



INAOE

**“Obtención de los campos electromagnéticos
cuasi-estáticos creados por un dipolo eléctrico en
la cercanía de dos nano-esferas dieléctricas
(dímero) mediante la transformación de
inversión: excitación dipolar de resonancias
plasmónicas”**

por

Ing. Adrián Isrrael Tec Chim

Tesis sometida como requisito parcial para
obtener el grado de

**MAESTRO EN CIENCIAS
EN LA ESPECIALIDAD DE ELECTRÓNICA**

en el

Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica

Mayo 2014
Tonantzintla, Puebla
Supervisada por:

Dr. Jorge Roberto Zurita Sánchez
Investigador Titular del INAOE

© INAOE 2014

El autor otorga al INAOE el permiso de reproducir y
distribuir copias en su totalidad o en
partes de esta tesis



AGRADECIMIENTOS

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por apoyarme con la beca de maestría No. 365808.

A mi asesor de tesis el Dr. Jorge Roberto Zurita Sánchez, por la orientación y ayuda para el desarrollo y culminación de esta tesis ya que me permitieron aprender mucho más que lo estudiado en este proyecto.

A mis sinodales Dr. José Javier Sánchez Mondragón, Dr. Edmundo Gutiérrez Domínguez y Dr. Reydezel Torres Torres por los útiles comentarios para mejorar esta tesis.

Índice

1. Introducción	1
2. Transformación de inversión	7
2.1. Regla de mapeo de la transformación de inversión	7
2.2. Propiedades de la transformación de inversión	9
2.3. Transformación de inversión entre dos espacios 3D	9
2.4. Transformación de inversión del dímero	10
3. Potencial eléctrico en el espacio de inversión	14
3.1. Dipolo puntual y su densidad de carga.	17
3.2. Potencial generado por una carga puntual en el espacio de inversión .	19
3.3. Densidad de carga efectiva en el espacio de inversión de un dipolo puntual	22
3.3.1. Dipolo radial	23
3.3.2. Dipolo polar	25
3.3.3. Dipolo azimutal	27
3.4. Potencial de un dipolo puntual en el espacio de inversión	29
4. Potencial y campo eléctrico creado por un dipolo en la cercanía del dímero: ubicación y orientación axial	31

	IV
4.1. Potencial Ψ en el espacio de inversión	32
4.2. Potencial resultante $\Psi(\mathbf{r}_3)$	37
4.3. Condiciones de frontera.	40
4.3.1. Primera condición de frontera	40
4.3.2. Segunda condición de frontera	40
4.4. Matriz de coeficientes	45
4.5. Potencial y campo eléctrico	49
5. Excitación dipolar de las resonancias plasmónicas de un dímero de plata	51
5.1. Constante dieléctrica de un metal noble	52
5.2. Plasmones de superficie en un dímero	55
5.2.1. Metodología para la obtención de los modos	56
5.2.2. Características de los modos	62
5.2.3. Excitación de las resonancias plasmónicas	67
5.3. Resultados	70
5.3.1. Dipolo en el plano de simetría modal	71
5.3.2. Dipolo en la parte superior del dímero	78
5.3.3. Disminución de pérdidas	80
5.3.4. Excitación de modos superiores	83
6. Conclusiones	86
A. Derivación a_1 y z_{c1}	92
B. Derivación de expresiones involucradas en las condiciones de frontera	94

B.1.	$\partial r_3/\partial r$, $\partial r_3/\partial\theta$, $\partial\theta_3/\partial r$ y $\partial\theta_3/\partial\theta$	94
B.2.	Transformación de $z_j \sin \theta$ y $r - z_j \cos \theta$	95
C.	Expresiones explícitas de $\mathcal{L}_1\Psi_\beta^{(\alpha)}$ y $\mathcal{L}_2\Psi_\beta^{(\alpha)}$.	99

