adicionalmente se conoce el tipo de fenómeno físico a trabajar, como se estudió en capítulos anteriores 2.1, se trabajará con ondas electromagnéticas en el dominio de las frecuencias como se puede ver en la figura(9)

Figura 9

Selección y descripción del modelo físico: Ondas electromagnéticas, dominio de la frecuencia (emw).



4.1.1. Definición de parámetros globales. Los parámetros globales son valores que se definen al inicio, los cuales pueden ser usados posteriormente en la construcción del modelo. Para el caso de estas simulaciones es importante definir los parámetros referentes a las dimensiones de la nanoestructura, y los del dominio de trabajo y/o universo de estudio (ver fig 4). Al crear un parámetro se debe definir su nombre, una expresión que lo describa, un valor el cual se genera automáticamente al ingresar la expresión, y opcionalmente una descripción del parámetro. A Continuación en la tabla 2, se presenta los parámetros usados para la simulación de la interacción de una nanoestructura con una onda electromagnética incidente.

Tabla 2

Definición de parámetros globales para la construcción del modelo de una nanoesfera.

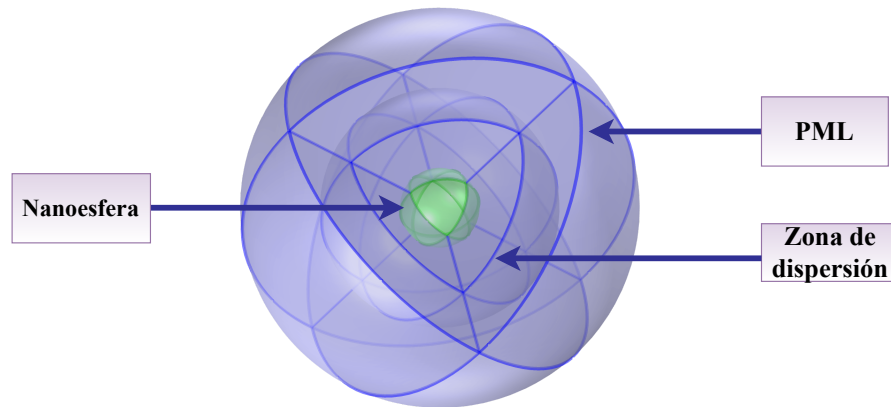
Nombre	Expresión	Valor	Descripción
E0	1[V/m]	1 V/m	Campo Eléctrico Incidente
radio	50[nm]	5E-8 m	Radio de la Nanoesfera
S_in	$E0^2/(2*Z0_cont)$	0.010132	Intensidad Incidente
L_min	400[nm]	4E-7 m	Longitud de Onda Inicial
L_Max	800[nm]	8E-7 m	Longitud de onda Final
f0	$c_const/Lmax$	3.7474E14 1/s	Frecuencia Inicial

4.1.2. Definición de geometría y materiales. Con estos parámetros definidos, el primer paso será realizar la construcción de la nanoesfera y el universo de estudio, para esto se creará una esfera cuyo tamaño sea cinco veces el radio definido, esto es debido a que el diseño asistido por computadora (CAD) de COMSOL permite generar capas, las cuales se construirán hacia dentro de la esfera. Por lo tanto se creará una esfera con dos capas internas dentro de la esfera, teniendo así un total de tres capas: la más externa la cual es conocida como Capas perfectamente acoplada (PML), la capa intermedia es la zona de dispersión, y finalmente la capa más interna la

cual corresponderá a la nanoestructura (ver fig 10).

Figura 10

Esquema del modelo de una nanoesfera en COMSOL con sus capas señaladas.



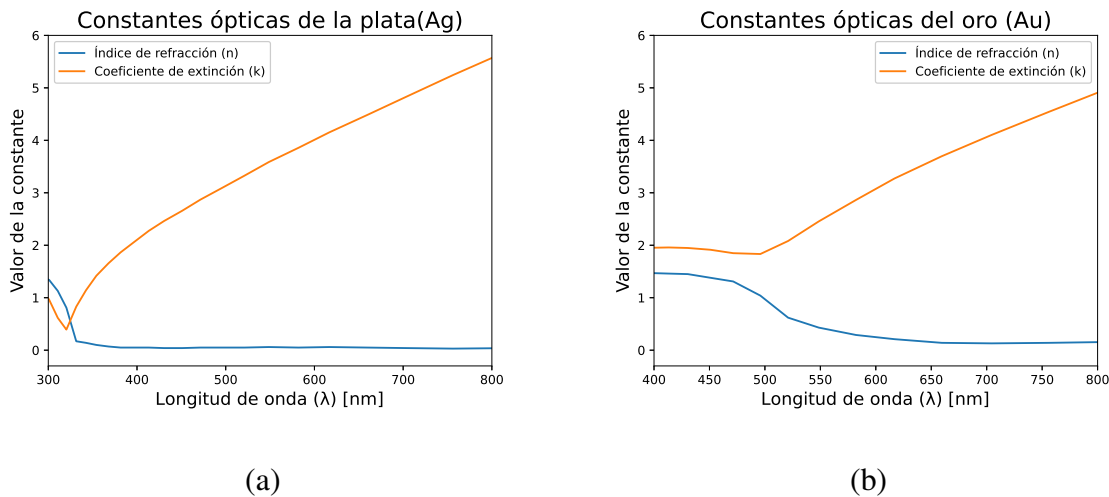
4.1.2.1. Capa perfectamente acoplada (PML). También conocida por su nombre en inglés Perfectly matched layer, es el universo de trabajo que se define para la simulación. Esta es un material artificial que tiene la propiedad de ser súper absorbente, es decir, permite el ingreso de la onda electromagnética y evita que esta se refleje o disperse antes de interactuar con la nanoestructura Jin (2010). El uso de una PML permite reducir considerablemente el tiempo en realizar cada simulación, ya que al no dispersarse la onda, la complejidad de la simulación se reduce enormemente y solo se enfoca en hacer cálculos del comportamiento al interactuar directamente con la nanoestructura.

4.1.2.2. Materiales dieléctricos a frecuencias ópticas. Otra parte importante del modelo a simular son los materiales empleados, los cuales fueron el oro y la plata para el caso

de las nanoestructuras. Como se mencionó anteriormente (ver sección 2.2.1), los metales ya no se comportan como un conductor perfecto, sino como un material dieléctrico. Para poder describir el comportamiento de estos metales se hizo uso de los valores experimentales calculados por Johnson y Christy Johnson and Christy (1972), donde ellos calcularon el índice de refracción (n) y el coeficiente de extinción (k) para estos materiales a diferentes longitudes de onda. Las muestras tomadas pasan a lo largo del espectro visible y sus alrededores, por lo que con una interpolación es posible obtener distintos valores de las constantes ópticas (ver fig 11)

Figura 11

Constantes ópticas para cada material (a) plata, (b) oro



La permitividad eléctrica de un material dieléctrico $\epsilon_e(\omega)$ el cual depende de la frecuencia se describe por la siguiente ecuación:

$$\epsilon_e(\omega) = \epsilon_1(\omega) + j\epsilon_2(\omega), \quad (51)$$

donde $\varepsilon_1(\omega)$ y $\varepsilon_2(\omega)$ pueden ser calculados de manera independiente bajo las siguientes ecuaciones:

$$\varepsilon_1(\omega) = n^2 - k^2, \quad (52)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = 2nk. \quad (53)$$

El resto del universo, es decir el medio, tiene su permitividad eléctrica descrita únicamente por el índice de refracción (n) y sin depender de la frecuencia, tal que

$$\varepsilon_m = n^2, \quad (54)$$

Para la realización de las simulaciones se empleó el vacío o aire, el cual su índice de refracción (n) equivale a 1.

4.1.3. Definición de variables. Es importante definir las variables que se van a estudiar y a su vez las respectivas ecuaciones usadas para calcularlas. Como se vio en secciones anteriores (ver sección 2.3.2) la dispersión y absorción se calculan mediante una integral superficial y volumétrica respectivamente. A continuación en la tabla 3 se puede observar la expresión para calcular cada sección eficaz.

