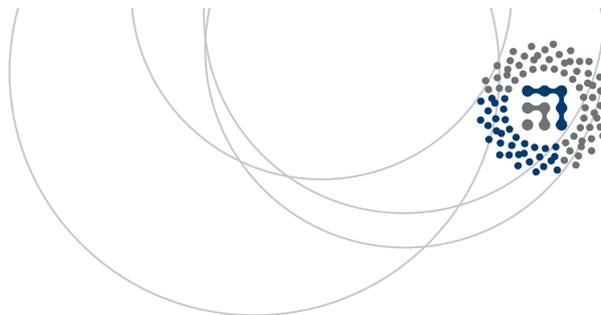


eman ta zabal zazu



Universidad  
del País Vasco

Euskal Herriko  
Unibertsitatea



ZTF-FCT

Zientzia eta Teknologia Fakultatea  
Facultad de Ciencia y Tecnología



Trabajo Fin de Grado  
Grado en Física

# Metatrónica: nanoelectrónica basada en los metamateriales

Autora:  
Sara Hierro  
Directora:  
Nerea Zabala



2015, Sara Hierro

Leioa, 24 de Junio de 2015

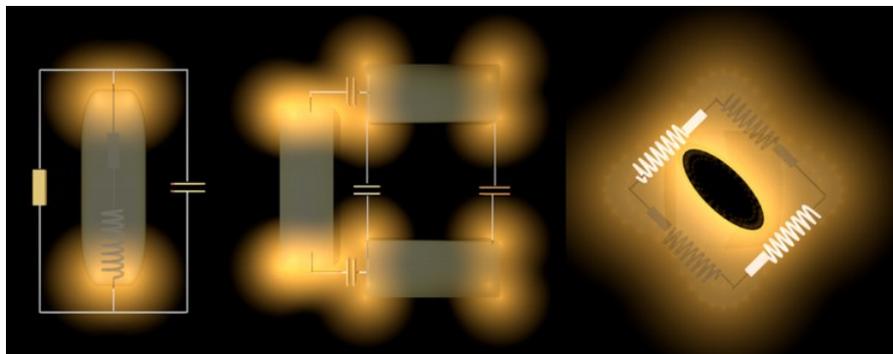


---

## Resumen

---

En 2007, el profesor Nather Engheta de la universidad de Pensilvania (EEUU) introdujo el concepto de *metatrónica*, un campo en el que se estudia la interacción de la luz con materiales artificiales (metamateriales) en la nanoescala. Engheta comprobó que a frecuencias ópticas estos elementos presentan comportamientos que pueden equipararse a los de los elementos de circuito tradicionales (condensadores, inductores, resistencias), lo cual nos permite trasladar a los metamateriales y circuitos ópticos los conceptos conocidos de la teoría de circuitos de la electrónica.



**Figura 1:** Ejemplos de metamateriales con la imagen de su elemento de circuito equivalente superpuesto [Abasahl et al., 2014]

En este trabajo se presentará un estudio bibliográfico de la analogía propuesta por Engheta. En primer lugar analizaremos el caso de una nanoesfera en un campo externo, desarrollo que nos permitirá entender el origen de la equivalencia entre los metamateriales y los elementos básicos de un circuito electrónico. Aplicaremos estas nociones para estudiar las resonancias plasmónicas, tras lo cual cotejaremos lo desarrollado en el capítulo con los resultados de algunas simulaciones computacionales. A continuación estudiaremos la interacción entre dos partículas, y una de sus posibles aplicaciones como nanoantena. Fi-

---

nalmente, se presentarán las conclusiones y se apuntarán algunas líneas de trabajo a seguir en el futuro.

---

# Índice general

---

<b>Resumen</b>	<b>I</b>
<b>Índice general</b>	<b>III</b>
<b>1. Introducción: Diseño de circuitos ópticos basados en metamateriales</b>	<b>1</b>
<b>2. Circuito efectivo de una nanopartícula esférica</b>	<b>7</b>
2.0.1. Partícula esférica en un campo externo: circuito efectivo . . . . .	8
2.0.2. Resonancias plasmónicas . . . . .	14
2.0.3. Función dieléctrica de un metal y elementos de circuito asociados	22
<b>3. Nanodímero plasmónico</b>	<b>25</b>
3.0.4. Dos partículas esféricas interaccionantes . . . . .	25
3.0.5. Nanodímero plasmónico como nanoantena . . . . .	30
<b>4. Conclusiones y trabajo futuro</b>	<b>37</b>
<b>Anexos</b>	
<b>Bibliografía</b>	<b>39</b>



# 1. CAPÍTULO

---

## Introducción: Diseño de circuitos ópticos basados en metamateriales

---

La nanotecnología es hoy en día uno de los campos de investigación más activos del ámbito científico. Somos capaces de desarrollar progresivamente tecnologías más precisas y eficientes en espacios más reducidos. La electrónica es una de las ramas de más interés dentro de todos los campos a los que la nanotecnología es aplicable, dado el alcance que sus aplicaciones ofrecen.

En cualquier circuito, los componentes que lo conforman han de ser necesariamente menores que la longitud de onda a la que pretenden operar [Engheta, 2010a]. Así, para un teléfono móvil cuya frecuencia de funcionamiento habitual ronda los 1.8 GHz (lo que corresponde a una longitud de onda de 17 cm), la antena mide alrededor de 1cm, y los componentes individuales de la circuitería interior son, a su vez, mucho más pequeños (del orden del milímetro). Poder construir circuitos a escala nanométrica nos puede llevar a pensar en la posibilidad de trabajar con ondas de muy altas frecuencias, y por tanto con longitudes de onda muy pequeñas. Sin embargo, por causas de los efectos internos de los propios elementos, construir circuitos electrónicos que funcionen a frecuencias altas es una tarea ardua; a frecuencias superiores a algunos GHz los efectos capacitivos internos imposibilitan su funcionamiento útil. Podemos entonces preguntarnos: ¿existe alguna alternativa a los circuitos convencionales que funcione a altas frecuencias? La respuesta es sí.

En los circuitos electrónicos el papel principal lo juega la corriente de conducción que se genera al desplazarse los portadores de carga que se ven sometidos a una diferencia de potencial, generando una densidad de corriente  $\mathbf{J}$  que es directamente proporcional al campo eléctrico  $\mathbf{E}$  mediante la fórmula:

$$\mathbf{J}_\sigma = \sigma \mathbf{E}, \quad (1.1)$$

donde  $\sigma$  es la conductividad del medio. No obstante, si nos remitimos a las ecuaciones de Maxwell recordaremos que el campo eléctrico tiene asociado un campo de desplazamiento  $\mathbf{D}$ , que considerando una corriente alterna de forma que  $E \sim e^{-i\omega t}$  genera una densidad de corriente de desplazamiento:

$$\mathbf{J}_D = \frac{d\mathbf{D}}{dt} = \pm i\omega \epsilon \mathbf{E}, \quad (1.2)$$

expresión en la cual  $\epsilon$  es la respuesta dieléctrica del material. Esta corriente será proporcional a la frecuencia con la que el vector  $\mathbf{D}$  cambie de dirección, lo que implicará una mayor importancia del término a medida que la frecuencia se haga mayor; a su vez, la corriente de conducción se volverá relativamente menos importante.

Conviene no olvidar que, al contrario que en el caso de la corriente de conducción, la corriente de desplazamiento no involucra el movimiento de partículas cargadas ni se desplaza de manera confinada. ¿Cómo podemos entonces controlar una magnitud como  $dD/dt$  para construir circuitos tal y como lo hacemos en electrónica? Diseñando la respuesta  $\epsilon$  deseada con metamateriales.

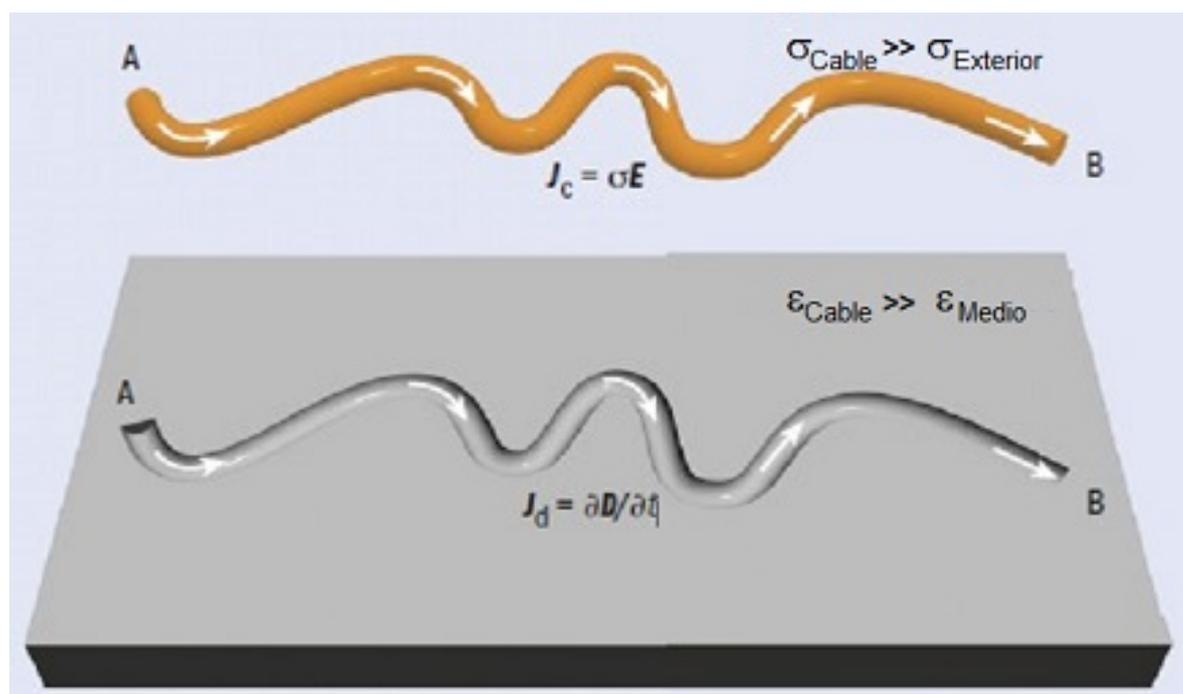
Los metamateriales son materiales diseñados artificialmente con la finalidad de obtener propiedades características que no pueden encontrarse en los materiales en la naturaleza. Estas propiedades se consiguen generando estructuras precisas con materiales ya conocidos, de manera que es la estructura y no la composición la que rige el comportamiento del material; son pues la geometría, forma y orientación de sus componentes las que les granjean su comportamiento especial.

La posibilidad de construir circuitos a nanoescala que funcionen a partir de la corriente de desplazamiento significaría un gran avance: un mayor ancho de banda permitiría mayor transmisión de información, también se tendría un aumento sustancial de la velocidad de

transmisión. El tamaño y la potencia necesarios, por el contrario, decrecerían.

### ¿Cómo podemos controlar la corriente de desplazamiento?

En electrónica, cuando conectamos dos puntos A y B mediante un cable conductor, los portadores de carga permanecen confinados en el cable por causa de la barrera de potencial que se crea entre el material conductor del cable y el material aislante adyacente. A frecuencias de radio la corriente de conducción puede escribirse como  $J_{\sigma} = \sigma E$ ; dado que  $\sigma_{\text{Cable}}/\sigma_{\text{Aislante}} \gg 1$ ,  $J_{\sigma}$  sigue el camino establecido por el material conductor sin llegar a filtrarse al entorno aislante. Es diferente para el caso de la corriente de desplazamiento, puesto que allá donde haya campo eléctrico existirá siempre un desplazamiento; se puede confinar en el material dieléctrico que hay entre dos condensadores, pero una vez separadas las placas metálicas el vector de desplazamiento  $\mathbf{D}$  ya no permanecerá encerrado.