Índice de figuras

2.1. Mapeo del punto P al punto Q mediante la transformación de inversión. P (Q) está en el exterior (interior) a la circunferencia C	8
2.2. Transformación de inversión entre dos espacios tridimensionales: el punto P representa el punto en el espacio original y Q el punto en el espacio de inversión. Las coordenadas de θ y ϕ no sufren cambio por la transformación	10
2.3. Geometría del dímero	12
2.4. Geometría resultante en el espacio de inversión de la transformación de un dímero.	13
3.1. Construcción del dipolo radial. (a) Espacio original. (b) Mapeo del dipolo en el espacio de inversión.	24
3.2. Construcción del dipolo polar. (a) Espacio original. (b) Mapeo del dipolo en el espacio de inversión.	26
3.3. Construcción del dipolo azimutal. (a) Espacio original. (b) Mapeo del dipolo en el espacio de inversión.	28
4.1. Configuración de las esferas dieléctricas. (a) Espacio original. (b) Espacio de inversión.	33

- 5.1. Constante dieléctrica de la plata ϵ como una función de la longitud de onda del vacío λ_0 para un medio ilimitado y partículas de radio $a = 5$ nm y 15 nm. (a) $\text{Re}[\epsilon]$. (b) $\text{Im}[\epsilon]$ 55
- 5.2. (a) Analogía del modelo masa-resorte con la descripción de las resonancias plasmónicas del dímero. (b) Diagrama esquemático de la hibridación plasmónica en una nanoestructura compuesta por dos esferas (ilustra el modo de resonancia elemental, esto es, el modo dipolar.) 59
- 5.3. Distribución espacial del potencial de los modos plasmónicos para un dímero con nano-esferas iguales (radio $\bar{R} = 15$ nm). Para $d = 36$ nm: (a) $\Phi_{01}^{(a)}(\mathbf{r})$, (b) $\Phi_{01}^{(s)}(\mathbf{r})$ y (c) $\Phi_{01}^{(c)}(\mathbf{r})$. Para $d = 32$ nm: (A) $\Phi_{01}^{(a)}(\mathbf{r})$, (B) $\Phi_{01}^{(s)}(\mathbf{r})$ y (C) $\Phi_{01}^{(c)}(\mathbf{r})$. Aquí $\mathbf{r} \in$ plano xz 64
- 5.4. Distribución de la carga superficial ρ_s de los modos plasmónicos de orden más bajo ($s = 1$) de la familia $m = 0$ en las interfaces del dímero para $\bar{R} = 15$ nm y $d = 36$ nm. (a) "a", (b) "b" y (c) modo "c". Línea roja discontinua: superficie del dímero. Curva azul continua: ρ_s . 68
- 5.5. Intensidad del campo eléctrico esparcido ($|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2 = A^2 \times 10^n$) creada por un dipolo con momento dipolar $\mathbf{p} = -p\mathbf{n}_z$ localizado en $\mathbf{r}_0 = R_0\mathbf{n}_z$ (plano de simetría modal): (a) $d = 36$ nm y $R_0 = 9.95$ nm; (b) $d = 32$ nm y $R_0 = 5.57$ nm. Intensidad del campo eléctrico del modo $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$: (A) $d = 36$ nm y (B) $d = 32$ nm. Aquí, $\bar{R} = 15$ nm, $A = 1.81[p/1.6 \times 10^{-29} \text{ Cm}] \text{ V/nm}$ (hemos asumido como referencia un dipolo atómico donde la carga del electrón e está separada 1 \AA) y $\mathbf{r} \in$ plano xz 74