Tabla 3

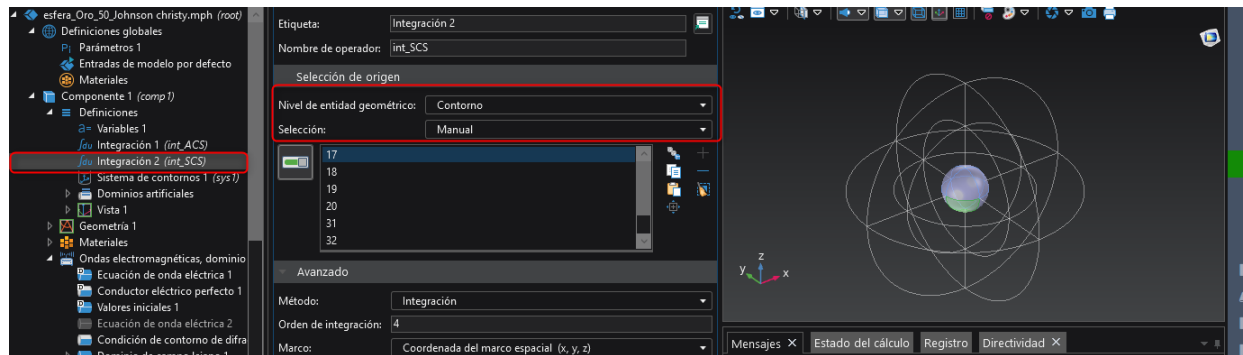
Cálculo de variables e integrales para los modelos simulados

Nombre	Expresión	Unidad	Descripción
scPoav	$\text{emw.relPoavx} * \text{nx} + \text{emw.relPoavy} * \text{ny} + \text{emw.relPoavz} * \text{nz}$	W/m^2	Producto punto del vector normal y el Poynting dispersado
ACS	$\text{int_ACS}(\text{emw.Qh})/S.\text{in}$	m^2	Absorción
SCS	$\text{int_SCS}(\text{scPoav})/S.\text{in}$	m^2	Dispersión
ECS	ACS + SCS	m^2	Extinción

Adicional a esto, es necesario definir en que lugar será calculada dicha integral. En el caso de la absorción es una integral que se aplicará sobre toda la nanoesfera, mientras que para la dispersión se coloca únicamente sobre su superficie (ver fig 12)

Figura 12

Selección de región de integración para la dispersión, superficie de la nanoesfera.



4.1.3.1. Onda electromagnética en el dominio de la frecuencia. Es necesario definir información acerca de la onda electromagnética que va a interactuar con la nanoestructura. Como se vio en secciones anteriores 2.2.1, en el sistema se define una onda armónica, la cual está

polarizada en una dirección y a su vez tiene un valor en cada componente. Para estas simulaciones se empleó una onda polarizada en la dirección (\hat{x}), y posee la componente de su campo eléctrico en eje z . A continuación se presenta la ecuación que describe a la onda electromagnética

$$\mathbf{E} = E_0 e^{[-i(\frac{2\pi}{\lambda})z]} \hat{x}, \quad (55)$$

usando la definición de el número de onda ($k = \frac{2\pi}{\lambda}$) se puede simplificar de tal forma que

$$\mathbf{E} = E_0 e^{(-ikz)} \hat{x}. \quad (56)$$

Para realizar la simulación es necesario realizar el mallado con el fin de aplicar el método de elementos de finitos y calcular el campo eléctrico en la nanoestructura, el como funciona y que tipo de malla se utilizó fue explicado a profundidad en una sección anterior (ver sección 3.1) . Adicionalmente se estableció un barrido paramétrico, es decir, se dio un rango de longitudes de onda (ver tabla 2) y en una única simulación se hizo el cálculo del campo eléctrico para distintas longitudes de onda.

4.2. Simulación de propiedades ópticas

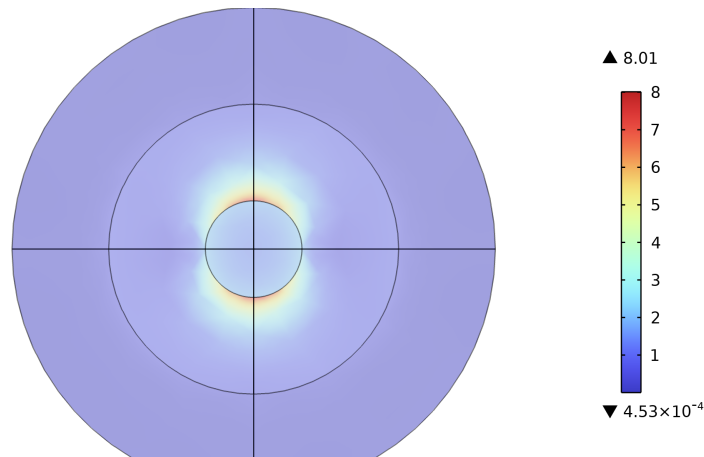
Una vez comprendido el flujo de trabajo de y requisitos para crear un modelo de una nanoestructura interactuando con una onda electromagnética, se procede a realizar las simulaciones con el fin de caracterizar el comportamiento de las propiedades ópticas. En este trabajo se realizaron simulaciones para dos geometrías las cuales fueron: nanoesferas y nanobarras, debido a que estas son las geometrías menos complejas a la hora de variar sus parámetros. En el caso de los materiales

usados, como se mencionó previamente (ver sección2.3) los materiales usados fueron el oro y la plata, debido a la capacidad de estos de funcionar como conductores.

4.2.1. Nanoesferas. Para las simulaciones de nanoesferas, se tiene en cuenta que el tamaño de una nanoesfera se ve afectado únicamente por su radio (**R**), por lo que se varió este parámetro entre 10 a 100 nanómetros para ambos materiales que fueron estudiados. COMSOL ofrece la posibilidad de generar distintos resultados del modelo, uno de ellos es el campo eléctrico cercano, el cual permite ver el comportamiento del campo eléctrico de la nanoestructura al haber interactuado con la onda electromagnética, como se puede ver a continuación en la figura 13.

Figura 13

Campo eléctrico cercano de una nanoesfera de oro de 50 nanómetros.

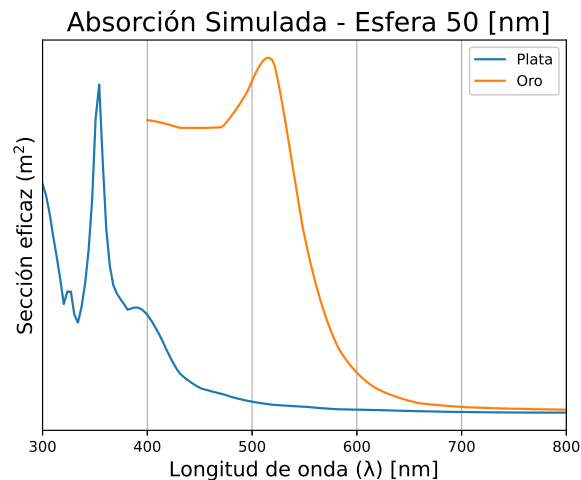


Adicional a esto, las integrales calculadas para las secciones eficaces (ver Tabla 3), permitieron identificar a que longitud de onda la nanoestructura absorbe, dispersa o extingue en mayor medida. Esto fue hecho para cada simulación , como se puede ver a continuación en la figura 14,

se puede ver el comportamiento de la propiedad de absorción para una esfera de 50 nanómetros cuando el material del que está hecha es oro o plata.

Figura 14

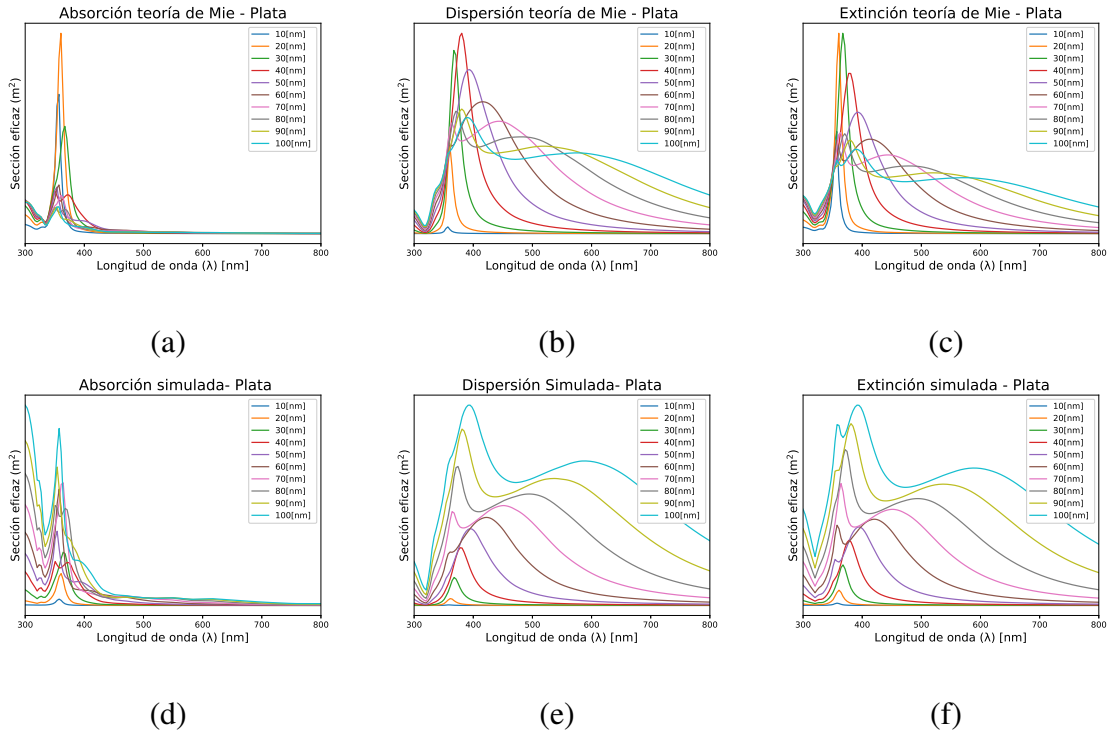
Sección eficaz de absorción para una esfera de 50 nanómetros de dos materiales: oro y plata.