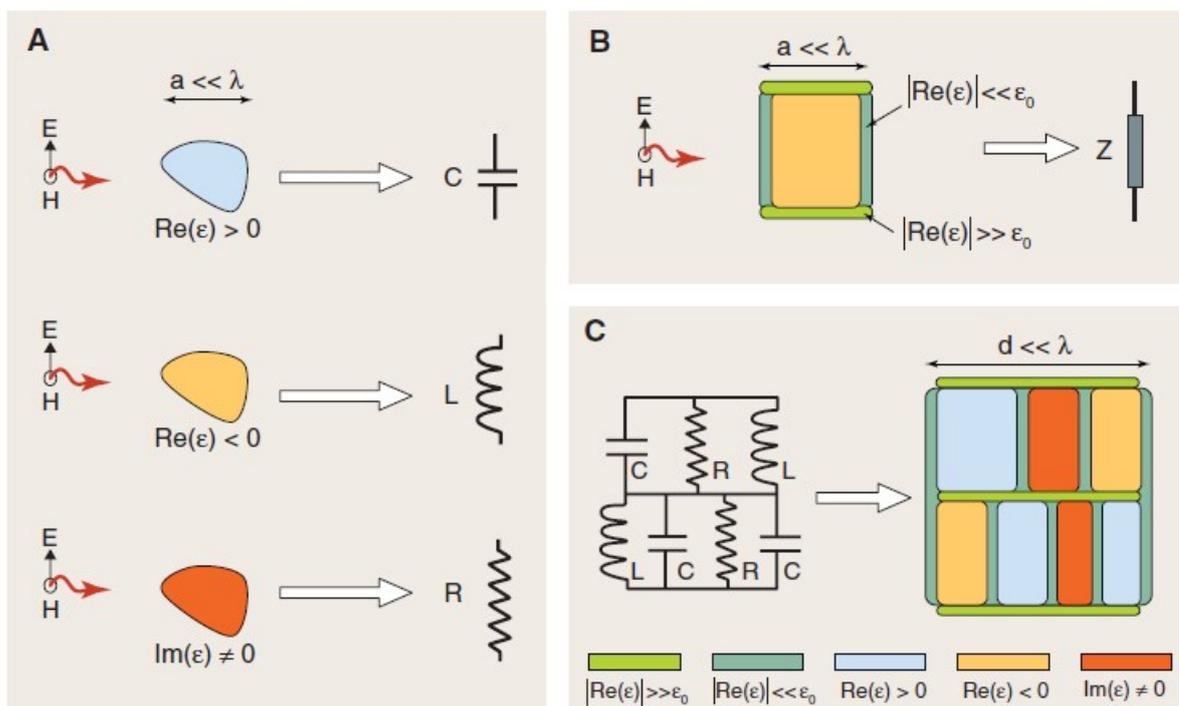
**Figura 1.1:** Comparación de un cable electrónico tradicional (arriba) con un cable metatrónico (abajo) [Engheta, 2010b]. En el primer caso, es la enorme diferencia entre la conductividad del cable y del exterior la que confina la corriente de conducción  $J_C$  dentro del mismo, proveyendo un camino para las partículas cargadas y por tanto una guía para  $J_C$ . Planteamos en el caso inferior una estructura análoga, en la cual creamos un tubo vacío o dieléctrico rodeado de un medio con permitividad cercana a cero (Epsilon Near Zero - ENZ), de manera que la corriente de desplazamiento  $J_D$  queda confinada dentro del cable. Este tipo de cable es una de las bases para la metatrónica, ya que implica la posibilidad de procesar información óptica.

Sin embargo, podemos realizar una deducción análoga a la hecha para los circuitos elec-

trónicos (ver Figura 1.1). Puesto que  $J_D$  es directamente proporcional a  $\epsilon$  según la ecuación (1.2), un material con una permitividad muy alta y rodeado de un entorno de permitividad muy pequeña haría la función equivalente al cable conductor de los circuitos electrónicos. Si  $\epsilon_{Cable}/\epsilon_{Medio} \gg 1$ , la corriente de desplazamiento quedaría atrapada en la estructura del cable, ya que no podría filtrarse al material exterior.

Nader Engheta propuso que los elementos que conforman los circuitos electrónicos tales como resistencias, bobinas y condensadores pueden también formarse diseñando su respuesta dieléctrica  $\epsilon(\omega)$  de manera análoga. Un material con la parte real de la permitividad positiva,  $Re(\epsilon) > 0$ , en un rango de frecuencias equivale a un condensador, mientras que si la permitividad es negativa, es decir, si  $Re(\epsilon) < 0$ , equivaldría a una bobina de inducción (ver Figura 1.2A); la parte imaginaria de la permitividad,  $Im(\epsilon)$ , siempre equivaldrá a una resistencia. Es decir, podemos sustituir los diversos trozos de materiales por su impedancia equivalente  $Z$  (ver Figura 1.2B). De este modo, cualquier estructura compuesta por distintos materiales (metamateriales) se puede sustituir por un circuito equivalente (metanocircuito), llevándonos a poder estudiarlos mediante las propiedades ya conocidas de sus elementos análogos en electrónica. Así, un ejemplo de metanocircuito podría ser el representado en la Figura 1.2C.

Pero veamos, antes, la base sobre la que se fundamentan estas propiedades de las que estamos hablando. Para ello, vamos a estudiar el caso más sencillo: la respuesta dieléctrica  $\epsilon(\omega)$  de una esfera homogénea de radio  $a$ , que se puede resolver analíticamente, y el origen de la similitud con los elementos de un circuito.



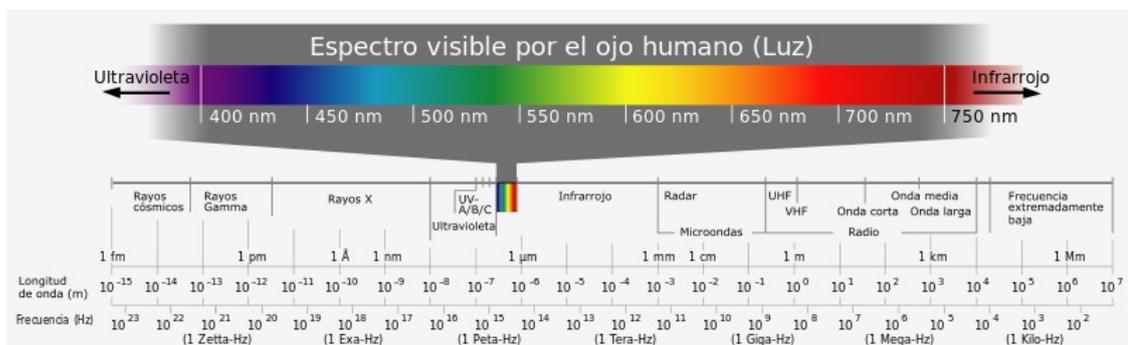
**Figura 1.2:** **A)** Equivalencia de trozos de material (de dimensión menor a la longitud de onda incidente) con elementos discretos de un circuito al ser iluminadas por una señal óptica monocromática [Engheta, 2007]. **B)** Planteamiento de un nanomódulo, en el cual rodeamos los lados con capas de material con una parte real de su permitividad muy baja y sus terminaciones con capas de material con una parte real de la permitividad muy alta. Utilizando la analogía hecha en la Figura 1.1, podemos modelar este sistema como una impedancia. **C)** Ilustración del concepto del diseño de circuitos ópticos basados en metamateriales a partir de su analogía con los circuitos tradicionales. En este metanocircuito vemos diversos nanomódulos como los planteados en B) estructurados en conjunto; al ser excitado por una señal óptica, la corriente de desplazamiento presentará en una banda específica de frecuencia un comportamiento a través de estos elementos comparable al del circuito mostrado a la izquierda.



## 2. CAPÍTULO

### Circuito efectivo de una nanopartícula esférica

Consideremos el caso de una nanoesfera homogénea de radio  $a$ , cuya permitividad  $\epsilon(\omega)$  será en general una cantidad compleja, sobre la que incide una onda electromagnética monocromática polarizada cuya variación del campo eléctrico en el tiempo es de la forma  $E_0 e^{-i\omega t}$ . El radio de la esfera será mucho más pequeño que la longitud de onda de la luz incidente  $\lambda_0$  en el vacío y también en el medio, de modo que  $a \ll \lambda_0$  y  $a \ll \frac{\lambda_0}{\sqrt{|\text{Re}(\epsilon)|/\epsilon}} = \frac{\lambda_0}{\sqrt{\text{Re}(\epsilon_r)}}$ . Es decir, para la luz visible (ver espectro electromagnético en la Figura 2.1), su valor será inferior a los 300 nm.



**Figura 2.1:** Ilustración del espectro electromagnético; nuestra área de trabajo abarcará todo el visible y parte del ultravioleta y el infrarrojo. [Esp, ]

### 2.0.1. Partícula esférica en un campo externo: circuito efectivo

Para calcular el campo eléctrico y el potencial  $\phi$  tanto dentro como fuera de la esfera (en la aproximación quasiestática) hemos de resolver la ecuación de Laplace, cuya expresión es:

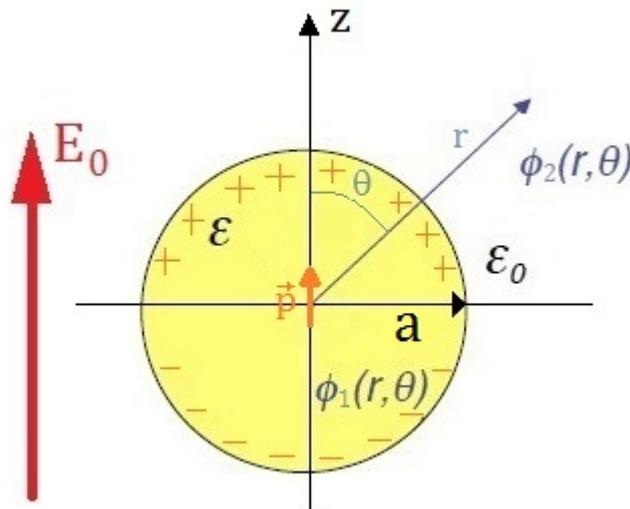
$$\nabla^2 \phi = 0, \quad (2.1)$$

y para la cual la solución más general tiene, tanto para el interior como para el exterior de la esfera, la siguiente forma [Barandiarán, 2011].

$$\text{Dentro : } \phi_1(r, \theta) = \sum_n (A_n r^n + B_n r^{-(n+1)}) P_n(\cos \theta) \quad (2.2)$$

$$\text{Fuera : } \phi_2(r, \theta) = \sum_n (C_n r^n + F_n r^{-(n+1)}) P_n(\cos \theta), \quad (2.3)$$

donde  $(r, \theta)$  son las coordenadas esféricas mostradas en la Figura 2.2.



**Figura 2.2:** Esquema de la esfera de permitividad  $\varepsilon$  en el vacío, sometida a un campo eléctrico  $E_0$  en dirección del eje Z, y cuyo potencial en el interior y exterior se denota como  $\phi_1(r, \theta)$  y  $\phi_2(r, \theta)$  respectivamente, en coordenadas esféricas  $(r, \theta)$ . Las cargas representan la polarización  $\mathbf{p}$  inducida en la esfera.