- 5.6. Intensidad del campo eléctrico esparcido ($|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2 = A^2 \times 10^n$) creada por un dipolo con momento dipolar $\mathbf{p} = -p\mathbf{n}_z$ localizado en $\mathbf{r}_0 = R_0\mathbf{n}_z$ (plano de simetría modal): (a) $d = 12$ nm y $R_0 = 3.31$ nm; (b) $d = 18$ nm y $R_0 = 7.48$ nm. Intensidad del campo eléctrico del modo $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$: (A) $d = 12$ nm y (B) $d = 18$ nm. Aquí, $\bar{R} = 5$ nm, $A = 1.81[p/1.6 \times 10^{-29}$ Cm] V/nm (hemos asumido como referencia un dipolo atómico donde la carga del electrón e está separada 1 Å) y $\mathbf{r} \in$ plano xz 77
- 5.7. Intensidad del campo eléctrico esparcido ($|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2 = A^2 \times 10^n$) creada por un dipolo con momento dipolar $\mathbf{p} = -p\mathbf{n}_z$ localizado en $\mathbf{r}_0 = (R_0 + d/2 + \bar{R} + \Delta)\mathbf{n}_z$, ($\Delta = 1$ nm). (a) $d = 32$ nm, $\bar{R} = 15$ nm y $R_0 = 37.56$ nm. (b) $d = 12$ nm, $\bar{R} = 5$ nm y $R_0 = 15.31$ nm. Aquí, $A = 1.81[p/1.6 \times 10^{-29}$ Cm] V/nm (hemos asumido como referencia un dipolo atómico donde la carga del electrón e está separada 1 Å) y $\mathbf{r} \in$ plano xz 79
- 5.8. Intensidad del campo eléctrico esparcido ($|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2 = A^2 \times 10^n$) creada por un dipolo con momento dipolar $\mathbf{p} = -p\mathbf{n}_z$ localizado en $\mathbf{r}_0 = z_d\mathbf{n}_z$: (a) $d = 12$ nm y $z_d = R_0 = 3.31$ nm; (b) $d = 12$ nm y $z_d = R_0 + d/2 + \bar{R} + \Delta = 15.31$ nm ($\Delta = 1$ nm). Intensidad del campo eléctrico del modo $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$: (A) $d = 12$ nm y (B) $d = 12$ nm. Aquí, $\bar{R} = 5$ nm, $A = 1.81[p/1.6 \times 10^{-29}$ Cm] V/nm (hemos asumido como referencia un dipolo atómico donde la carga del electrón e está separada 1 Å) y $\mathbf{r} \in$ plano xz 81

- 5.9. Intensidad del campo eléctrico esparcido $|E_{s_j}(\mathbf{r})|^2 = A^2 \times 10^n$ ($j = x, z$) creada por un dipolo con momento dipolar $\mathbf{p} = -p\mathbf{n}_z$ localizado en $\mathbf{r}_0 = R_0\mathbf{n}_z$: (a) $|E_{s_x}(\mathbf{r})|^2$; (b) $|E_{s_z}(\mathbf{r})|^2$. Intensidad del campo eléctrico del modo $|E_{02_j}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ ($j = x, z$): (A) $|E_{02_x}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ y (B) $|E_{02_z}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$. Aquí, $d = 12$ nm, $\bar{R} = 5$ nm, $R_0 = 3.31$ nm, $A = 1.81[p/1.6 \times 10^{-29} \text{ Cm}] \text{ V/nm}$ (hemos asumido como referencia un dipolo atómico donde la carga del electrón e está separada 1 \AA) y $\mathbf{r} \in$ plano xz 84
- B.1. Elección de los signos positivo (línea roja) y negativo (línea azul) de la Ec. (B.14). (a) Sistema original. (b) Espacio de inversión. 98