Con los resultados de interés para las nanoesferas obtenidos, es necesario validar que estos sean correctos. Para ello se empleó de la teoría de Mie (ver sección 2.3.1), donde se hizo uso de la calculadora Scattnlly Peña and Pal (2009) elaborada en el lenguaje Python y la cual permite calcular las secciones eficaces de manera analítica. Con el fin de validar los resultados se hizo una comparación entre lo obtenido para cada una de las simulaciones, y lo conseguido a través de Scattnlly. Al exportar los resultados de Scattnlly se generó un código en python para graficar cada uno de los cálculos hechos, por lo que teniendo esto en mente se optó por realizar la comparación entre las esferas a través de este lenguaje. A continuación en la figura 15, se ve una comparación entre la absorción simulada y la teórica obtenida con Scattnlly.

Figura 15

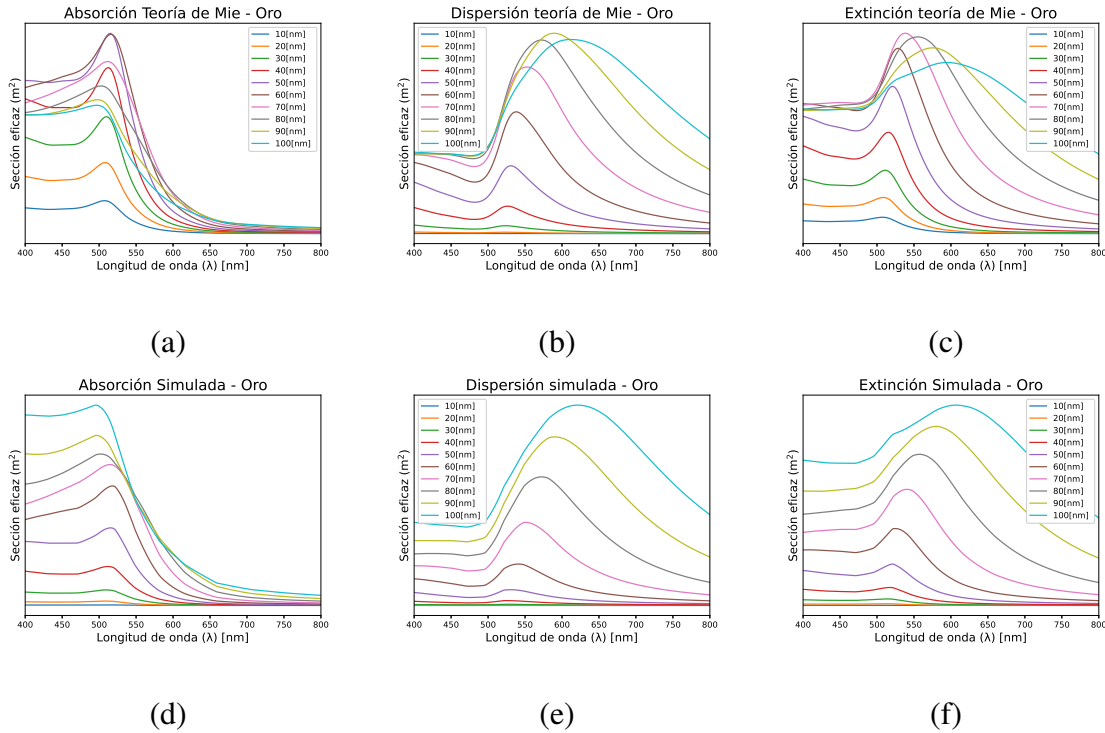
Sección eficaz para cada propiedad óptica en la plata (a-c) Teoría de Mie (d-f) Simulada.



Al observar las gráficas, se puede notar la similitud existente entre el cálculo teórico y la simulación, donde ambas tienen sus máximos de absorción, dispersión y extinción en alrededor de los 350 nanómetros. Similar pasa con el oro, como se puede ver a continuación en la figura 16

Figura 16

Sección eficaz para cada propiedad óptica en el oro (a-c) Teoría de Mie (d-f) Simulada.



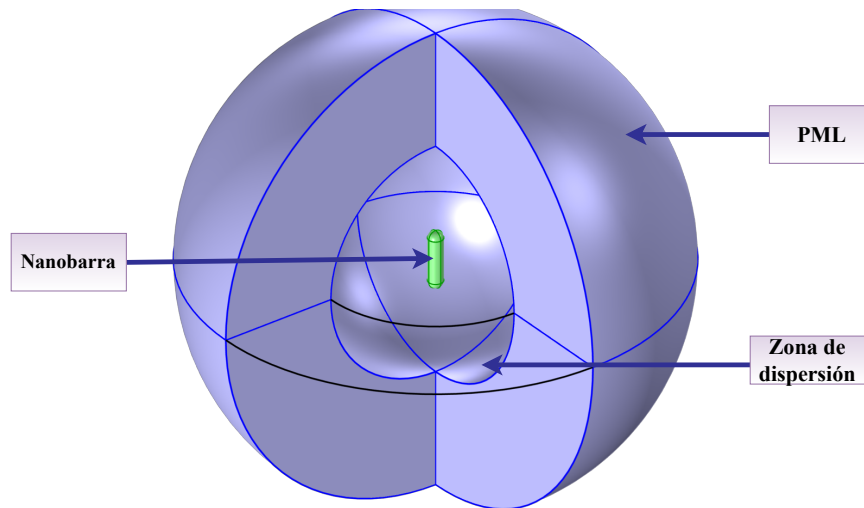
En el caso de el oro, se puede observar sus máximos en alrededor de los 500 a 520 nanómetros, de igual manera entre el cálculo teórico de Scattlnlay y lo obtenido en la simulación se encuentra un gran parecido, por lo que se puede validar que los resultados de la simulación en las nanoesferas son coherentes.

4.2.2. Nanobarras. El otro tipo de geometría estudiada fueron las nanobarras, estas a diferencia de las nanoesferas no tienen una solución analítica conocida que permita calcular sus propiedades de manera exacta como la teoría de Mie. Otra característica de las nanobarras es que su geometría no depende únicamente de un radio sino a su vez de un largo, por lo que es necesario

tener en cuenta al realizar simulaciones. A continuación en la figura 17, se puede ver el modelo de una nanobarra dentro de una PML.

Figura 17

Esquema del modelo de una nanobarra en COMSOL con sus capas señaladas.



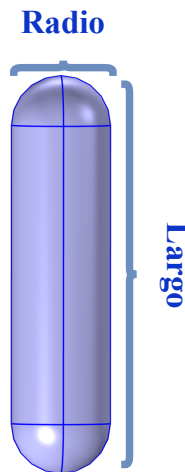
Se completó el montaje de la nanobarra y se asignaron los materiales y las propiedades del medio de manera similar a como se hizo con las nanoesferas. Sin embargo, el comportamiento de sus propiedades ópticas es diferente al de las nanoesferas, por lo que es necesario estudiar acerca de estas antes para entenderlas. Como se mencionó anteriormente estas dependen de su radio y su largo, el variar estas dos propiedades sin tener en cuenta una métrica hace que se puedan generar muchas simulaciones sin llegar a resultados concluyentes, por lo que al trabajar con nanobarras se introduce el concepto de la relación de aspecto (A_r), el cual se denota como la razón entre el largo de la barra (l_r) y su radio (R_r)

$$A_r = l_r/R_r. \quad (57)$$

A continuación en la figura 18, se puede ver una nanobarra con relación de aspecto de 6.0 elaborada en COMSOL.

Figura 18

Esquema de una nanobarra construida en COMSOL con sus sectores señalados.



Uno de los trabajos consultados para entender el comportamiento óptico de las nanobarras es del investigador Link Link et al. (1999), donde se muestra como la relación de aspecto y el valor del medio (ϵ_m) (ver eq 54) en el que se encuentre la nanoestructura influyen en la posición de sus máximos de absorción, dispersión y extinción, más concretamente, entre mayor sea el largo de la nanobarra y el valor del medio, sus máximos irán hacia el infrarrojo (ver fig 1). Este comportamiento es denotado como corrimiento hacia el rojo.