Considerando las soluciones con el comportamiento finito en el origen ( $r \rightarrow 0$ ) y también cuando  $r \rightarrow \infty$ , de manera que  $\phi_1(r \rightarrow \infty) = -E_0 r \cos \theta$ , y estableciendo la condición de continuidad del potencial y la componente normal del vector desplazamiento en la superficie de la esfera:

$$\begin{aligned} 1) \phi_1(r = a, \theta) &= \phi_2(r = a, \theta) \\ 2) D_{1n}(r = a, \theta) &= D_{2n}(r = a, \theta), \end{aligned}$$

podemos calcular la solución de la ecuación de Laplace, que resulta:

$$\phi_1(r, \theta) = -\frac{3\varepsilon_0}{\varepsilon + 2\varepsilon_0} \mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r} \quad (2.4)$$

$$\phi_2(r, \theta) = -\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r} + \left( \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\varepsilon + 2\varepsilon_0} \right) a^3 \frac{\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}}{r^3}. \quad (2.5)$$

El segundo término en la expresión del potencial para el exterior de la esfera puede interpretarse como la contribución de un dipolo situado en el origen, de momento dipolar  $\mathbf{p}$  con valor  $\mathbf{p} = 4\pi\varepsilon_0 \left( \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\varepsilon + 2\varepsilon_0} \right) a^3 \mathbf{E}_0$ . El campo eléctrico será, por tanto, el gradiente de las expresiones arriba escritas respectivamente:

$$\mathbf{E} = \begin{cases} \mathbf{E}_1 = \frac{3\varepsilon_0}{\varepsilon + 2\varepsilon_0} \mathbf{E}_0 & , r < a \\ \mathbf{E}_2 = \mathbf{E}_0 + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \left[ \frac{3(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) \cdot \mathbf{r}}{r^5} - \frac{\mathbf{p}}{r^3} \right] & , r > a. \end{cases} \quad (2.6)$$

De la segunda condición de contorno que hemos utilizado para resolver la ecuación de Laplace podemos colegir que la componente normal de la corriente de desplazamiento,  $\mathbf{J}_D = d\mathbf{D}/dt = -i\omega D_n$ , con  $\mathbf{D} = \varepsilon\mathbf{E}$ , tiene que ser continua en cualquier punto de la superficie de la esfera:

$$\mathbf{J}_{D1} \cdot \hat{u}_r = \mathbf{J}_{D2} \cdot \hat{u}_r \quad (2.7)$$

$$-i\omega\varepsilon\mathbf{E}_1 \cdot \hat{u}_r = -i\omega\varepsilon_0\mathbf{E}_2 \cdot \hat{u}_r = -i\omega\varepsilon_0(\mathbf{E}_{Dip} + \mathbf{E}_0) \cdot \hat{u}_r. \quad (2.8)$$

Si llamamos  $\mathbf{E}_{Res}$  a la resta  $\mathbf{E}_1 - \mathbf{E}_0$ , podemos escribir:

$$-i\omega\varepsilon\mathbf{E}_{\text{Res}} \cdot \hat{u}_r - i\omega\varepsilon\mathbf{E}_0 \cdot \hat{u}_r = -i\omega\varepsilon_0\mathbf{E}_0 \cdot \hat{u}_r - i\omega\varepsilon_0\mathbf{E}_{\text{Dip}} \cdot \hat{u}_r \quad (2.9)$$

$$-i\omega(\varepsilon - \varepsilon_0)\mathbf{E}_0 \cdot \hat{u}_r = -i\omega\varepsilon_0\mathbf{E}_{\text{Dip}} \cdot \hat{u}_r - i\omega\varepsilon\mathbf{E}_{\text{Res}} \cdot \hat{u}_r. \quad (2.10)$$

A continuación hacemos la integral de superficie a lo largo de la semiesfera derecha ( $r = a, 0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \varphi \leq \pi$ ):

$$-\iint da \quad i\omega(\varepsilon - \varepsilon_0)\mathbf{E}_0 \cdot \hat{u}_r = -\iint da \quad i\omega\varepsilon_0\mathbf{E}_{\text{Dip}} \cdot \hat{u}_r - \iint da \quad i\omega\varepsilon\mathbf{E}_{\text{Res}} \cdot \hat{u}_r \quad (2.11)$$

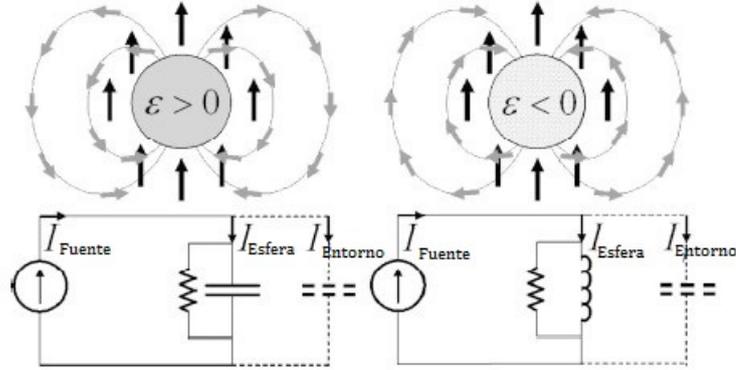
$$\underbrace{-i\omega(\varepsilon - \varepsilon_0)\pi a^2 \mathbf{E}_0}_{I_{\text{Fuente}}} = \underbrace{-i\omega\varepsilon_0 2\pi a^2 \mathbf{E}_0 \left( \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\varepsilon + 2\varepsilon_0} \right)}_{I_{\text{Entorno}}} - \underbrace{i\omega\varepsilon\pi a^2 \mathbf{E}_0 \left( \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\varepsilon + 2\varepsilon_0} \right)}_{I_{\text{Esfera}}} \quad (2.12)$$

Estos tres términos pueden interpretarse como *corrientes de desplazamiento*, análogas a la corriente de conducción que describe el movimiento de los portadores de carga para una corriente eléctrica.  $I_{\text{Fuente}}$  representa la corriente de desplazamiento proveniente de la fuente externa,  $I_{\text{Esfera}}$  la corriente en la nanoesfera e  $I_{\text{Entorno}}$  la corriente del campo dipolar del entorno. Todos estos términos están relacionados con las cargas de polarización inducidas en la superficie de la esfera al ser excitada por el campo exterior (ver Figura 2.2).

La relación entre los elementos de corriente de desplazamiento dada por la ecuación (2.12) se puede interpretar como las corrientes de las ramas de un circuito en paralelo como las dadas en la Figura 2.3.

Calculemos ahora las que serían las impedancias de las ramas del circuito equivalente. Para ello obtendremos el valor promedio del potencial de la esfera entre sus superficies superior e inferior en la dirección del campo exterior  $\mathbf{E}_0$ .

$$V = - \int \mathbf{E} \cdot d\mathbf{r} \quad (2.13)$$



**Figura 2.3:** Analogía básica de un trozo de material de forma esférica con elementos de circuito a escala óptica [Engheta et al., 2005]. A la izquierda consideramos una esfera cuya parte real de la permitividad es  $\epsilon > 0$ , lo que equivale al paralelo de un condensador y una resistencia. Por el contrario, consideramos a la derecha una esfera con su parte real de la permitividad negativa, que equivaldría a una autoinducción en paralelo con una resistencia. Las líneas negras representan el campo eléctrico incidente, mientras que las grises son el campo dipolar de Entorno creado por la nanoesfera considerada.

El campo que debemos introducir en la fórmula es el aporte de los que afectan a la esfera, es decir,  $\mathbf{E}_{\text{Res}}$ .

$$\mathbf{E}_{\text{Res}} = \mathbf{E}_1 - \mathbf{E}_0 = \frac{3\epsilon_0}{\epsilon + 2\epsilon_0} \mathbf{E}_0 - \mathbf{E}_0 = \frac{\epsilon_0 - \epsilon}{\epsilon + 2\epsilon_0} \mathbf{E}_0 \quad (2.14)$$

Como es una magnitud constante, simplemente:

$$\langle V \rangle_{\text{Esfera}} = \frac{\epsilon_0 - \epsilon}{\epsilon + 2\epsilon_0} E_0 a = \langle V \rangle_{\text{Entorno}}; \quad (2.15)$$

dado que  $\langle r \rangle = a$ . Si conocemos las corrientes efectivas y el valor del potencial, podemos calcular las impedancias por medio de la ley de Ohm.

$$V = I \cdot Z \quad (2.16)$$

Así pues, para la esfera:

$$\langle V \rangle_{\text{Esfera}} = I_{\text{Esfera}} \cdot Z_{\text{Esfera}} \quad (2.17)$$

$$\frac{\varepsilon_0 - \varepsilon}{\varepsilon + 2\varepsilon_0} E_0 a = -i\omega\varepsilon \left( \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\varepsilon + 2\varepsilon_0} \right) \pi a^2 E_0 \cdot Z_{Esfera}, \quad (2.18)$$

de donde podemos calcular la impedancia de la esfera:

$$Z_{Esfera} = (-i\omega\varepsilon\pi a)^{-1}. \quad (2.19)$$

En el caso del espacio exterior restante:

$$\langle V \rangle_{Entorno} = I_{Entorno} \cdot Z_{Entorno} \quad (2.20)$$

$$\frac{\varepsilon_0 - \varepsilon}{\varepsilon + 2\varepsilon_0} E_0 a = -i\omega\varepsilon_0 2\pi a^2 \left( \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\varepsilon + 2\varepsilon_0} \right) E_0 \cdot Z_{Entorno} \quad (2.21)$$

$$Z_{Entorno} = (-2i\omega\varepsilon_0\pi a)^{-1}. \quad (2.22)$$

Una vez obtenidas estas expresiones, estudiemos los diferentes casos posibles. Si el campo incidente está polarizado y varía con el tiempo como  $e^{-i\omega t}$ , la corriente será de la forma  $I = I_0 e^{-i\omega t}$ . El potencial a través de un condensador o de una autoinducción sería de la forma:

$$V_C = \frac{1}{C} \int I dt = \frac{-1}{i\omega C} I_0 e^{-i\omega t}, \quad (2.23)$$

$$V_L = L \frac{dI}{dt} = -i\omega L I_0 e^{-i\omega t}, \quad (2.24)$$

respectivamente, con lo cual las impedancias equivalentes para un condensador y una bobina serían  $Z_C = \frac{-1}{i\omega C}$  y  $Z_L = -i\omega L$ . Podemos escribir entonces que para cualquier circuito sobre el que actúa un campo polarizado y variable como  $e^{-i\omega t}$  la impedancia equivalente es:

$$Z = R - i\chi = R - i \left( \omega L - \frac{1}{\omega C} \right). \quad (2.25)$$

Pasemos entonces a estudiar el comportamiento del sistema en función de las características que presentarán las impedancias.

Para la esfera,  $Z_{Esfera} = (-i\omega\epsilon\pi a)^{-1}$ . Escribiendo la permitividad  $\epsilon(\omega)$  como la suma de su parte real e imaginaria,  $\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2$ , y desarrollando la expresión para la impedancia de la esfera, nos queda:

$$Z_{Esfera} = \frac{i}{\omega\pi a(\epsilon_1 + i\epsilon_2)} = \frac{\epsilon_2 + i\epsilon_1}{\omega\pi a(\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2)}. \quad (2.26)$$

Si la parte real de  $\epsilon$  es positiva,  $Re[\epsilon] = \epsilon_1 > 0$ , la parte imaginaria de la impedancia de la esfera toma también un valor positivo que, comparándolo con la expresión general para la impedancia equivalente de cualquier circuito genérico escrita arriba, nos lleva a la conclusión de que podemos asociar este resultado a un comportamiento capacitivo. Siendo éste el caso, la impedancia de la esfera resultaría ser equivalente al paralelo de un condensador con una resistencia (figura 2.3), cuyos parámetros se pueden obtener de la siguiente expresión.

$$\frac{1}{Z_{Esfera}} = -i\omega\pi a(\epsilon_1 + i\epsilon_2) = \omega\pi a\epsilon_2 - i\omega\pi a\epsilon_1 = \frac{1}{R} - i\omega C. \quad (2.27)$$

Para el entorno, dado que  $\epsilon_0$  es siempre una cantidad real y positiva, la impedancia se podrá asociar siempre a un comportamiento capacitivo puro.

$$\frac{1}{Z_{Entorno}} = -2i\omega\epsilon_0\pi a = -i\omega C \quad (2.28)$$

Los valores que se obtienen para la conductancia y la capacidad equivalente son, en función de las características de la esfera:

$$\frac{1}{R_{Esfera}} = G_{Esfera} = \omega\pi a\epsilon_2 \quad (2.29)$$

$$C_{Esfera} = \pi a\epsilon_1 \quad (2.30)$$

$$C_{Entorno} = 2\epsilon_0\pi a. \quad (2.31)$$

Por otro lado, en caso de que la parte real de  $\varepsilon$  sea negativa,  $Re(\varepsilon) = \varepsilon_1 < 0$ , la parte imaginaria de la impedancia de la esfera toma también un valor negativo, de lo cual al compararlo nuevamente con la expresión general para  $Z$  podemos deducir que la esfera presentaría un comportamiento inductivo. Por tanto, en este caso podemos sustituir la esfera por una resistencia en paralelo con una autoinducción (figura 2.3)

$$\frac{1}{Z_{Esfera}} = -i\omega\pi a(\varepsilon_1 + i\varepsilon_2) = \omega\pi a\varepsilon_2 - i\omega\pi a\varepsilon_1 = \frac{1}{R} - \frac{1}{i\omega L}, \quad (2.32)$$

con el siguiente valor para la inductancia:

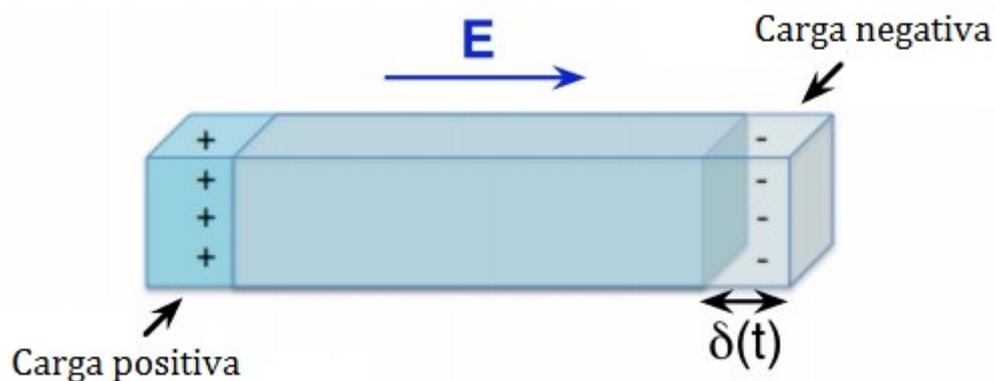
$$L_{Esfera} = (-\omega^2\pi a\varepsilon_1)^{-1}. \quad (2.33)$$

En este caso, dado que el entorno siempre se comportará de modo capacitivo, nos encontraremos en un circuito que presenta una inducción en paralelo con un condensador, lo que se traduce en la posibilidad de que haya una resonancia. La condición de resonancia  $L_{Esfera} \cdot C_{Entorno} = \omega^{-2}$  nos lleva a la condición  $\varepsilon_1 = -2\varepsilon_0$ , que es la bien conocida condición de resonancia plasmónica de una partícula, que describiremos más adelante. Podríamos además variar el material que envuelve a la nanoesfera que nos ocupa por otro con distinta permitividad, lo que nos llevaría a poder variar la frecuencia de resonancia a voluntad.