RESUMEN

Se desarrolla un método basado en la transformación de inversión para obtener el potencial eléctrico Φ cuasi-estático creado por un dipolo oscilante en la vecindad de dos nano-esferas dieléctricas separadas (dímero). En el espacio de inversión, una ecuación de Poisson para otro potencial Ψ debe ser resuelta en la cual la fuente de excitación es una densidad de carga efectiva compuesta por un dipolo puntual y una carga puntual. En particular, se deriva la solución del potencial Φ creado por el dipolo con ubicación y orientación axiales (eje longitudinal del dímero). Nuestro formalismo pudiera proporcionar un enfoque alternativo para explicar las propiedades radiativas de emisores localizados (moléculas), así como interacciones intermoleculares mediadas por campos electromagnéticos. Además, la implementación de este método podría demandar menos recursos computacionales para calcular el campo eléctrico. Por otro lado, se analiza la posibilidad de excitar las resonancias plasmónicas del dímero real (plata) mediante un dipolo. Este análisis usa el método descrito anteriormente para obtener el campo eléctrico que genera el dipolo. Se halla que las pérdidas óhmicas de un metal real impactan fuertemente a la factibilidad de la excitación dipolar de dichas resonancias. Se encuentra que la situación más propicia para lograr la excitación del plasmón es cuando el dipolo está en el punto medio entre las nano-esferas y la separación entre las superficies adyacentes de las nano-esferas (h) sea más reducida (un par de nanómetros). Esto pudiera atribuirse a que conforme h decrece la interacción coulombica entre los electrones de las nanopartículas se hace más fuerte, asimismo el campo externo de excitación que crea el dipolo; por ende las oscilaciones electrónicas sufrirían menos decoherencia. Por lo contrario, el dipolo colocado en la parte superior del dímero genera una distribución de campo totalmente diferente a la ideal. También, si se mantiene la separación h fija, la intensidad del campo eléctrico esparcido es más grande en los dímeros con nano-partículas de menor tamaño. Esto se debe presumiblemente al efecto pararrayos. La estructura espacial compleja del campo de modos plasmónicos de orden superior es muy deteriorada por las pérdidas óhmicas del metal real.

ABSTRACT

We present a method based on the inversion transformation for obtaining the quasi-static potential Φ created by an oscillating dipole in the vicinity of two separate dielectric nanospheres (dimer). In the inversion space, a Poisson equation for another potential Ψ must be solved in which the source is an effective charge density composed of a point dipole and a point charge. We particularly derive the solution of the potential Φ when the dipole is on the dimer longitudinal-axis and oriented along this axis. Our formalism can provide an alternative physical insight for explaining the radiative properties of localized emitters (molecules) as well as intermolecular interactions mediated by electromagnetic fields. In addition, this method can yield to a less computational effort for calculating the electric field. On the other hand, we analyze the possibility of exciting plasmonic resonances of a dimer made of silver by a dipole. Our analysis uses our method for obtaining the electric field created by the dipole. We find that Ohmic losses of a real metal influence significantly the feasibility of dipole excitation of such resonances. We show that the most favorable condition for attaining the excitation of a plasmon occurs when the dipole is placed at the midpoint between nano-spheres and the separation (h) of the empty gap between the nano-spheres becomes is reduced (a couple of nanometers). This can be attributed to fact that as h diminishes the Coulombic interaction between the electrons of the nano-spheres becomes stronger as well as the external excitation-field created by the dipole, implying that electronic oscillations suffer less decoherence. On the contrary, when the dipole is located above the dimer, it creates a electric field distribution completely different than that of the ideal case. Moreover, if the separation h is unchanged, then the field intensity is greater for dimers with nano-particles of smaller size. Presumably, this is due to the lightning rod effect. The complex spatial structure of the field of high order plasmonic modes is severely deteriorated by Ohmic losses of the real metal.

Capítulo 1

Introducción

En los últimos años, los avances tecnológicos han permitido el crecimiento y manipulación de nanoestructuras. Consecuentemente, nuevos desafíos relacionados con el entendimiento de cómo la energía electromagnética es transportada a través de estos objetos diminutos han surgido. Particularmente, la capacidad de las nanopartículas metálicas para concentrar la luz en una extensión mucho menor a la longitud de onda ha desencadenado el estudio de sus propiedades ópticas, a la par con el desarrollo e implementación de dispositivos tales como celdas solares [1], nanoantenas [2, 3], sensores químicos y biológicos [4–6], y agentes para destruir tejidos biológicos (cáncer) [7, 8]. La excitación de oscilaciones colectivas de electrones (plasmones) es responsable de dicho confinamiento de la luz a una escala nanométrica.