Con el objetivo de validar los resultados de las nanobarras, se compara con los valores obtenidos por la investigadora Olson y su equipo Olson et al. (2015b), donde estudia nanobarras de oro con relación de aspecto de 2.1 y 3.0 que se encuentran en un medio (ϵ_m) equivalente a 2.25. Usando la ecuación (54) se puede determinar que el índice de refracción (n) del medio será 1.5

$$\epsilon_m = n^2,$$

despejando el índice de refracción (n)

$$n_m = \sqrt{\epsilon_m}, \quad (58)$$

y reemplazando los valores

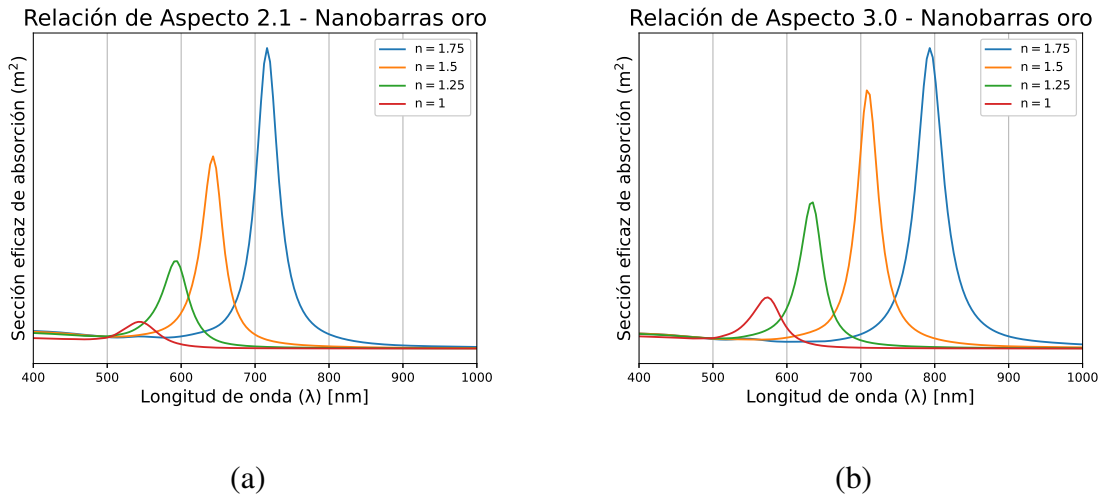
$$n_m = \sqrt{2,25},$$

$$n_m = 1,5.$$

Teniendo en cuenta esto, con el fin de validar los resultados obtenidos para las nanobarras se tomaron nanobarras de oro con relación de aspecto de 2.1 y 3.0, y se varió el valor de su medio para comprobar que el comportamiento de las simulaciones coincida con lo planteado en las investigaciones de los trabajos mencionados. A continuación en la figura 19 se puede ver las nanobarras de oro y sus máximos de absorción en distintos medios, tanto para cuando su relación de aspecto es 2.1 y cuando es 3.0 (ϵ_m)

Figura 19

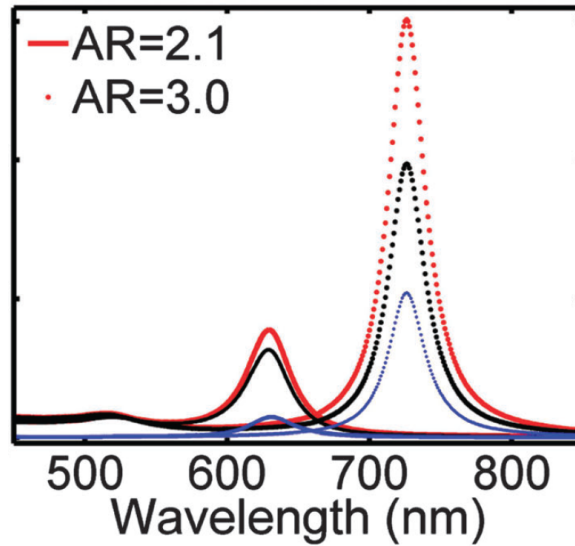
Sección eficaz de absorción para nanobarras de oro en diferentes medios (a) Relación de aspecto 2.1 (b) Relación de aspecto 3.0.



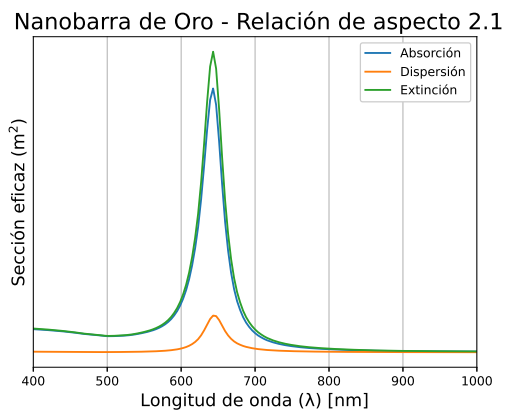
Se puede observar que a medida que se varió el medio, los máximos de absorción de la barra se desplazaron hacia la derecha, por lo que la simulación presenta un comportamiento coherente. Adicional de esto, se realizó una comparación directa con los resultados obtenidos por Olson y su equipo Olson et al. (2015b), como se puede ver en la figura 20, y estas mismas condiciones fueron replicadas en la simulación, como se puede apreciar en la figura 21

Figura 20

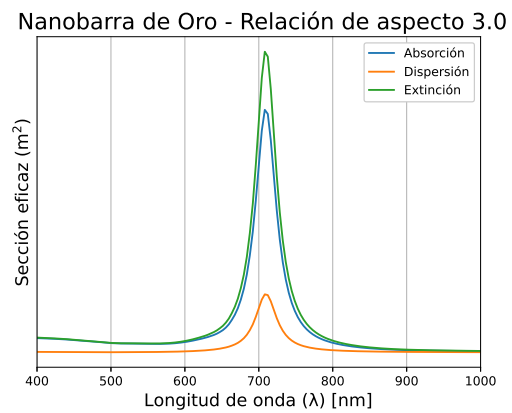
Absorción, extinción y dispersión para nanobarras con relación de aspecto de 2.1 y 3.0, con un medio cuyo índice de refracción es $n = 1,5$.

**Figura 21**

Secciones eficaces de absorción, dispersión y extinción de nanobarras de oro (a) Relación de aspecto 2.1 (b) Relación de aspecto 3.0.



(a)



(b)

5. Resultados

Con los resultados de las simulaciones validados, se procede a realizar la interfaz con el fin de recopilar y analizar lo obtenido en las simulaciones.

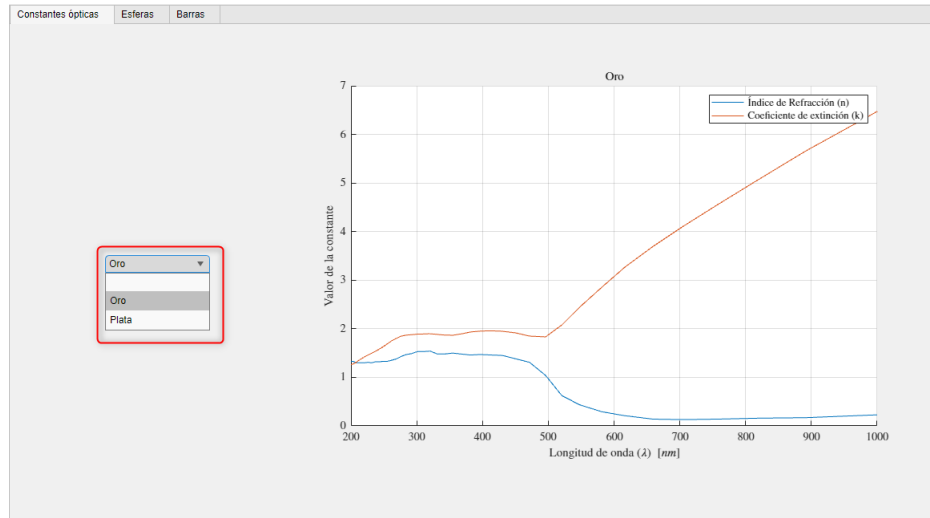
5.1. Desarrollo de la interfaz

Ahora que se han completado las simulaciones y han sido validadas, se elaboró una interfaz gráfica llamada: «Recopilador de propiedades ópticas de nanoestructuras (RPON)». Para el desarrollo de esta interfaz se empleó la toolbox de MATLAB app-designer, con la cual se elaboró un entorno donde se puede interactuar con los resultados obtenidos en las simulación, permitiendo no solo interpretarlos de una manera más cómoda, sino a su vez tenerlos organizados, esto debido a que cada simulación elaborada en COMSOL generaba un archivo independiente. La importancia de esta interfaz radica en que se busca seguirla nutriendo con mas resultados al trabar con nuevas geometrías y/o materiales, por lo que esta interfaz sirve como primer paso para generar una base datos solida con los resultados diversas simulaciones.

Al abrir la interfaz lo primero que se ve es una pestaña para ver la constantes ópticas usadas en la simulación, como se ve en la figura 22, esta información es importante ya que hay constantes ópticas de diversos autores, a su vez que existen diversos metales.