Hagamos en este punto un breve paréntesis para poder explicar de manera clara qué es un plasmón, a fin de ser capaces de entender mejor lo establecido arriba así como partes posteriores del trabajo.

## 2.0.2. Resonancias plasmónicas

Consideremos pues un sólido metálico. En los metales, las cargas negativas de los electrones de conducción son compensadas por las cargas positivas de los iones fijos. Si aplicamos al metal una señal eléctrica  $E(t)$ , el gas de electrones reacciona desplazándose una distancia  $\delta(t)$  de su posición de equilibrio, lo que causa que los núcleos iónicos positivos generen una fuerza recuperadora que induce el movimiento de la nube de electrones de vuelta a su posición. La acción simultánea de estas dos fuerzas genera un movimiento oscilatorio del gas de electrones alrededor de la posición de equilibrio (la cual es amor-



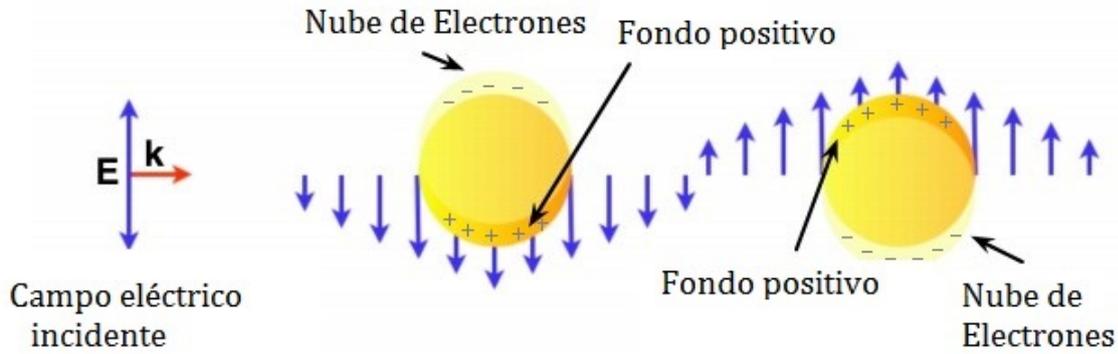
**Figura 2.4:** Representación gráfica de las oscilaciones de plasma en un metal. El campo  $E$  produce una desviación del gas de electrones de su posición de equilibrio, generando zonas con carga. Los núcleos iónicos inducen una fuerza recuperadora de la posición de equilibrio sobre la nube, creando así un movimiento oscilatorio. ([Pérez, 2011])

tienda debido a las colisiones de los electrones móviles con la red). Este movimiento está caracterizado por la constante de amortiguamiento  $\gamma$ , que es relativamente grande en metales a frecuencias ópticas.

A la frecuencia natural de oscilación de un gas libre de electrones se le llama *frecuencia de plasma*  $\omega_p$ , y son las cuantificaciones de estas oscilaciones de densidad de carga las que llamamos *plasmones*.

Para la mayoría de metales  $\omega_p$  se halla entre el visible y el ultravioleta, mientras que para los semiconductores suele hallarse en el infrarrojo.

Hagamos ahora hincapié en un tipo concreto de plasmones: los *plasmones superficiales*. Cuando la superficie de un metal rompe la simetría del material, pueden darse plasmones superficiales (PS). La frecuencia de excitación de un PS,  $\omega_{ps}$ , en una superficie plana que divide el espacio en dos regiones semi-infinitas (metal-dieléctrico), se determina basándose en condiciones de contorno del campo electromagnético en la interfaz metal-dieléctrico. Dado que no hay carga eléctrica, podemos resolver el problema mediante la ecuación de Laplace como hemos hecho antes con la esfera, para calcular el potencial aplicando condiciones de contorno en la superficie plana. Así, si la permitividad de la esfera metálica es  $\epsilon_m(\omega)$  y la del medio dieléctrico es  $\epsilon_d(\omega)$ , se deduce la siguiente expresión:



**Figura 2.5:** Representación esquemática de la acción de una onda electromagnética sobre una partícula nanoesférica, y la consecuente generación de la excitación LSPR. ([Pérez, 2011])

$$\varepsilon_m(\omega) + \varepsilon_d(\omega) = 0. \quad (2.34)$$

En un metal ideal la constante de amortiguamiento es nula ( $\gamma = 0$ ), así que, según el modelo de Drude:

$$\varepsilon_{m_r}(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad (2.35)$$

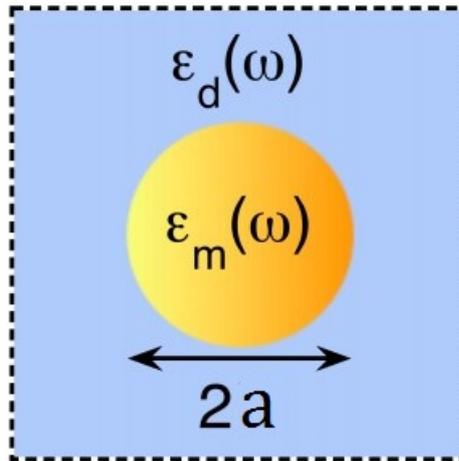
donde  $\omega_p = (Ne^2/m_e)^{-1/2}$  es la frecuencia de plasma y  $N$ ,  $e$  y  $m_e$  son la densidad de electrones libres, la carga y la masa del electrón respectivamente. Sustituyendo este valor en la ecuación (2.34), llegamos al valor de la frecuencia de excitación de los plasmones de superficie:

$$\omega_{PS}^2 = \frac{\omega_p^2}{\varepsilon_d + 1} \quad (2.36)$$

Si el medio es el vacío,  $\varepsilon_d = 1$  y

$$\omega_{PS} = \frac{\omega_p}{\sqrt{2}}. \quad (2.37)$$

Por otro lado, cuando se trata de superficies cerradas de nanopartículas, se pueden crear excitaciones a partir del acoplamiento de la luz con las oscilaciones de densidad de car-



**Figura 2.6:** Esquema de la esfera metálica de permitividad  $\epsilon_m(\omega)$  en un medio dieléctrico de permitividad  $\epsilon_d(\omega)$  ([Pérez, 2011]).

ga, lo que se denomina *Resonancia de Plasmones Superficiales Localizados* (Localized Surface Plasmon Resonance - *LSPR*).

Como en el caso de un material de volumen ( "bulk"), una señal eléctrica incidente desvía la nube de electrones de su posición de equilibrio. Como consecuencia, se crean regiones con carga positiva y negativa, y el fondo positivo de la nanoestructura trata de restablecer el equilibrio, estableciendo de este modo una oscilación colectiva conocida como LSPR.

Acercándonos más a nuestro caso, consideremos el problema de una esfera metálica de radio  $a$  en un medio dieléctrico con una onda electromagnética incidente de longitud de onda  $\lambda$ , para la cual es válida la aproximación cuasiestática ( $2a \ll \lambda$ ). Estas condiciones llevan a que la fase de oscilación del campo electromagnético sea aproximadamente constante en la esfera, y a que podamos tratar el problema como si fuese un caso electrostático.

La resolución de la ecuación de Laplace nos lleva a la condición de resonancia:

$$\epsilon_m(\omega)l + \epsilon_d(\omega)(l + 1) = 0. \quad (2.38)$$

Si tomamos el medio dieléctrico como el vacío, y modelamos el metal mediante el modelo de Drude para un amortiguamiento nulo, nos queda que:

$$l \left( 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right) + (l+1) = 0, \quad (2.39)$$

y por tanto:

$$\omega_l^{Sph} = \sqrt{\frac{l}{2l+1}} \omega_p, \quad (2.40)$$

donde  $l$  es el orden del armónico esférico en el cual las deformaciones del gas de electrones se descomponen debido a la simetría esférica del problema. El caso dipolar ( $l = 1$ ), es el más relevante para partículas pequeñas (ya que el aumento de tamaño hace al resto de armónicos más importantes). En este caso:

$$\omega_{dip} = \frac{\omega_p}{\sqrt{3}}. \quad (2.41)$$

Si  $a \rightarrow \infty$ , los  $l$  altos toman más importancia y llegamos a la condición de resonancia de la superficie plana,  $\omega_{PS} = \frac{\omega_p}{\sqrt{2}}$ , vista anteriormente ( $l \rightarrow \infty$ ).

Asimismo, puede darse que la LSPR aparezca no sólo en nanopartículas sino también en nanocavidades integradas en medios metálicos. Si invertimos el problema considerado arriba para tener una nanocavidad esférica en el medio metálico:

$$\varepsilon_d(\omega)l + \varepsilon_m(\omega)(l+1) = 0 \quad (2.42)$$

$$l + (l+1) \left( 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right) = 0, \quad (2.43)$$

lo que nos conduce finalmente a la nueva condición de resonancia:

$$\omega_l^{Cav} = \sqrt{\frac{l+1}{2l+1}} \omega_p, \quad (2.44)$$

que en el caso dipolar resulta:

$$\omega_{dip}^{Cav} = \sqrt{\frac{2}{3}} \omega_p. \quad (2.45)$$

Es interesante notar que para un mismo metal, considerando los dos casos expuestos, se cumple para todos los casos que:

$$\left(\omega_l^{Sph}\right)^2 + \left(\omega_l^{Cav}\right)^2 = \omega_p^2. \quad (2.46)$$

A continuación, a fin de unir nuestro paréntesis a las nociones estudiadas anteriormente en el capítulo, calculamos las frecuencias de resonancia de una nanoesfera metálica en el vacío y la de una nanocavidad esférica en un metal haciendo uso de la equivalencia de los materiales con elementos de circuito.

Consideremos primero la nanoesfera metálica en el vacío; para el rango de frecuencias en el que suele ocurrir la resonancia plasmónica  $Re(\varepsilon) < 0$  para el metal, por lo que el circuito equivalente para nuestra esfera sería el representado en la Figura 2.3 a la derecha, es decir, una bobina en paralelo con una resistencia, todo ello en paralelo con la capacidad asociada al entorno (en este caso el vacío). Tenemos por tanto un circuito RLC, cuya frecuencia de resonancia será:

$$\omega^2 = \frac{1}{LC}. \quad (2.47)$$

Según las ecuaciones (2.31) y (2.33):

$$C_0 = 2\pi a \varepsilon_0 \quad (2.48)$$

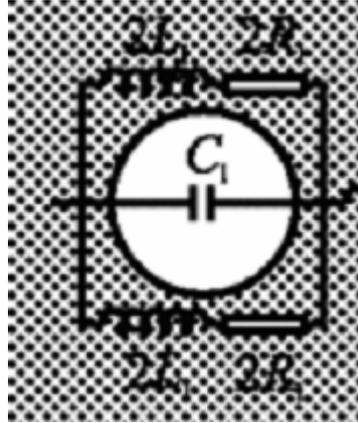
$$L = (-\omega^2 \pi a \varepsilon_1)^{-1}, \quad (2.49)$$

siendo  $\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$ , nos queda que:

$$LC_0 = \frac{-2\pi a \varepsilon_0}{\omega^2 \pi a \varepsilon_1} = -\frac{2\varepsilon_0}{\omega^2 \varepsilon_1} \quad (2.50)$$

$$\omega_{res}^2 = -\frac{\omega_{res}^2 \varepsilon_1}{2\varepsilon_0} \quad (2.51)$$

$$-\varepsilon_1 = 2\varepsilon_0 \Rightarrow -\varepsilon_r = 2 \quad (2.52)$$



**Figura 2.7:** Circuito equivalente para una nanocavidad esférica, dibujado sobre la misma. [Teperik et al., 2005]

Sustituyendo  $\epsilon_r$  por la expresión de Drude dada por la ecuación (2.35):

$$-\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega_{res}^2}\right) = 2, \quad (2.53)$$

obtenemos:

$$\omega_{res} = \frac{\omega_p}{\sqrt{3}}. \quad (2.54)$$

Expresión que en efecto concuerda con la ecuación (2.41).