Recientemente ha aparecido una área de estudio denominada *óptica de transformación* que permite que el estudio de la propagación de ondas electromagnéticas en un entorno con propiedades geométricas y dieléctricas complejas se simplifique: se aplica una regla adecuada de mapeo entre dos espacios de modo que el entorno inicial se convierte a otro entorno más simple [9]. Este enfoque ha proporcionado un punto de vista diferente para elucidar las propiedades plasmónicas de las nano-

partículas. La respuesta plasmónica de dos nanoalambres metálicos que están muy cerca uno del otro fue examinada usando la transformación óptica [10], revelando sumideros en la respuesta espectral de la sección transversal de esparcimiento y absorción. También, usando el enfoque antes mencionado, la respuesta no-local de la nanoestructura anterior fue analizada en [11, 12] donde se encuentra que esta respuesta comienza a ser significativa cuando la separación entre las partículas es menor que la longitud de decaimiento del plasmón (~ 0.3 nm para metales nobles) causando un corrimiento hacia el azul de las resonancias plasmónicas con respecto a la respuesta local asimismo la reducción del factor dado por la razón entre las magnitudes del campo esparcido y del campo incidente (esta razón es simplemente conocida como *factor de aumento del campo*). Más aún, cuando los nano-alambres se tocan, el espectro plasmónico es discreto, diferente del espectro continuo predicho por la respuesta local [13]. Un análisis, basado en la óptica de transformación, mostró que una nano-estructura compuesta por un par de nano-alambres o nano-esferas en contacto, o un nano-alambre con sección transversal en forma de luna creciente pudieran ser capaces de concentrar la luz en una región nanométrica y con un rango espectral muy amplio [14, 15]. Además, el espectro plasmónico es también continuo incluso para nano-estructuras que exhiben superficies obtusas, tales como estructuras bidimensionales en forma de luna creciente [16]. Posteriormente, usando nuevamente la óptica de transformación, se ha estudiado la respuesta plasmónica de estructuras más complejas como nano-objetos tridimensionales con forma de luna creciente y nano-alambres que se traslapan [17, 18]. Como nota suplementaria, la óptica de transformación también ha sido una poderosa herramienta que ha servido para extender la capacidad manipulativa de la propagación de la luz: por ejemplo, dispositivos de ocultamiento; una revisión extensa de este tópico se encuentra en [19].

En esta tesis, como primer objetivo, presentamos un método que usa la *transformación de inversión* para obtener el potencial cuasi-estático eléctrico $\Phi(\mathbf{r})$ creado por un dipolo eléctrico que se encuentra en la cercanía de un dímero constituido por dos nano-esferas separadas una de otra. Específicamente, derivamos el potencial cuasi-estático creado por un dipolo oscilante que está orientado a lo largo del eje longitudinal del dímero y ubicado sobre ese eje. El enfoque cuasi-estático aproxima el campo eléctrico $\mathbf{E}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)$ [ω es la frecuencia angular de oscilación del dipolo y $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla\Phi(\mathbf{r})$] en la región que rodea al dipolo y al dímero si ambos son contenidos en un volumen $\ll \lambda_0^3$ (siendo λ_0 la longitud de onda en el espacio libre correspondiente a ω). Solamente hemos considerado la respuesta local de la constante dieléctrica, aunque, como mencionamos, los efectos no-locales deben ser tomados en cuenta cuando la separación entre las nano-esferas es < 1 nm (véase también [20–22]).

Cabe mencionar que existen otros estudios en los cuales la transformación de inversión fue aplicada para resolver problemas electromagnéticos. Hace casi siete décadas, Bloch aplicó este método de transformación para analizar los campos magnéticos creados por un dipolo magnético afuera de una esfera con permitividad infinita y por lazos de corriente dentro de una pantalla metálica [23]; más aún, él halló que un dipolo radial es transformado a otro dipolo radial más una carga. Casi un cuarto de siglo atrás, mediante el uso de esta transformación, Lin y Jin [24] encontraron el potencial eléctrico generado por una carga puntual situada en la cercanía de dos esferas dieléctricas. Recientemente, basado en la misma transformación, Pendry *et al.* analizaron (mediante la aproximación cuasi-estática) los modos plasmónicos y la sección transversal de absorción (excitación con onda plana) de un par de nano-esferas

metálicas [25]. Mediante esta transformación, este grupo también ha calculado las fuerzas de van der Waals entre dicho par de nano-partículas [25, 26].