Figura 22

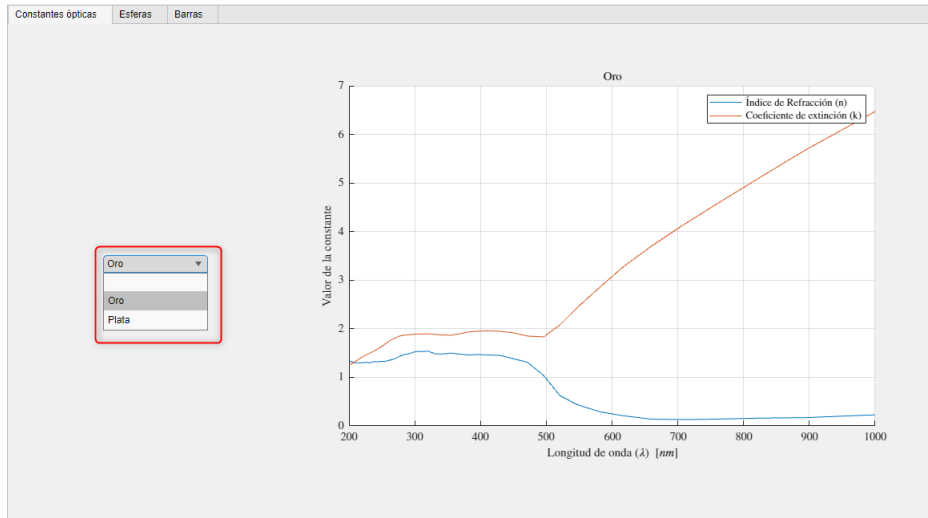
Vista de la interfaz - Constantes ópticas de los materiales usados.



Al desplazarse en las pestañas de arriba, se puede seleccionar alguna de las geometrías trabajadas, las cuales son esferas y barras. En este caso se muestra se observa la sección de las esferas, como se puede distinguir en la figura 23. En esta ventana hay bastante información, por lo que a continuación se detalla cada parte.

Figura 23

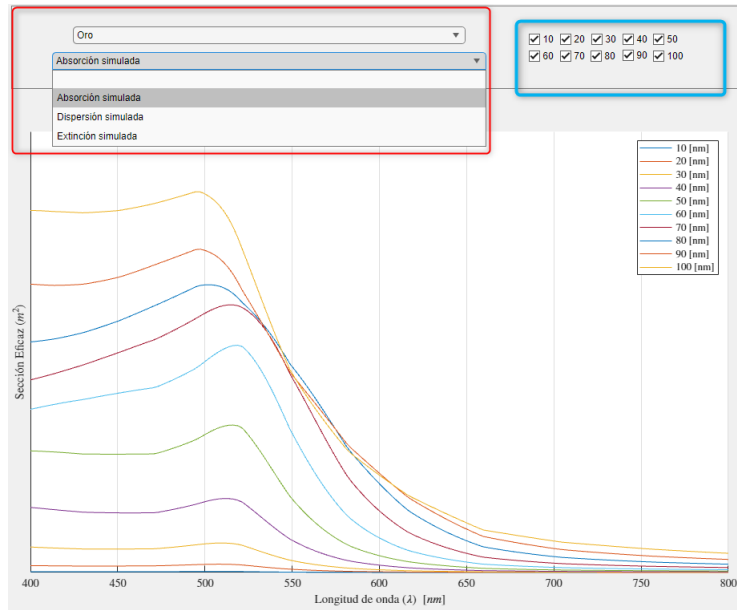
Vista de la interfaz - Resultados de las nanoesferas simuladas.



La parte de la izquierda de la interfaz corresponde a las propiedades ópticas, como se puede apreciar en el rectángulo rojo de la figura, hay dos cuadros de lista, el primero permite seleccionar uno de los materiales simulados, y la segunda permite seleccionar cual de las tres propiedades se desean observar, es decir, la absorción, la dispersión y la extinción.

Figura 24

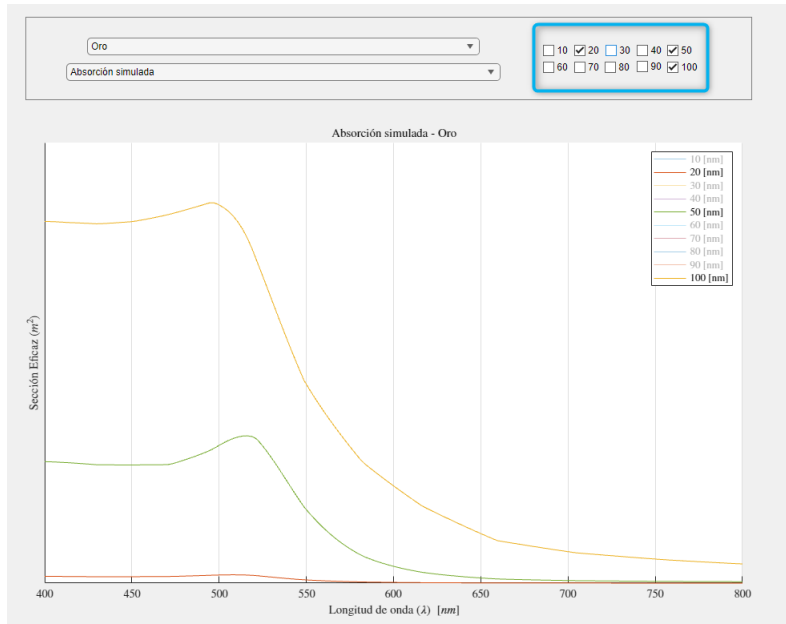
Vista de la interfaz - Cuadros de lista.



Además de ello, en el rectángulo azul se localizan las casillas de verificación, estas nos permiten desmarcar y ocultar curvas de las gráfica, permitiendo comparar solamente dos simulaciones o la cantidad que sea deseada, como se puede ver a continuación en la figura 25 .

Figura 25

Vista de la interfaz - casillas de verificación.



Otra parte de la interfaz es la correspondiente el campo eléctrico cercano, en este caso se tomó una simulación de cada geometría y se generó una animación para ver el comportamiento del campo eléctrico cercano a distintas longitudes de onda, como se muestra en la figura 26 . Esta animación se reproduce automáticamente, pero usando la casilla de verificación es posible que esta sea controlada manualmente por el usuario.

Adicionalmente, la interfaz cuenta con una característica adicional que muestra la longitud de onda en la que se produce el valor máximo de absorción, dispersión o extinción para cada simulación realizada, según la opción seleccionada. Esta información se puede encontrar en una tabla ubicada en la esquina inferior izquierda de la pantalla. A continuación en la figura 28 se pueden ver los valores máximos para la absorción de las nanobarras de plata.

Figura 28

Vista de la interfaz - Tabla de los picos de absorción.

Picos de absorción									
1,5 AR	2,0 AR	2,5 AR	3,0 AR	4,0 AR	5,0 AR	6,0 AR	8,0 AR	10 AR	13 AR
521.6216	541.8919	558.1081	574.3243	602.7027	639.1892	675.6757	760.8108	841.8919	922.9730

5.2. Análisis de resultados

A continuación se realiza un análisis a los resultados obtenidos, con el fin de evaluar el comportamiento de las nanoestructuras para funcionar como nanoantenas. Para ello se tendrá en cuenta la ubicación de sus picos de absorción, dispersión, y extinción, junto con como el comportamiento de estos se ve influenciado al variar el tamaño y material de cada geometría.

5.2.1. Análisis de las nanoesferas. En el caso de las nanoesferas se observa los valores máximos de absorción, dispersión y extinción, según el radio y el material que estas tuvieran, como se puede ver a continuación en la tabla 4 y la figura 29.

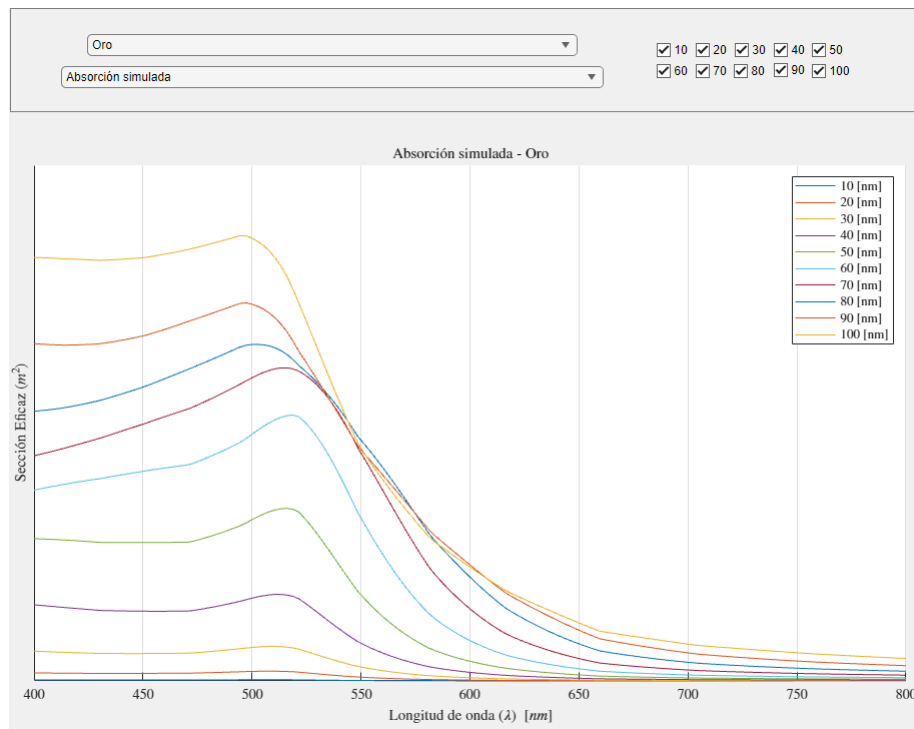
Tabla 4

Pico de absorción en nanoesferas de oro.