Pasemos ahora a estudiar una nanocavidad esférica integrada en un metal, cuyo esquema podemos ver en la Figura 2.7.

La frecuencia de resonancia en este caso será la misma,  $\omega_{res} = 1/\sqrt{LC}$ , donde C es la capacidad asociada a la nanocavidad de vacío, cuyo valor podemos obtener de (2.30), de modo que:

$$C_0 = \pi a \epsilon_0. \quad (2.55)$$

Para calcular la inductancia equivalente del entorno, hacemos uso de la ecuación (2.28):

$$Z_{Entorno} = (-2i\omega\epsilon\pi a)^{-1} = R - i\omega L, \quad (2.56)$$

de la cual podemos deducir que:

$$L = (-2\omega^2 \varepsilon \pi a)^{-1}. \quad (2.57)$$

Por tanto:

$$\omega_{res}^2 = \frac{1}{LC_0} = -\frac{2\omega_{res}^2 \varepsilon}{\varepsilon_0} \quad (2.58)$$

$$\omega_{res}^2 = -2\omega_{res}^2 \varepsilon_r, \quad (2.59)$$

de lo cual deducimos:

$$1 = -2\varepsilon_r. \quad (2.60)$$

Sustituyendo de nuevo  $\varepsilon_r$  por su expresión dada por el modelo de Drude:

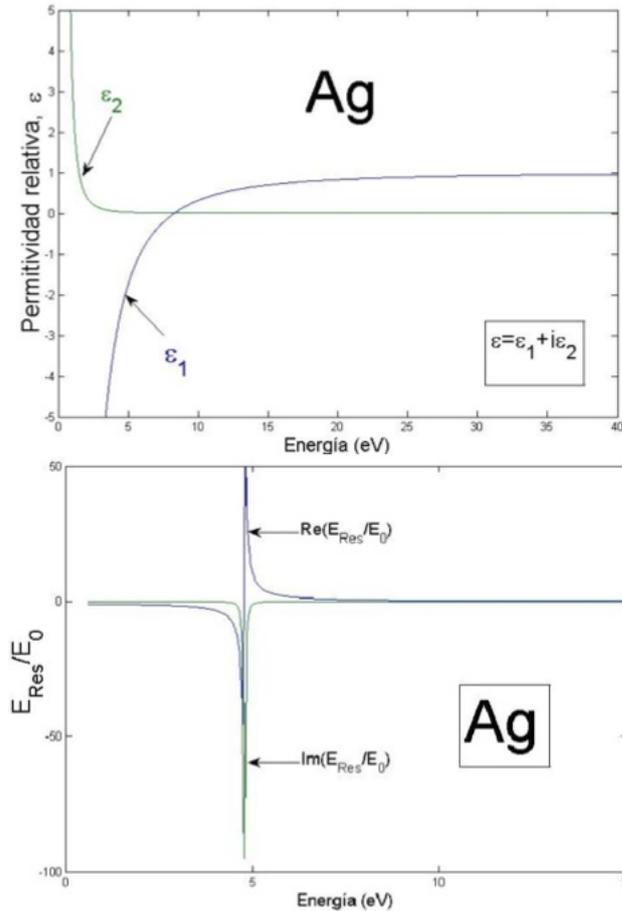
$$-\frac{1}{2} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega_{res}^2}, \quad (2.61)$$

llegamos finalmente a:

$$\omega_{res} = \sqrt{\frac{2}{3}} \omega_p, \quad (2.62)$$

que, de nuevo, está de acuerdo con los datos obtenidos mediante el desarrollo teórico previo (ecuación (2.45)), por lo que se demuestra la validez de la analogía material-elemento de circuito. Estos resultados se utilizarán más adelante, donde podremos comprobar gráficamente los valores que se dan en la teoría, con lo cual damos por terminado nuestro paréntesis y volvemos a la nanoesfera que nos ocupaba.

Ha quedado demostrado, entonces, que una nanoesfera suficientemente pequeña excitada por una señal óptica puede llegar a comportarse como un condensador, una bobina o resistencia a frecuencias ópticas. Es interesante notar que, al contrario de lo que ocurre con las inducciones a frecuencias más bajas (cuyo diseño consiste en alambres enrollados), en este caso podemos disponer de materiales que son inductores por sí mismos, que poseen



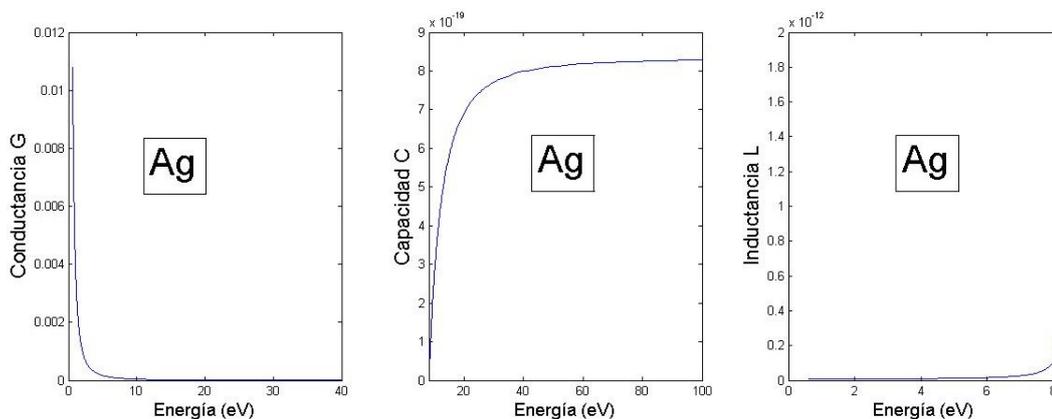
**Figura 2.8:** Representación de la parte real (azul) e imaginaria (verde) de la permitividad equivalente y del cociente entre el campo residual de la esfera y el campo incidente para una nanoesfera de Ag, con un radio  $a=30$  nm.

una inductancia intrínseca que se puede ajustar variando parámetros como el tamaño, forma o contenido material de la nanoestructura.

### 2.0.3. Función dieléctrica de un metal y elementos de circuito asociados

Para ilustrar estos conceptos, consideraremos a continuación dos nanoesferas de distinto material, en concreto una de Au y otra de Ag, modeladas ambas mediante una función dieléctrica de Drude para su permitividad del modo:

$$\epsilon_r(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}, \quad (2.63)$$



**Figura 2.9:** Representación de la conductancia, capacidad e inductancia para una nanoesfera de Ag con  $a=30\text{nm}$ .

y cuya representación podemos ver en la Figura 2.8.

Podemos observar cómo a medida que la energía aumenta, la parte imaginaria de la permitividad tiende a cero mientras que la real tiende a uno. Siendo nuestra área de trabajo todo el espectro visible más cierta extensión de frecuencias desde el infrarrojo hasta el ultravioleta (200 nm  $\sim$  1000 nm), estaríamos abarcando valores entre 1.24 eV y 6.2 eV.

Por otro lado podemos observar en la Figura 2.8 a la derecha el cociente entre el campo  $E_{Res}$  y  $E_0$ , donde  $E_{Res}$  resultaba ser la resta  $E_1 - E_0$ , es decir, el campo residual en la nanoesfera cuando al total de la misma se le sustraía el campo incidente. Vemos que existen en esta representación unos picos que indican claramente una resonancia; estos picos coinciden con la frecuencia de resonancia plasmónica dipolar (Ecuación (2.41)), cuya existencia explicamos anteriormente, y cuyos valor obtenido es 7.9 PHz (equivalentes a 5.2 eV o 238.3 nm en unidades de energía y longitud de onda), en concordancia con el valor teórico, que resulta ser 7.91 PHz ([Dru, ]). El caso del Au es muy similar, para el cual si realizamos los cálculos obtenemos una frecuencia de resonancia de 7.92 PHz (equivalentes en este caso a 5.21 eV o 237.8 nm), que coincide con su predicción teórica ([Dru, ]).

Asimismo, dado que según el desarrollo llevado a cabo en este capítulo existe la analogía entre estos materiales y elementos de circuito, representamos las características electrónicas equivalentes para nuestra nanoesfera de plata. De este modo, vemos que la parte imaginaria de la permitividad resulta en todos los casos equivalente a una resistencia, y la conductancia correspondiente puede calcularse mediante la ecuación (2.29), y que pode-

mos ver en la Figura 2.9 junto al valor de la capacidad equivalente dado por la ecuación (2.30) para aquellos valores en los que  $Re(\epsilon) > 0$  y también junto al de la inductancia (2.33) en el caso contrario.

Es interesante hacer notar que la transición de  $Re(\epsilon) < 0$  a  $Re(\epsilon) > 0$  ocurre a una energía de 8.2834 eV (2.003 PHz) para Ag (7.8731 eV (1.903 PHz) para Au), ambos fuera del rango inicial que habíamos considerado.

Presentamos a continuación el resultado de nuestra simulación para una longitud de onda  $\lambda_0 = 633$  nm (equivalente a 1.96 eV), y la comparación de éstos valores con los obtenidos por Engheta [Engheta et al., 2005], quien considera una permitividad para la plata  $\epsilon_{Ag} = (-19 + i0.53)\epsilon_0$  a esta frecuencia.

	<b>Valor Artículo</b>	<b>Valor Obtenido</b>
$L_{Esfera}$	7.12 femtoH	8.015 femtoH
$G_{Esfera}$	1.32 mS	1.088 mS
$C_{Entorno}$	1.67 attoF	1.67 attoF

Como podemos observar, los valores son muy aproximados. Cabe destacar que no hay una representación gráfica de  $C_{Entorno}$  en la Figura 2.9 dado que el valor de esta capacidad es constante, ya sea el vacío (como en este caso) como cualquier otro medio puramente dieléctrico.

Vemos entonces que estos conceptos abren nuevas posibilidades para la miniaturización de circuitos eléctricos; circuitos tradicionales en RF y a más bajas frecuencias, basados en la corriente de conducción circulando por metales, no pueden simplemente reducirse de escala para funcionar a frecuencias ópticas o infrarrojas debido a los efectos capacitivos que a esas frecuencias afectan a los metales alterando sus propiedades. No obstante, introduciendo conjuntos de nanopartículas plasmónicas y no plasmónicas como elementos básicos de nanocircuitos ópticos, del mismo modo en que hemos planteado analogías entre circuitos ópticos y los electrónicos (modelando con metamateriales el comportamiento eléctrico de elementos tales como resistencias, condensadores y bobinas) para altas frecuencias, podemos tratar de modelar algunas de sus funciones más comunes. Un ejemplo que consideraremos en la siguiente sección tratará el caso de una antena, y la reducción de este problema a la metananocircuitería.