El campo generado por un dipolo está estrechamente relacionado con: propiedades radiativas de átomos o moléculas [27], transferencia de energía intermolecular (Förster) [28], y fuerzas intermoleculares de van der Waals y térmicas [29]; los átomos o moléculas se comportan como dipolos. De ahí que es de suma importancia la comprensión de cómo las nano-estructuras modifican las características radiativas de emisores y las interacciones intermoleculares. Y en el caso de nano-estructuras metálicas, el impacto que tiene la excitación de resonancias plasmónicas sobre los efectos moleculares apenas mencionados. A continuación se enlistan varios trabajos que tratan específicamente sobre la influencia de un dímero sobre las propiedades radiativas de un átomo. En [30, 31], se estudia el decaimiento atómico cuando el emisor está en la cercanía de dímeros conformados por pares de nano-esferas y nano-esferoides, respectivamente; la influencia de las resonancias plasmónica es tomada en cuenta. Modos plasmónicos oscuros (modos que no se pueden excitar con haces de luz) de dímeros hechos con nano-esferoides y bi-pirámides podrían contribuir al decaimiento no-radiativo de un átomo [32]. La eficiencia radiativa cuántica (no toda la energía liberada por la molécula se convierte en radiación) de un átomo en la vecindad de dímeros compuestos de nano-cilindros y nano-esferoides fue estudiada en [33]. En un dímero de nano-alambres rectangulares, se ha obtenido un fuerte aumento del decaimiento radiativo con respecto su contraparte no-radiativa, implicando un aumento en la eficiencia cuántica [34]. Si las longitudes de onda de emisión de una molécula pertenecen al rojo e infrarrojo cercano, entonces el aumento de la rapidez de fluorescencia molecular puede ser más grande en presencia de un par de

nano-cápsulas metálicas que en presencia de una sola nano-partícula [35]. La modificación de las propiedades en una estructura compleja compuesta de dos nano-conos se analiza en [36]. Exceptuado los trabajos [30, 31] donde el campo generado por el dipolo fue obtenido por medio de un marco analítico (el potencial cuasi-estático es expresado por medio de una expansión modal en coordenadas bi-esféricas o esféricas, dependiendo de la geometría de las partículas del dímero), los resultados del resto de los estudios [32–36] fueron obtenidos numéricamente mediante: la técnica de diferencias finitas en el dominio del tiempo, el método de múltiples multipolos, el formalismo con ecuaciones integrales de superficie y el enfoque de aproximación de dipolos discretos.

En esta tesis estudiaremos un dímero con nano-esferas de plata y igual tamaño donde la función dieléctrica de estas partículas es modelada realísticamente. Lo último implica que este material presenta absorción. Por lo tanto, nuestra tesis busca determinar si es verdaderamente posible excitar las resonancias plasmónicas de un dímero realista (absorción) mediante un dipolo orientado a lo largo del eje longitudinal de esa nano-estructura y situado sobre ese eje. Se examina la influencia de la variación del tamaño de las nano-partículas y su separación, y la ubicación axial del dipolo sobre la factibilidad de la excitación dipolar de esas resonancias. Para realizar este análisis, se aplica el método basado en la transformación de inversión que se ha desarrollado en esta tesis para encontrar el campo que genera un dipolo situado en la vecindad de un dímero.