Picos de absorción - nanoesferas de oro									
10 [nm]	20 [nm]	30 [nm]	40 [nm]	50 [nm]	60 [nm]	70 [nm]	80 [nm]	90 [nm]	100 [nm]
508.1081	508.1081	508.1081	510.8108	516.2162	518.9189	513.5135	502.7027	497.2973	494.5946

Figura 29

Comportamiento de la absorción en las nanoesferas de oro.

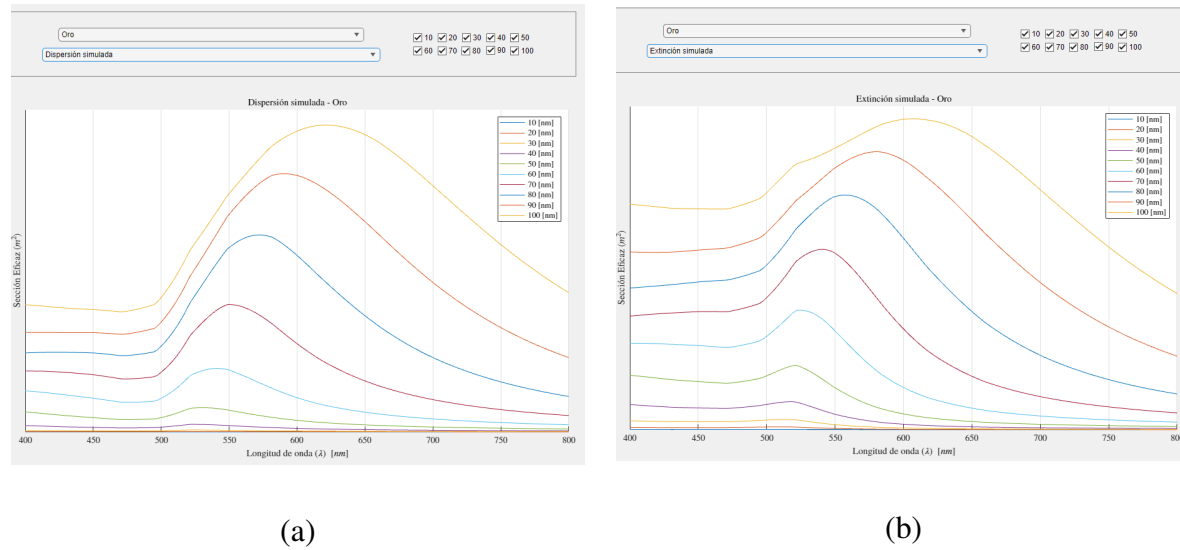


En este caso los valores máximos de absorción de las nanoesferas de oro se encuentran en alrededor de los 500 nanómetros, y este comportamiento se ve afectado ligeramente al variar el radio de las nanoesferas. Adicional a esto en la figura 30, se adjunta la dispersión y extinción

simuladas para esferas de oro.

Figura 30

Propiedades ópticas de nanoesferas de oro (a) Dispersión (b) Extinción.



Es interesante notar como esta dispersión se encuentra en el rango de los 550 nanómetros, y al aumentar el tamaño de la nanoesfera va aumentando hasta los 600 nanómetros, como se ve en la tabla 5, de igual manera esto influye en el comportamiento de la extinción, ocasionando esta se desplace a medida que aumenta el radio (ver tabla 6).

Tabla 5

Pico de dispersión en nanoesferas de oro.

Picos de dispersión - nanoesferas de oro									
10 [nm]	20 [nm]	30 [nm]	40 [nm]	50 [nm]	60 [nm]	70 [nm]	80 [nm]	90 [nm]	100 [nm]
521.6216	521.6216	521.6216	524.3243	529.7297	540.5405	551.3514	572.9730	589.1892	621.6216

Tabla 6

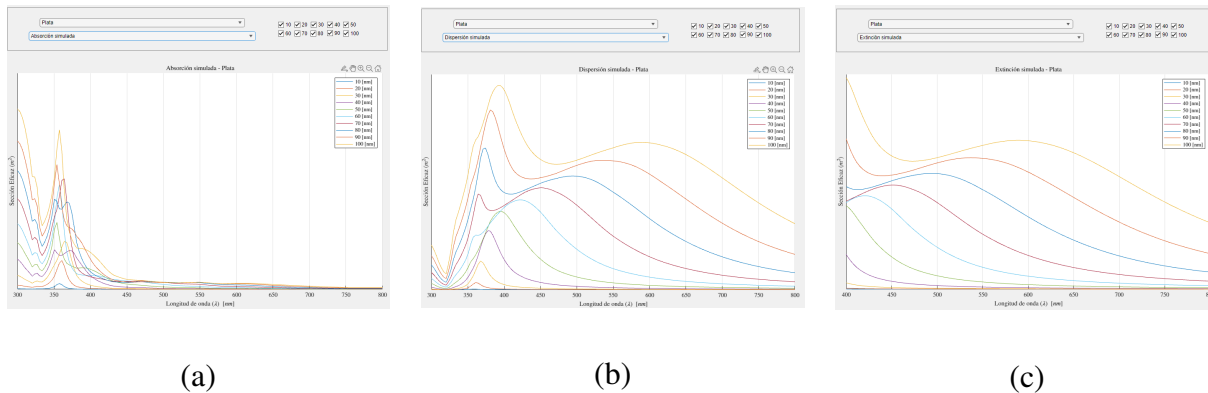
Pico de extinción en nanoesferas de oro.

Picos de extinción - nanoesferas de oro									
10 [nm]	20 [nm]	30 [nm]	40 [nm]	50 [nm]	60 [nm]	70 [nm]	80 [nm]	90 [nm]	100 [nm]
508.1081	510.8108	513.5135	518.9189	521.6216	524.3243	540.5405	556.7568	581.0811	608.1081

De igual manera en las nanoesferas de plata, se presenta el comportamiento de sus propiedades de absorción, dispersión y extinción, como se puede ver en la figura 31.

Figura 31

Propiedades ópticas de nanoesferas de plata (a) Absorción (b) Dispersión (c) Extinción.



Similar a las nanoesferas de oro, estas tienden a mantener sus máximos en un rango de valores que para este caso van desde los 350 a los 400 nanómetros, dichos picos de absorción (ver tabla 7), dispersión (ver tabla 8) y extinción (ver tabla 9).

Tabla 7*Pico de absorción en nanoesferas de plata.*

Picos de absorción- nanoesferas de plata									
10 [nm]	20 [nm]	30 [nm]	40 [nm]	50 [nm]	60 [nm]	70 [nm]	80 [nm]	90 [nm]	100 [nm]
357.4324	360.8108	364.1892	350.6757	354.0541	357.4324	364.1892	300.0000	300.0000	300.0000

Tabla 8*Pico de dispersión en nanoesferas de plata.*

Picos de dispersión - nanoesferas de plata									
10 [nm]	20 [nm]	30 [nm]	40 [nm]	50 [nm]	60 [nm]	70 [nm]	80 [nm]	90 [nm]	100 [nm]
357.4324	360.8108	367.5676	377.7027	394.5946	421.6216	452.0270	374.3243	381.0811	394.5946