## 3. CAPÍTULO

---

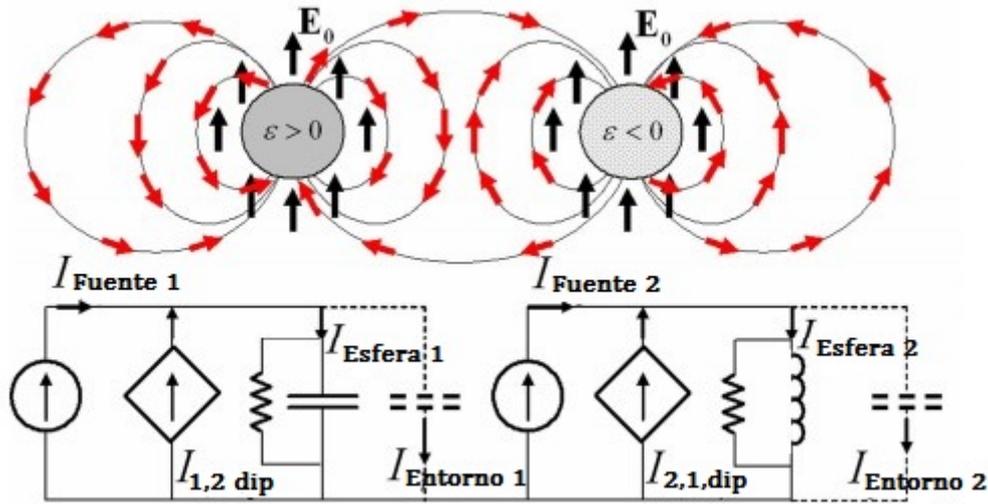
### Nanodímero plasmónico

---

Amplíemos ahora la extensión de nuestro desarrollo: dado que nos interesa ser capaces de crear sistemas complejos y trasladar así mediante nuestra analogía a altas frecuencias sus posibles aplicaciones, analizaremos como paso intermedio entre una nanopartícula y un material compuesto de éstas el caso de dos nanoesferas, seguido del estudio del uso potencial de este sistema como nanoantena. Veremos por tanto el caso de dos partículas ubicadas una en la proximidad de la otra a fin de estudiar las interacciones entre los elementos de circuito, y añadir esa interacción a los modelos de circuito que tenemos para una partícula aislada ([Alù et al., 2007]).

#### 3.0.4. Dos partículas esféricas interaccionantes

Consideremos dos esferas de radios  $a_1$  y  $a_2$  y permitividades  $\epsilon_1$  y  $\epsilon_2$  respectivamente, cuyos centros están separados una distancia  $d$ . En este caso, los campos que en el capítulo anterior llamábamos "de *entorno*" dipolar de ambas esferas interactúan el uno con el otro y se modifican por causa de la presencia de la otra partícula, alterando la representación que haríamos en principio de cada una de las dos nanoesferas. Consideraremos en primera aproximación que estamos lejos de órdenes de resonancia altos, de modo que la interacción se puede tomar como dipolar. En el desarrollo siguiente demostramos que esta configuración y similares se pueden tratar como nanocircuitos acoplados, de modo que cada uno de ellos represente una nanoesfera (al igual que en el caso anterior), añadiendo una fuente dependiente que modelará el efecto de una esfera sobre la otra (ver Figura 3.1).



**Figura 3.1:** Circuito equivalente para dos nanoesferas plasmónicas que interactúan entre sí a frecuencias ópticas, de manera que el acoplamiento entre ellas genera un término adicional en el diagrama que planteábamos para una esfera en la Figura 2.3: una fuente de corriente dependiente, que modelará para cada esfera el efecto del acoplamiento entre ambas ([Alù et al., 2007]).

Suponiendo la esfera 1 en el origen de coordenadas y la esfera 2 a una distancia  $d$ , las ecuaciones de los campos para cada una de ellas resultan ser, por extensión de las expresiones vistas en el capítulo anterior y en coordenadas esféricas:

$$\text{Esfera 1} = \begin{cases} \mathbf{E}_1^{\text{Int}} = \frac{3\epsilon_0}{\epsilon_1 + 2\epsilon_0} (\mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_{12}) & , r < a_1 \\ \mathbf{E}_1^{\text{Ext}} = \mathbf{E}_0 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[ \frac{3(\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{r}) \cdot \mathbf{r}}{r^5} - \frac{\mathbf{p}_1}{r^3} \right] & , r > a_1 \\ \mathbf{p}_1 = 4\pi\epsilon_0 \left( \frac{\epsilon_1 - \epsilon_0}{\epsilon_1 + 2\epsilon_0} \right) a_1^3 (\mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_{12}) \end{cases} \quad (3.1)$$

$$\text{Esfera 2} = \begin{cases} \mathbf{E}_2^{\text{Int}} = \frac{3\epsilon_0}{\epsilon_2 + 2\epsilon_0} (\mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_{21}) & , r < a_2 \\ \mathbf{E}_2^{\text{Ext}} = \mathbf{E}_0 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[ \frac{3(\mathbf{p}_2 \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{d})) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{d})}{(r - d)^5} - \frac{\mathbf{p}_2}{(r - d)^3} \right] & , r > a_2 \\ \mathbf{p}_2 = 4\pi\epsilon_0 \left( \frac{\epsilon_2 - \epsilon_0}{\epsilon_2 + 2\epsilon_0} \right) a_2^3 (\mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_{21}). \end{cases} \quad (3.2)$$

En estas expresiones, como se puede observar, a la contribución de  $\mathbf{E}_0$  se le suma el efecto del campo creado por la otra esfera, siendo así  $\mathbf{E}_{12}$  el campo originado por la segunda

esfera evaluado en el centro de la primera, y viceversa para  $\mathbf{E}_{21}$ . Ahora  $\mathbf{p}_1$  y  $\mathbf{p}_2$  son los momentos dipolares inducidos en las esferas 1 y 2, respectivamente. Dado que  $\mathbf{E}_{12}$  es entonces la contribución dipolar de la segunda esfera en  $\mathbf{r} = 0$ , y  $\mathbf{E}_{21}$  es la de la primera esfera evaluada en  $\mathbf{r} = \mathbf{d}$ , si despejamos las expresiones:

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_{12} &= \mathbf{E}_2^{\text{Ext}}|_{\mathbf{r}=0} - \mathbf{E}_0 = \frac{\mathbf{p}_2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{d}|^3\mathbf{I}} \left[ \frac{3(-\mathbf{d})(-\mathbf{d})}{|\mathbf{d}|^2} - \mathbf{I} \right] \\ \mathbf{E}_{21} &= \mathbf{E}_1^{\text{Ext}}|_{\mathbf{r}=\mathbf{d}} - \mathbf{E}_0 = \frac{\mathbf{p}_1}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{d}|^3\mathbf{I}} \left[ \frac{3(\mathbf{d})(\mathbf{d})}{|\mathbf{d}|^2} - \mathbf{I} \right].\end{aligned}\quad (3.3)$$

Considerando  $\mathbf{D} = \frac{\mathbf{d}\cdot\mathbf{d}}{|\mathbf{d}|^2}$ ,  $\mathbf{I}$  como la matriz identidad, y llamando asimismo  $\gamma_i = \frac{\epsilon_i - \epsilon_0}{\epsilon_i + 2\epsilon_0} a_i^3$ , las ecuaciones se reducen a:

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_{12} &= \frac{(3\mathbf{D} - \mathbf{I})\gamma_2}{|\mathbf{d}|^3\mathbf{I}} (\mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_{21}) \\ \mathbf{E}_{21} &= \frac{(3\mathbf{D} - \mathbf{I})\gamma_1}{|\mathbf{d}|^3\mathbf{I}} (\mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_{12}),\end{aligned}\quad (3.4)$$

de donde obtenemos:

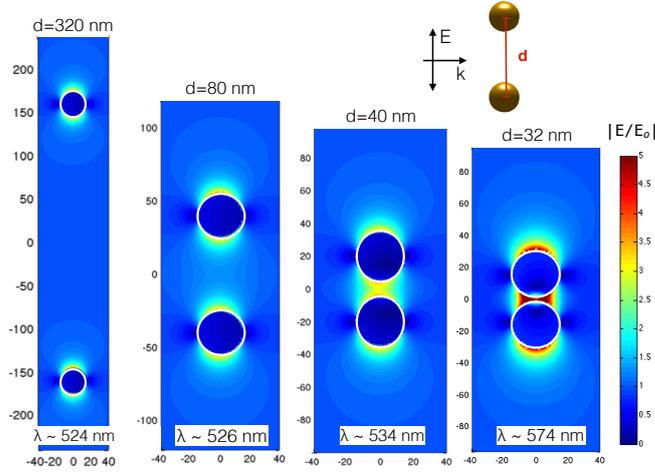
$$\begin{aligned}\mathbf{E}_{12} &= \frac{(|\mathbf{d}|^3\mathbf{I} + (3\mathbf{D} - \mathbf{I})\gamma_1)(3\mathbf{D} - \mathbf{I})\gamma_2}{|\mathbf{d}|^6\mathbf{I} - (3\mathbf{D} - \mathbf{I})^2\gamma_2\gamma_1} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{E}_{21} &= \frac{(|\mathbf{d}|^3\mathbf{I} + (3\mathbf{D} - \mathbf{I})\gamma_2)(3\mathbf{D} - \mathbf{I})\gamma_1}{|\mathbf{d}|^6\mathbf{I} - (3\mathbf{D} - \mathbf{I})^2\gamma_2\gamma_1} \mathbf{E}_0,\end{aligned}\quad (3.5)$$

que podemos escribir finalmente en la forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}_{12} \\ \mathbf{E}_{21} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |\mathbf{d}|^3\mathbf{I} & -\gamma_2(3\mathbf{D} - \mathbf{I}) \\ \gamma_1(3\mathbf{D} - \mathbf{I}) & -|\mathbf{d}|^3\mathbf{I} \end{pmatrix}^{-1} \cdot \begin{pmatrix} \gamma_2(3\mathbf{D} - \mathbf{I})\mathbf{E}_0 \\ -\gamma_1(3\mathbf{D} - \mathbf{I})\mathbf{E}_0 \end{pmatrix}.\quad (3.6)$$

Esas expresiones son para una orientación arbitraria tanto de  $\mathbf{d}$  como de  $\mathbf{E}_0$ , de manera que la ecuación (3.6) es de validez general. Consideremos, no obstante, dos casos de especial interés.

Si  $\mathbf{d} \parallel \mathbf{E}_0$ , es decir, si el campo incidente está polarizado a lo largo de la línea que une ambas partículas como en el caso de la Figura 3.2, obtenemos la expresión:



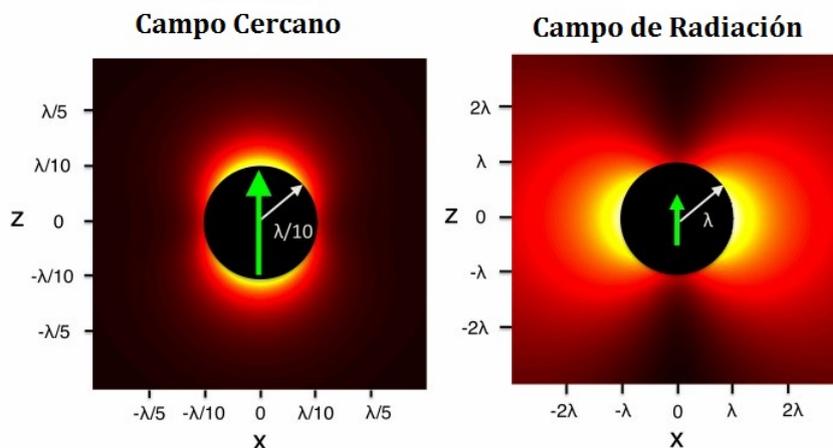
**Figura 3.2:** Distribución de campo eléctrico para dos nanoesferas de oro, cada una de radio  $a=15\text{nm}$ , separadas una distancia  $d$  entre sus centros (esto quiere decir que, en caso de que  $d = 30\text{ nm}$ , las esferas se estarían tocando) [Urbiet, 2015]. Se puede observar cómo para  $d$ -s grandes frente al tamaño de las propias esferas no hay interacción, mientras que la reducción de esta distancia concentra el campo entre ambas. En el caso límite en el que es espacio entre las dos esferas es pequeño frente al tamaño del sistema compuesto por ambas, puede observarse una concentración muy grande del campo eléctrico entre ambas, una propiedad del dímero que, como se verá más adelante, será la que le dote de su comportamiento característico a altas frecuencias.

$$\begin{cases} \mathbf{E}_{12} = \frac{2\gamma_2(d^3+2\gamma_1)}{d^6-4\gamma_1\gamma_2}\mathbf{E}_0 \\ \mathbf{E}_{21} = \frac{2\gamma_1(d^3+2\gamma_2)}{d^6-4\gamma_1\gamma_2}\mathbf{E}_0, \end{cases} \quad (3.7)$$

mientras que si  $\mathbf{d} \perp \mathbf{E}_0$ , el campo incidente está polarizado perpendicularmente a la línea que une ambas partículas, como en la Figura 3.1:

$$\begin{cases} \mathbf{E}_{12} = \frac{\gamma_2(2\gamma_1-d^3)}{d^6-4\gamma_1\gamma_2}\mathbf{E}_0 \\ \mathbf{E}_{21} = \frac{\gamma_1(2\gamma_2-d^3)}{d^6-4\gamma_1\gamma_2}\mathbf{E}_0. \end{cases} \quad (3.8)$$

En estos dos casos  $\mathbf{E}_{12} \parallel \mathbf{E}_{21} \parallel \mathbf{E}_0$ , lo que implica que la acción de una esfera sobre la otra sólo añade un término al circuito equivalente como representación del acoplamiento. Añadimos por tanto fuentes dependientes de valores:



**Figura 3.3:** Sección del plano XZ para el campo eléctrico generado por un dipolo puntual en el origen y orientado según el eje Z en función de la longitud de onda del campo incidente. En el caso de la zona cercana (a la izquierda), el campo se concentra en los extremos del dipolo, mientras que a medida que nos alejamos hacia la zona de radiación, la que predomina es la contribución transversal al eje del dipolo, en concordancia con el esquema de la Figura 3.4 ([García-Etxarri, 2010]).