La tesis está organizada de la siguiente manera. El capítulo 2 define la regla de mapeo de transformación de inversión y se establecen sus propiedades generales. También, en ese capítulo, se aplica dicha transformación a un sistema geométrico

particular compuesto por dos esferas separadas entre sí, resultando una geometría conformada por dos esferas concéntricas (el apéndice A complementa este capítulo). En el capítulo 3, se establece la teoría general para determinar el potencial eléctrico creado por un dipolo por medio de la transformación de inversión. Considerando el caso particular de un dímero con partículas esféricas y un dipolo orientado a lo largo del eje longitudinal y ubicado en ese eje, el capítulo 4 presenta la solución del potencial eléctrico en el espacio de inversión que genera este dipolo situado en el mencionado entorno. Además, en este capítulo, se derivan las condiciones de frontera que el potencial debe satisfacer en las interfaces del dímero en el espacio de inversión, éstas son necesarias para hallar dicho potencial. Más aún, las expresiones para obtener el campo eléctrico, a partir del potencial hallado, son incluidas en el mismo capítulo. Los apéndices B y C están relacionados con el contenido de este capítulo. El capítulo 5 trata sobre la excitación dipolar de las resonancias plasmónicas de un dímero de plata. Además, en este capítulo, se detallan las características generales de los modos plasmónicos ideales del dímero, y se describe la obtención y las maneras de excitar dichas resonancias. Por último, en el capítulo 6, se presentan las conclusiones.

Capítulo 2

Transformación de inversión

Una transformación espacial es un mapeo de una región del espacio a otra región en la cual la correspondencia entre dos puntos se establece mediante una regla de mapeo. La transformación que se utilizará para el desarrollo de esta tesis es la de *inversión*. En la sección 1.1 se define la regla de mapeo de la transformación de inversión y sus propiedades generales de dicha transformación se describen en la sección 1.2. La sección 1.3 establece la transformación de inversión entre dos espacios tridimensionales de coordenadas esféricas. En la sección 1.4 la transformación de inversión se aplica de manera particular a nuestro sistema de interés: una geometría compuesta de dos esferas que no son concéntricas y no se traslapan.

2.1. Regla de mapeo de la transformación de inversión

Consideremos una circunferencia C de radio R centrada en el punto O , denominado centro de inversión, asimismo un punto P fuera de la circunferencia (ver Fig. 2.1). Primero desde P se trazan dos tangentes a la circunferencia C las cuales pasan por los puntos T y S de C , luego se traza la cuerda \overline{TS} . El punto medio Q de esta cuerda es el inverso de P . Con lo anterior se puede establecer una correspondencia entre las

distancias de los puntos P y Q respecto al centro de inversión O . De la geometría de la Fig. 2.1 se observa que

$$\cos \beta = \frac{\overline{QO}}{R} = \frac{R}{\overline{PO}}. \quad (2.1)$$

La Ec. (2.1) implica que

$$\overline{PO} \times \overline{QO} = R^2. \quad (2.2)$$

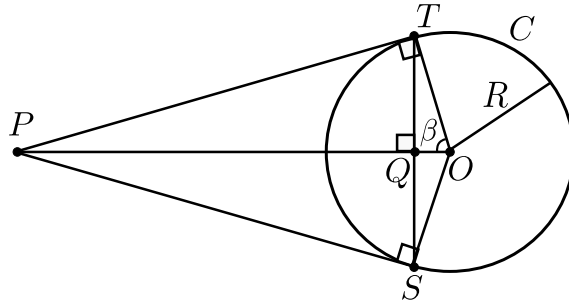


Figura 2.1: Mapeo del punto P al punto Q mediante la transformación de inversión. P (Q) está en el exterior (interior) a la circunferencia C .

Cuando el punto P se encuentra en el interior de C , el punto inverso de P (el punto Q) se halla siguiendo el proceso en orden contrario al descrito anteriormente como se explica a continuación. Primero a través del punto P se traza una línea perpendicular a la recta que pasa por los puntos P y O ; esta línea perpendicular intersectará a la circunferencia C en los puntos T_1 y S_1 . Luego, trazamos las tangentes de C que pasan por estos puntos, y el punto Q se localizará donde se intersectan dichas tangentes y la recta que pasa por P y O . La correspondencia entre las distancias de P y Q con referencia al centro de inversión está dada por la misma relación (2.2), tal como era de esperarse. Nótese que todos los puntos del plano tienen inverso, excepto el centro de inversión.