Tabla 9*Pico de extinción en nanoesferas de plata.*

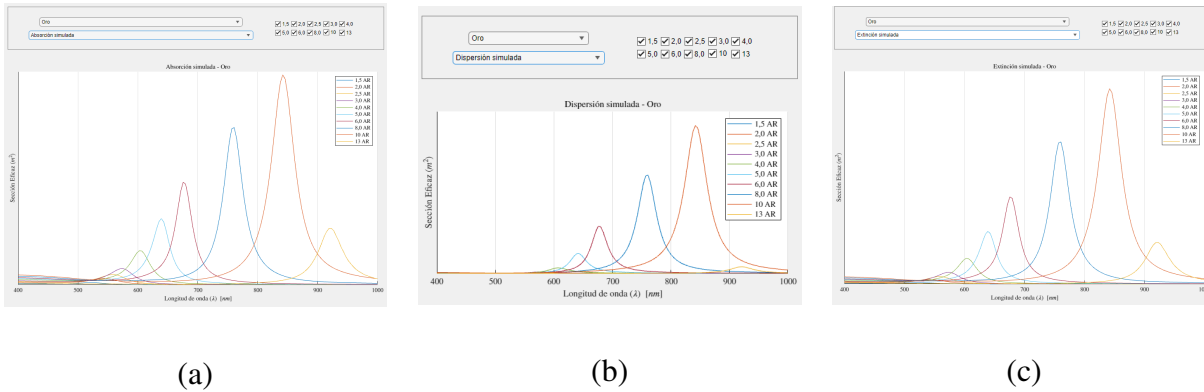
Picos de extinción - nanoesferas de plata									
10 [nm]	20 [nm]	30 [nm]	40 [nm]	50 [nm]	60 [nm]	70 [nm]	80 [nm]	90 [nm]	100 [nm]
357.4324	360.8108	367.5676	377.7027	394.5946	421.6216	452.0270	374.3243	381.0811	394.5946

5.2.2. Análisis de las nanobarras. Ahora se realizó el análisis de la segunda geometría simulada, en el caso de las nanobarras su relación de aspecto fue aumentada progresivamente (A_r), teniendo en cuenta que una nanobarra con relación de aspecto 1.0 sería equivalente a una nanoesfera, se empieza a aumentar de manera progresiva la relación de aspecto partiendo

desde 1.5. A continuación en la figura 32, se puede ver las propiedades ópticas de las nanobarras de oro.

Figura 32

Propiedades ópticas de nanobarras de oro (a) Absorción (b) Dispersión (c) Extinción.



Es relevante notar que a mayor relación de aspecto, más corrimiento hacia el rojo presenta los picos de absorción, a continuación en la tabla 10, se presentan los picos de absorción para las nanobarras de oro, junto con los picos de dispersión (ver tabla 11) y de extinción (ver tabla 12).

Tabla 10

Pico de absorción en nanobarras de oro.

Picos de absorción - nanobarras de oro									
1.5 Ar	2.0 Ar	2.5 Ar	3.0 Ar	4.0 Ar	5.0 Ar	6.0 Ar	8.0 Ar	10.0 Ar	13.0 Ar
521.6216	541.8919	558.1081	574.3243	602.7027	639.1892	675.6757	760.8108	841.8919	922.9730

Tabla 11*Pico de dispersión en nanobarras de oro.*

Picos de dispersión - nanobarras de oro									
1.5 Ar	2.0 Ar	2.5 Ar	3.0 Ar	4.0 Ar	5.0 Ar	6.0 Ar	8.0 Ar	10.0 Ar	13.0 Ar
533.7838	554.0541	566.2162	578.3784	606.7568	643.2432	675.6757	760.8108	841.8919	918.9189

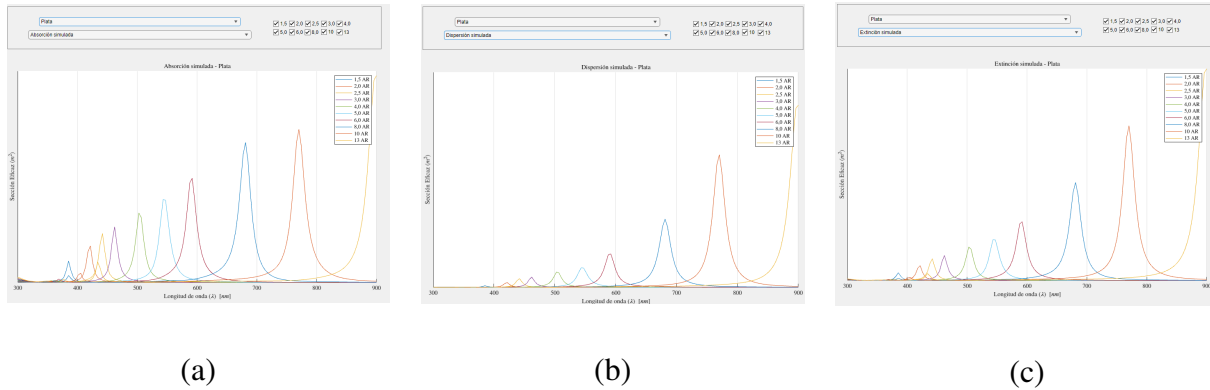
Tabla 12*Pico de extinción en nanobarras de oro.*

Picos de extinción - nanobarras de oro									
1.5 Ar	2.0 Ar	2.5 Ar	3.0 Ar	4.0 Ar	5.0 Ar	6.0 Ar	8.0 Ar	10.0 Ar	13.0 Ar
521.6216	541.8919	558.1081	574.3243	602.7027	639.1892	675.6757	760.8108	841.8919	922.9730

Esta misma tendencia se presenta en las nanobarras de plata, con la diferencia que estas presentan un corrimiento hacia el rojo de mayor intensidad que las nanobarras de oro, por lo que al llegar relaciones de aspecto (A_r) de 10.0, el pico de una nanobarra de plata se encontrará en una longitud de onda mayor al de una nanobarra de oro. Esto puede notar a continuación en la figura 33.

Figura 33

Propiedades ópticas de nanobarras de plata (a) Absorción (b) Dispersión (c) Extinción.



A continuación se presenta los valores donde se encuentra los picos para las propiedades de absorción (ver tabla 13), dispersión (ver tabla 14) y extinción (ver tabla 15).

Tabla 13

Pico máximo de absorción en nanobarras de plata.

Picos de absorción - nanobarras de plata									
1.5 Ar	2.0 Ar	2.5 Ar	3.0 Ar	4.0 Ar	5.0 Ar	6.0 Ar	8.0 Ar	10.0 Ar	13.0 Ar
385.1351	421.6216	441.8919	462.1622	502.7027	543.2432	591.8919	681.0811	770.2703	900.0000

Tabla 14

Pico máximo de dispersión en nanobarras de plata.

Picos de dispersión - nanobarras de plata									
1.5 Ar	2.0 Ar	2.5 Ar	3.0 Ar	4.0 Ar	5.0 Ar	6.0 Ar	8.0 Ar	10.0 Ar	13.0 Ar
385.1351	421.6216	441.8919	462.1622	502.7027	543.2432	591.8919	681.0811	770.2703	900.0000

Tabla 15

Pico máximo de extinción en nanobarras de plata.

Picos de extinción - nanobarras de plata									
1.5 Ar	2.0 Ar	2.5 Ar	3.0 Ar	4.0 Ar	5.0 Ar	6.0 Ar	8.0 Ar	10.0 Ar	13.0 Ar
385.1351	421.6216	441.8919	462.1622	502.7027	543.2432	591.8919	681.0811	770.2703	900.0000

Al concluir el análisis de los resultados de las nanobarras, es relevante destacar que, en contraste con las nanoesferas, las propiedades de absorción y dispersión de las nanobarras exhiben un pico en la misma longitud de onda. En cambio, en las nanoesferas, la dispersión muestra un corrimiento hacia el rojo mayor que la absorción, a pesar de tratarse de la misma nanoestructura

6. Conclusiones y trabajo futuro

El estudio de las ecuaciones de Maxwell y las propiedades ópticas de los metales permitió adquirir el conocimiento necesario para simular el fenómeno de resonancia de plasmones. En el caso de las nanoesferas, es importante destacar que sus picos de resonancia se ubican en el rango de 350 nanómetros y 500 nanómetros para la plata y el oro, respectivamente, y que un cambio en el radio provoca un leve desplazamiento hacia el infrarrojo. Por otro lado, la relación de aspecto de las nanobarras tiene un impacto mayor, ya que un aumento en este parámetro provoca un corrimiento hacia el infrarrojo mucho más marcado.

Las simulaciones realizadas fueron validadas y permiten una adecuada caracterización de las propiedades ópticas de las nanoestructuras. Es importante destacar que este fenómeno es difícil de reproducir en la realidad, ya que se requiere de un equipo especializado y el costo de fabricación de las nanoestructuras con estos metales es alto. Por esta razón, el uso de simulaciones se convierte en una herramienta fundamental para el diseño de nanoestructuras, permitiendo replicar de manera precisa este fenómeno electromagnético.

La implementación de una interfaz permitió una mejor comprensión y organización de los resultados obtenidos, ya que eran numerosos y los archivos generados por cada simulación eran pesados, alcanzando aproximadamente 1 gigabyte cada uno. La importancia de esta interfaz radica en que al haber una gran cantidad de resultados, estos podrían generar confusión y se elimina la necesidad de tener el software de simulación instalado en un equipo para poder estudiarlos en profundidad.