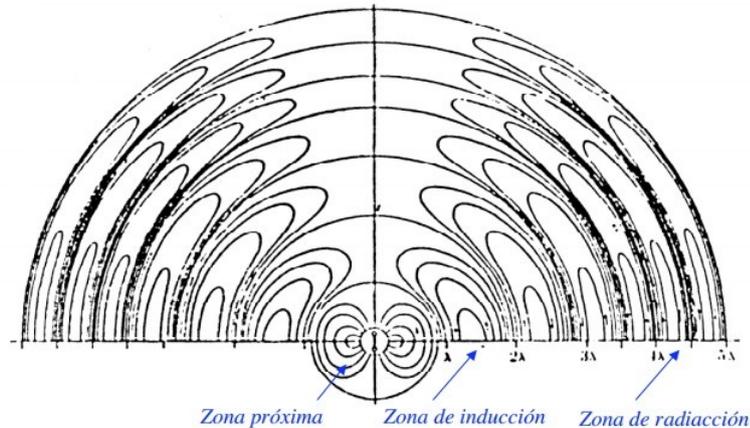
$$\begin{aligned} \mathbf{I}_{12} &= -i\omega\pi |\mathbf{E}_{12}| (\epsilon_1 - \epsilon_0) a_1^3 \\ \mathbf{I}_{21} &= -i\omega\pi |\mathbf{E}_{21}| (\epsilon_2 - \epsilon_0) a_2^3, \end{aligned} \quad (3.9)$$

que se pueden obtener haciendo la integral de área para cada esfera como en el Capítulo 2. Podemos ver que en los dos casos los campos  $\mathbf{E}_{12}$  y  $\mathbf{E}_{21}$  dependen de la geometría de ambas esferas, lo que demuestra que en efecto los dos circuitos están acoplados, como se muestra en la Figura 3.1.

La Figura 3.2 muestra la distribución del campo eléctrico para dos nanoesferas de oro, de 15 nm de radio, separadas una distancia  $d$  (medida desde los centros de ambas esferas). Vemos cómo a grandes distancias apenas si se percibe una interacción, y cómo a medida que reducimos  $d$  el campo se concentra notablemente en el espacio entre las dos esferas. Este hecho será el responsable del uso potencial que describiremos para el dímero a continuación: el de nanoantena.

Para ello dejamos a un lado el campo electrostático (entorno en el que hemos estado trabajando hasta ahora), para centrarnos en el campo de radiación. Para el campo generado por un dipolo variable podemos definir tres zonas distintas: el campo electrostático, dominante en las zonas cercanas; el campo de inducción, que predomina en las zonas intermedias, y el campo de radiación, que es el que predomina a largas distancias y, por tanto, el de

*Líneas de campo para un dipolo variable (transición de zonas)*



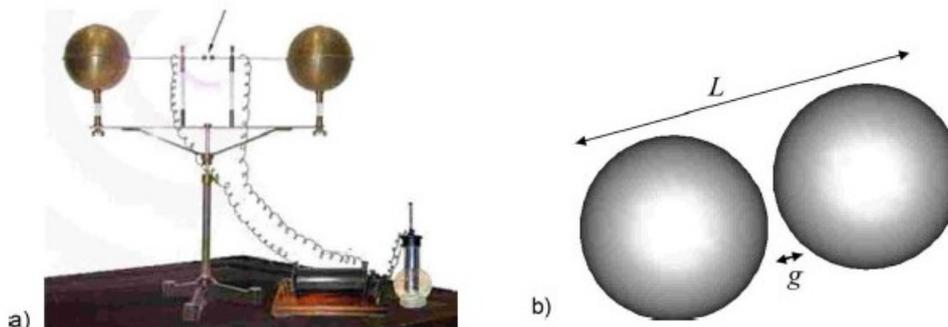
**Figura 3.4:** Diagrama de las líneas del campo eléctrico generado por un dipolo, en el cual se señalan las diferentes zonas en función de la contribución predominante: la electrostática a distancias cercanas, la de inducción a distancias intermedias, y la de radiación a grandes distancias [Barandiarán, 2011].

mayor interés en referencia a las antenas (ver Figuras 3.4 y 3.3).

### 3.0.5. Nanodímero plasmónico como nanoantena

De manera similar a la que Hertz planteara en la creación de las primeras antenas (Figura 3.5a), consideraremos dos esferas separadas una distancia  $g$  entre sí, de manera que  $g \ll L$  (ver Figura 3.5b), si bien la distancia  $L$  permanece comparable a la longitud de onda de operación ([Engheta and Alù, 2008]). En este punto encontramos la primera diferencia con la clásica antena RF, cuyo tamaño conlleva a que se comporte como un dipolo corto a todos los efectos. En nuestro caso, el puerto de alimentación podrá considerarse como una línea de nanotransmisión óptica o un láser incidente sobre la nanoantena, en el gap entre las dos esferas. El nanodímero se considerará conformado por dos nanoesferas de plata, teniendo en cuenta dispersión de frecuencias  $\varepsilon(\omega)$  y pérdidas por su permitividad realistas.

La Figura 3.6a) muestra los picos de campo eléctrico radiados por el nanodímero frente a la frecuencia; podemos apreciar un desplazamiento notable del pico de resonancia dominante en los tres casos considerados, que difieren en cuanto a las partículas que ocupan el espacio del gap entre las dos nanoesferas: aire ( $\varepsilon = \varepsilon_0$ ),  $Si_3N_4$  ( $\varepsilon = 4,1\varepsilon_0$ ) y



**Figura 3.5:** Comparación de la primera Antena de Hertz (a) con un nanodímero de plata a escala plasmónica (b) que será objeto de nuestro estudio, que consiste en dos nanoesferas de plata separadas una distancia  $g$  cuyo valor será mucho menos que  $L$  ([Engheta and Alù, 2008]).

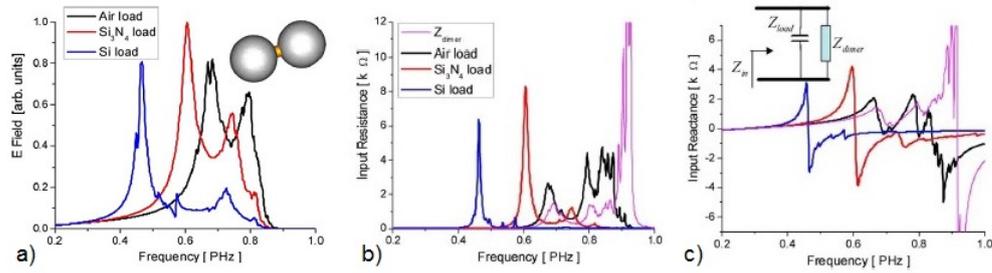
Si ( $\epsilon = 13,37\epsilon_0$ ). Dado que, en consistencia con el caso estudiado en el Capítulo 2, un material cuya parte real de la permitividad es positiva posee un comportamiento capacitivo, un aumento en la capacidad de la carga en el gap (aumentando su permitividad) hará que el pico resonante se desplace a valores de frecuencia menores. Hay dos factores remarcables en este hecho:

- El gran rango de frecuencias de resonancia que podemos conseguir con tan sólo variar las partículas en el gap entre las esferas (varios cientos de THz).
- La gran sensibilidad asociada a la carga en el gap.

Estas dos características se deben a la geometría concreta de la antena, que asegura una orientación específica del campo eléctrico y una gran concentración de éste en la carga entre las esferas, haciéndole interactuar con las partículas en el gap.

Podemos ver en la Figura 3.6(b y c) la resistencia y la reactancia de entrada de la antena evaluada en el gap para las distintas permitividades del material considerado en el mismo. También se puede observar la impedancia intrínseca del dímero,  $Z_{dimer}$ , representada en una línea fina de color morado. Para obtenerla, no tenemos más que hacer un sencillo cálculo: tomaremos cualquiera de las líneas gruesas y, restando la parte correspondiente a la impedancia de la carga en el gap,  $Z_{carga}$ , obtendremos el valor intrínseco de la impedancia del dímero. La impedancia de la carga se obtiene mediante la expresión analítica:

$$Z_{carga} = \left( -i\omega\epsilon \frac{\pi r^2}{g} \right)^{-1}, \quad (3.10)$$

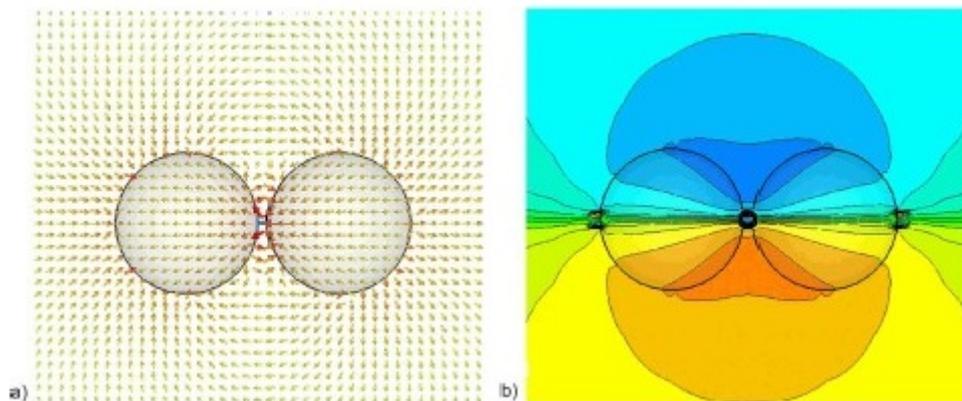


**Figura 3.6:** a) Representación del campo eléctrico frente a la frecuencia angular para un dímero de nanoesferas de plata con un gap cilíndrico de tres materiales distintos, con los valores  $L = 100$  nm,  $g = 3$  nm y  $r = 3$  nm, alimentado por un puerto de  $10$  k $\Omega$ . b) y c) Impedancia (Resistencia y Reactancia de entrada)  $Z_{in}$  en el gap para los distintos materiales considerados en a) para éste. Cabe destacar la presencia de la línea delgada de color morado en las dos gráficas, que representa la impedancia intrínseca del propio dímero, que puede obtenerse de cualquiera de las otras tres tras restarle a las medidas de la simulación el valor de la impedancia de la carga, dado que ésta puede calcularse analíticamente mediante la ecuación (3.10) [Engheta and Alù, 2008].

donde hemos considerado la capacidad asociada a un condensador cilíndrico de radio  $r$  y altura  $g$ , y un material de permitividad  $\epsilon$ . Haciendo el cálculo de esta magnitud para cada frecuencia de cualquiera de las tres curvas y restándolo del valor de la impedancia total del dímero, se obtiene indistintamente el mismo valor para la impedancia y resistencia intrínsecas del dímero (ver Figura 3.6b y c). Esto es debido a la concentración y dirección del campo eléctrico en el gap, que nos permite tratar la carga en el mismo como un condensador, aplicando las nociones del Capítulo 2. Además, el valor que obtenemos para  $Z_{dimero}$  es independiente de la forma de la excitación externa que se utilizará en la realidad, permitiéndonos tratar los terminales de la antena como un elemento de impedancia.