La relevancia de las herramientas computacionales se incrementa cada día, y es crucial ser capaz de aprovechar al máximo sus beneficios. Con estas herramientas, es posible simplificar exponencialmente la realización de diversas tareas y procesos, incluyendo desde el diseño y la simulación hasta el análisis de datos y la toma de decisiones. La capacidad de utilizar herramientas computacionales adecuadamente puede aumentar la eficiencia en una amplia variedad de campos, incluyendo la investigación científica, la ingeniería, el desarrollo de software, y el análisis de datos.

Con respecto al trabajo futuro, se proponen las siguientes ideas para mejorar lo realizado en este proyecto:

- Sería recomendable trabajar con una variedad más amplia de geometrías, ya que se ha observado que incluso entre esferas y barras hay un comportamiento notablemente diferente.
- Se podría considerar el uso de otros materiales en las simulaciones, incluyendo aleaciones que consisten en mezclas de dos o más metales.
- Con el fin de hacer los resultados más accesibles, sería conveniente montar la interfaz en un servidor para que cualquier persona pueda acceder a ella y visualizar los resultados.

Finalmente, cabe mencionar que el desarrollo de este trabajo permitió la realización de una ponencia en el « Congreso Internacional de Ciencias Básicas Aplicadas CICBA 2022 », y a su vez la presentación de un artículo científico para la revista «Journal of Physics: Conference Series», el cual se encuentra remitido.

7. Apéndice

Apéndice A. Script para cálculo de valores máximos y error entre nanoesferas simuladas y calculadas con la teoría de Mie

```
1 #Se extraen los nombres de las columnas (wavelength, Qabs, Qsca, Qext)
2 x = datascat10[datascat10.dtype.names[0]]
3 x2 = datacom10[datacom10.dtype.names[0]]
4 ''' vectores para almacenar el calculo de el error absoluto entre los
      maximos, los valores maximos teoricos y los valores maximos simulados
      respectivamente '''
5 error = []
6 vt_max = []
7 vs_max = []
8 #Se guardan en un vector todos los valores de teoricos y simulados
9 valores_teoricos = [scaPlataMie10, scaPlataMie20, scaPlataMie30,
10                    scaPlataMie40, scaPlataMie50, scaPlataMie60, scaPlataMie70,
11                    scaPlataMie80, scaPlataMie90, scaPlataMie100]
12 valores_simulados = [scaComPlata10, scaComPlata20, scaComPlata30,
13                    scaComPlata40, scaComPlata50, scaComPlata60, scaComPlata70,
14                    scaComPlata80, scaComPlata90, scaComPlata100]
15 # Encontrar cada maximo y guardarlo en el vector correspondiente
16 for i in range(0, len(valores_teoricos)):
17     vti, = np.where(valores_teoricos[i] == np.max(valores_teoricos[i]))
18     vt_max.append(x[vti][0])
```

```
15 vsi, = np.where(valores_simulados[i] == np.max(valores_simulados[i]))
16 vs_max.append(x2[vsi][0])
17 #calculo del error y guardarlo en un vector
18 error.append(abs((vt_max[i] - vs_max[i])/vs_max[i]*100))
19 # se imprimen los valores maximos y el error relativo entre la teoria de
    Mie y lo obtenido por la simulacion
20
21 print(error)
22 print(vt_max)
23 print(vs_max)
24
```

Referencias Bibliográficas

- Amirjani, A., Zamanpour Abyaneh, P., Masouleh, P., and Sadrnezhaad, S. (2022). Finite and boundary element methods for simulating optical properties of plasmonic nanostructures. *Plasmonics*, pages 1–12. doi: 10.1007/s11468-022-01596-w.
- Biagioni, P., Huang, J.-S., and Hecht, B. (2012). Nanoantennas for visible and infrared radiation. *Reports on Progress in Physics*, 75(2):024402. doi: 10.1088/0034-4885/75/2/024402.
- Bohren, C. F. and Huffman, D. R. (2008). *Absorption and scattering of light by small particles*, chapter 5, 7. John Wiley & Sons. doi: 10.1002/9783527618156.
- COMSOL-Multiphysic (2022). Comsol multiphysics® simulation software.
- Frank, H. and Jailbird (2005). Electromagnetic spectrum. File: Electromagnetic spectrum-es.svg.
- Giannini, V., Fernández-Domínguez, A. I., Heck, S. C., and Maier, S. A. (2011). Plasmonic nanoantennas: fundamentals and their use in controlling the radiative properties of nanoemitters. *Chemical reviews*, 111(6):3888–3912. doi: 10.1021/cr1002672.
- Gómez, P. and González, E. (2012). *Las ecuaciones de Maxwell*. eltamiz. book: EqMaxwell.
- Hnri, J. (2009). Metal orb vector. File: Metal Orb Vector.svg.
- Hulla, J., Sahu, S., and Hayes, A. (2015). Nanotechnology: History and future. *Human & Experimental Toxicology*, 34(12):1318–1321. doi: 10.1177/0960327115603588.

- Jackson, J. D. (1999). *Classical electrodynamics*. Wiley, New York, NY, 3rd edition.
- Jin, J.-M. (2010). *Theory and Computation of Electromagnetic Fields*. Wiley-IEEE Press, 1 edition. book: book/5628376.
- Johnson, P. B. and Christy, R. W. (1972). Optical constants of the noble metals. *Physical Review B*, 6(12):4370–4379. doi: 10.1103/physrevb.6.4370.
- Kelly, K., Coronado, E., Zhao, L., and Schatz, G. (2003). The optical properties of metal nanoparticles: The influence of size, shape, and dielectric environment. *Journal of Physical Chemistry B*, 107(3):668–677. doi: 10.1021/jp026731y.
- Kitsunezaki, N. (2018). *Electro-magnetic Simulation Based on the Integral Form of Maxwell's Equations*, chapter 5. IntechOpen. doi: 10.5772/intechopen.81338.
- Li, J., Zhang, L., and Qin, Q.-H. (2021). A regularized method of moments for three-dimensional time-harmonic electromagnetic scattering. *Applied Mathematics Letters*, 112:106746. doi: 10.1016/j.aml.2020.106746.
- Link, S., Mohamed, M. B., and El-Sayed, M. A. (1999). Simulation of the optical absorption spectra of gold nanorods as a function of their aspect ratio and the effect of the medium dielectric constant. *The Journal of Physical Chemistry B*, 103(16):3073–3077.
- Maier, S. A. (2007). Localized surface plasmons. In *Plasmonics: fundamentals and applications*, pages 65–88. Springer. doi: 10.1007/0-387-37825-1.

MathWorks (2022). Matlab app designer.

Mencarelli, E., Fanò, L., Tarpani, L., and Latterini, L. (2015). Modelling the optical properties of metal nanoparticles: Analytical vs finite elements simulation. *Materials Today: Proceedings*, 2(1):161–170. doi: 10.1016/j.matpr.2015.04.062.

Mie, G. (1908). Beiträge zur optik trüber medien, speziell kolloidaler metallösungen. *Annalen der Physik*, 330(3):377–445. doi: 10.1002/andp.19083300302.

Monk, P. (1992). Analysis of a finite element method for maxwell's equations. *SIAM journal on numerical analysis*, 29(3):714–729. doi: 10.1137/0729045.

Mu, L., Wang, J., Ye, X., and Zhang, S. (2015). A weak galerkin finite element method for the maxwell equations. *Journal of Scientific Computing*, 65(1):363–386. doi: 10.1007/s10915-014-9964-4.

Olson, J., Dominguez-Medina, S., Hoggard, A., Wang, L.-Y., Chang, W.-S., and Link, S. (2015a). Optical characterization of single plasmonic nanoparticles. *Chem. Soc. Rev.*, 44:40–57. doi: 10.1039/C4CS00131A”.

Olson, J., Dominguez-Medina, S., Hoggard, A., Wang, L.-Y., Chang, W.-S., and Link, S. (2015b). Optical characterization of single plasmonic nanoparticles. *Chem. Soc. Rev.*, 44:40–57.

Peña, O. and Pal, U. (2009). Scattering of electromagnetic radiation by a multilayered sphere. *Computer Physics Communications*, 180(11):2348–2354. doi: 10.1016/j.cpc.2009.07.010.

- Pomplun, J., Burger, S., Zschiedrich, L., and Schmidt, F. (2007). Adaptive finite element method for simulation of optical nano structures. *physica status solidi (b)*, 244(10):3419–3434. doi: 10.1002/pssb.200743192.
- Vandenbosch, G. A. E. (2012). Computational electromagnetics in plasmonics. In Kim, K. Y., editor, *Plasmonics*, chapter 2. IntechOpen, Rijeka. doi: 10.5772/51166.
- Wang, L., Hasanzadeh Kafshgari, M., and Meunier, M. (2020). Optical properties and applications of plasmonic-metal nanoparticles. *Advanced Functional Materials*, 30(51):2005400. doi: 10.1002/adfm.202005400.
- Yee, K. (1966). Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 14(3):302–307. doi: 10.1109/TAP.1966.1138693.