Dado el alto valor de la impedancia de entrada que hemos considerado, el pico de resonancia del sistema se halla muy próximo a la frecuencia de resonancia de circuito abierto de la antena, es decir, en el rango de frecuencias en que  $Z_{carga}$  y  $Z_{dimero}$  entran en resonancia. De la fórmula que nos da el valor analítico de  $Z_{carga}$  podemos apreciar el gran rango de frecuencias de resonancia que podríamos abarcar con tan solo variar el diseño de la carga en el gap. De este modo la posibilidad de sintonizar la nanoantena podría ser fácil de conseguir tan sólo variando parámetros geométricos o electromagnéticos de la carga que une el dímero.

En la Figura 3.7 podemos ver las distribuciones de campo eléctrico y magnético en el plano de  $E$  para nuestro nanodímero con un gap de aire ( $\epsilon = \epsilon_0$ ) y a una frecuencia de resonancia de 665 THz. Si miramos la primera de las imágenes, observamos una fuerte

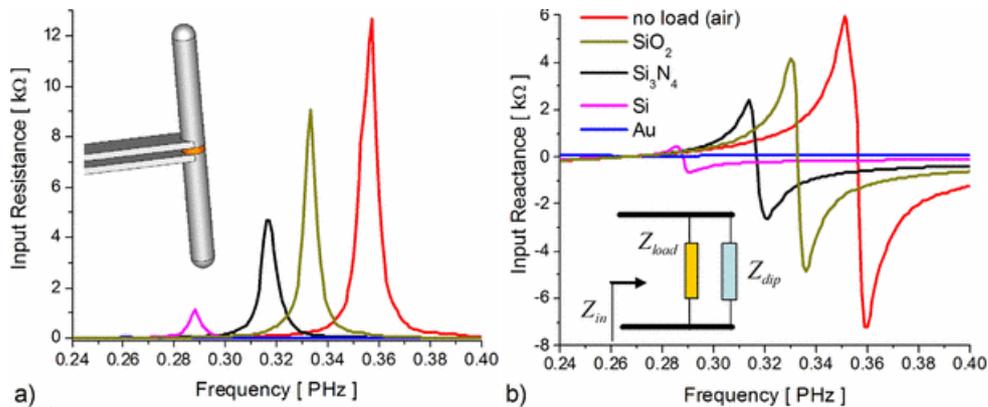


**Figura 3.7:** Distribución del campo eléctrico (a) y magnético (b) para un nanodímero de plata, alimentado en la carga a una frecuencia de resonancia de  $f = 665$  THz, con la permitividad de ésta  $\epsilon = \epsilon_0$ . Puede apreciarse la gran concentración de campo eléctrico en el gap entre las dos esferas, responsable de la sensibilidad de la nanoantena a las variaciones en el mismo. ([Engheta and Alù, 2008])

concentración del campo eléctrico en el gap, al igual que en la Figura 3.2 para  $d=32$  nm; es pues este hecho el que hace a la antena tan sensible a los cambios en la permitividad del material entre las dos nanoesferas, y lo que hace a esta construcción tan potencialmente capaz de sintonizar y desplazar las frecuencias de resonancia asociadas a la impedancia de entrada variando la permitividad de la carga. También podemos apreciar en esta imagen que la corriente de desplazamiento penetra en el interior del nanodímero y se propaga rápidamente por todo su volumen, lo que convierte a nuestra antena en una estructura diferente al nanodipolo convencional.

El nanodipolo convencional es una construcción análoga a la antena dipolar más común, creada a partir de dos varillas muy próximas (Figura 3.8). A diferencia del nanodímero, el nanodipolo confina la corriente de desplazamiento en un espacio limitado. Esto hace que el primero sea menos sensible a las pérdidas de material; la concentración reducida de la corriente de desplazamiento permite incluso desplazar la frecuencia de resonancia de esta nanoantena, en comparación a un nanodipolo de la misma longitud  $L$ . Así, un nanodipolo de longitud  $L = 100$  nm resonaría a una frecuencia de 350 THz, que es prácticamente el doble de la longitud de onda óptica.

Este comportamiento se puede comprobar en las figuras 3.6 (b y c) y 3.8 (a y b), en las cuales se representa la impedancia de entrada para el dímero y para un nanodipolo convencional respectivamente. Podemos ver cómo, en efecto, la estructura del nanodímero



**Figura 3.8:** Representación de la impedancia de entrada (resistencia y reactancia) para un nanodipolo cilíndrico alargado con  $L=110$  nm de puntas redondeadas, cuyo gap se ha llenado con discos de distintos materiales. Podemos apreciar en las curvas para aire,  $\text{Si}_3\text{N}_4$  y  $\text{Si}$ , que también representábamos en la figura 3.6, cómo la resonancia ocurre cerca de la mitad del valor para el que ocurriría con el nanodímero. Podemos además observar que el cambio de material en el gap, si bien desplaza la frecuencia de resonancia del nanodipolo, lo hace de manera menos apreciable que en el primer caso, lo que indica una menor concentración del campo en el gap del nanodipolo que en el nanodímero que hemos tratado a lo largo de todo el capítulo. ([Alù and Engheta, 2008])

nos provee frecuencias de resonancia cercanas al doble de lo que actualmente provee la estructura del nanodipolo, demostrando que la estructura de las dos esferas es una estructura potencial a tener en cuenta de cara a transmitir información a altas frecuencias.

Este fenómeno es muy poco intuitivo dado que, considerando términos del clásico diseño RF, una reducción en el tamaño de la antena correspondería a un aumento de la frecuencia de resonancia. No obstante, los plasmones aumentan su frecuencia de resonancia operacional debido a la menor concentración de los campos alrededor de las superficies plasmónicas. Esta es la razón exacta para el distinto comportamiento resonante, confirmado por la figura 3.7 (a y b).

Concluimos, pues, que esta geometría específica del nanodímero es la artífice de su alta eficiencia y de su potencial; puede que en el futuro sea posible operar a frecuencias ópticas utilizando conceptos familiares de RF transplantados a frecuencias mucho mayores de manera sencilla mediante un esquema circuital.

## 4. CAPÍTULO

---

### Conclusiones y trabajo futuro

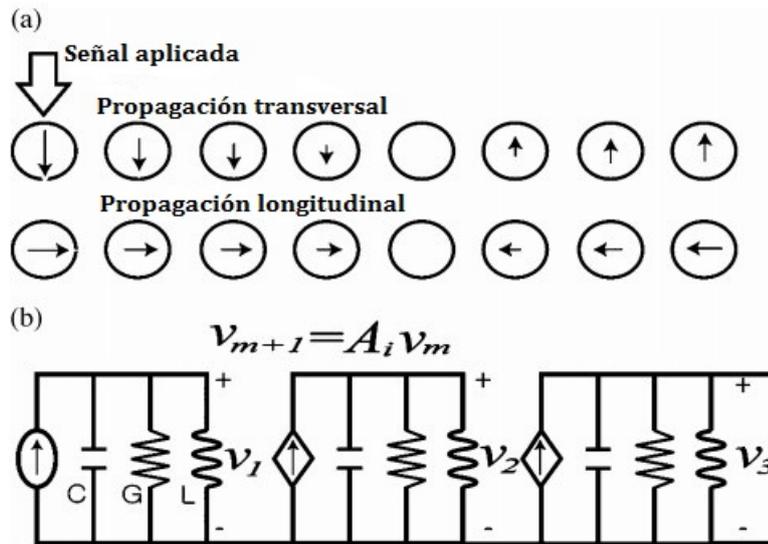
---

Hemos visto cómo, efectivamente, podemos desarrollar de manera efectiva un sistema que nos provee una equivalencia válida para modelar el comportamiento de los materiales a altas frecuencias mediante las nociones ya conocidas en la teoría de circuitos. De este modo, podemos representar cualquier material haciendo uso de elementos básicos como fuentes, resistencias, condensadores y bobinas.

Asimismo, hemos estudiado la interacción entre estos materiales, obteniendo en el Capítulo 3 el circuito equivalente para dos esferas próximas entre sí. Esta modelización del comportamiento entre esferas es la base que puede guiar al diseño de metamateriales creados con partículas como las estudiadas para diferentes fines. Un ejemplo es el que vemos en la Figura 4.1, que no es sino una extensión del caso tratado anteriormente a un conjunto de esferas que sirven como guía de onda plasmónica de altas frecuencias.

Aunque las posibilidades son muchas; la teoría de circuitos equivalentes nos provee de herramientas para estudiar múltiples casos y materiales, estudio que se llevará a cabo en un futuro Trabajo de Fin de Grado de Ingeniería Electrónica, en el que sistemas compuestos más complejos (p.ej.: una lámina metálica) serán trasladados a problemas resolubles mediante la teoría de circuitos.

Los usos potenciales de esta analogía son múltiples: trabajar a altas frecuencias no sólo nos proveerá más rapidez o un ancho de banda mucho mayor para la transmisión de información, sino la posibilidad de diseñar materiales haciendo uso de las bases de la electrónica ya conocida, lo que implicaría que la reducción de escala de los circuitos



**Figura 4.1:** a)Oscilación longitudinal y transversal de una cadena de plasmones acoplados, sobre su representación circuital análoga representada en b) ([Song and Mazumder, 2009]).

manteniendo sus funcionales sería algo factible, suponiendo esto un avance con aplicaciones revolucionarias no sólo en electrónica y comunicaciones, sino en campos como la medicina, la biología o la óptica.

---

## Bibliografía

---

- [Dru, ] Drude Parametres. [http://www.nature.com/ncomms/journal/v1/n2/fig\\_tab/ncomms1015\\_T2.html](http://www.nature.com/ncomms/journal/v1/n2/fig_tab/ncomms1015_T2.html).
- [Esp, ] Espectro electromagnético. [https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/b/b6/Electromagnetic\\_spectrum-es.svg](https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/b/b6/Electromagnetic_spectrum-es.svg).
- [Abasahl et al., 2014] Abasahl, B., Santschi, C., and Martin, O. J. F. (2014). Quantitative Extraction of Equivalent Lumped Circuit Elements for Complex Plasmonic Nanostructures. *ACS Photonics*.
- [Alù and Engheta, 2008] Alù, A. and Engheta, N. (2008). Input Impedance, Nanocircuit Loading, and Radiation Tuning of Optical Nanoantennas. *Physical Review Letters PRL101, 043901*, page 3.
- [Alù et al., 2007] Alù, A., Salandrino, A., and Engheta, N. (2007). Coupling of optical lumped nanocircuit elements and effects of substrates. *Optical Society of America*, pages 13865–13871.
- [Barandiarán, 2011] Barandiarán, J. (2011). Apuntes de Electromagnetismo II.
- [Engheta, 2007] Engheta, N. (2007). Circuits with Light at Nanoscales: Optical Nanocircuits Inspired by Metamaterials. *Sciencemag VOL 317*, page 1698.
- [Engheta, 2010a] Engheta, N. (2010a). Taming light at the nanoscale. *Physics World 23*, page 31.
- [Engheta, 2010b] Engheta, N. (2010b). Taming light at the nanoscale. *Physics World 23*, page 33.

- [Engheta and Alù, 2008] Engheta, N. and Alù, A. (2008). Hertzian plasmonic nanodimer as an efficient optical nanoantenna. *Physical Review*, 195111.
- [Engheta et al., 2005] Engheta, N., Salandrino, A., and Alù, A. (2005). Circuit Elements at Optical Frequencies: Nanoinductors, Nanocapacitors and Nanoresistors . *Physical Review Letters PRL* 95, 095504, page 2.
- [García-Etxarri, 2010] García-Etxarri, A. (2010). *Modelization of plasmonic nanoantennas for optical microscopy and surface enhanced spectroscopy*. PhD thesis, UPV-EHU, Leioa.
- [Pérez, 2011] Pérez, O. (2011). *Optical properties and high-frequency electron transport in plasmonic cavities*. PhD thesis, UPV-EHU, Leioa.
- [Song and Mazumder, 2009] Song, K. and Mazumder, P. (2009). An Equivalent Circuit Modeling of an Equispaced Metallic Nanoparticles (MNPs) Plasmon Wire. *IEEE Transactions on Nanotechnology*.
- [Teperik et al., 2005] Teperik, T. V., Popov, V. V., and de Abajo, F. J. G. (2005). Void plasmons and total absorption of light in nanoporus metallic films. *The American Physical Society*.
- [Urbieto, 2015] Urbieto, M. (2015). Cálculos desarrollados con el toolbox para MATLAB, MNPBEM.