2.2. Propiedades de la transformación de inversión

Ahora se enumeran algunas propiedades geométricas de la transformación de inversión:

1. La inversión es una transformación simétrica, esto es, si P es el inverso de Q , Q es el inverso de P [ver Fig. (2.1)].
2. Si P es un punto de C , el inverso de P , es el mismo punto P . Dado que $\overline{PO} = R$ implica que $\overline{QO} = R$ [ver Ec. (2.2)].
3. Si P es un punto interior (exterior) a C , \overline{QO} debe ser mayor (menor) que R y por tanto Q es un punto exterior (interior) a C [ver Ec. (2.2)].
4. Las rectas que pasan por el centro de inversión no sufren cambio alguno cuando se aplica la transformación. Las rectas restantes se transforman en circunferencias que pasan por el centro de inversión [37].
5. Toda circunferencia de radio finito que pasa por el centro de inversión se transforma en una recta que no pasa por el centro de inversión [37].
6. Toda circunferencia de radio finito que no pasa por el centro de inversión se transforma en otra circunferencia de radio también finito que no pasa por el centro de inversión [37].

2.3. Transformación de inversión entre dos espacios 3D

Basándonos en la regla de la transformación de inversión que fue establecida en la sección anterior, se definirá la transformación de inversión entre dos espacios

tridimensionales representados por las coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) y (r_1, θ_1, ϕ_1) , respectivamente. La correspondencia entre estos espacios está definida por

$$r_1 = R^2/r, \quad \theta_1 = \theta, \quad \phi_1 = \phi. \quad (2.3)$$

Las relaciones (2.3) indican que los ángulos θ y ϕ permanecen sin cambio, mientras que r es transformado a r_1 por la regla de inversión donde R es redefinido de aquí en adelante como una constante arbitraria. En la Fig. (2.3) se ilustra esta transformación en donde (r, θ, ϕ) es llamado espacio original y (r_1, θ_1, ϕ_1) es denominado el espacio de inversión.

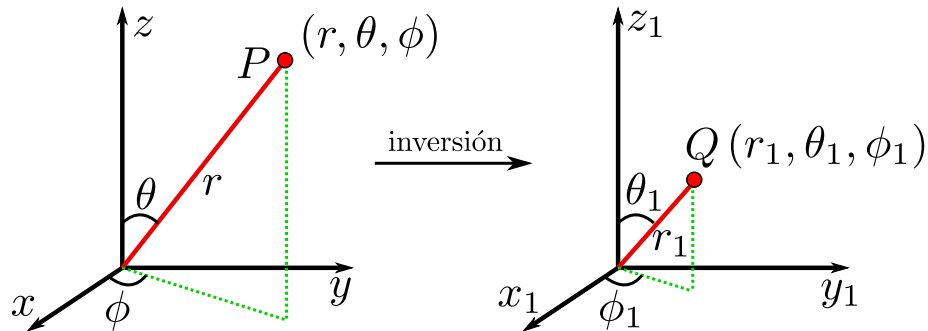


Figura 2.2: Transformación de inversión entre dos espacios tridimensionales: el punto P representa el punto en el espacio original y Q el punto en el espacio de inversión. Las coordenadas de θ y ϕ no sufren cambio por la transformación

2.4. Transformación de inversión del dímero

Consideremos la geometría compuesta de una esfera S_1 de radio R_1 y otra esfera S_2 de radio R_2 . Los centros de las esferas están separados una distancia d con la restricción $d > R_1 + R_2$ (las esferas no se traslapan). Asumiremos que la esfera S_1 se encuentra arriba de la esfera S_2 . Además, sin perder generalidad se considera que $R_1 \leq R_2$. Este sistema geométrico se le denomina dímero y es ilustrado en la

Fig. 2.3. El eje z será la línea que pasa por los centros de las esferas. Nótese que esta geometría posee simetría rotacional con respecto a este eje. Es necesario situar el centro de inversión de tal forma que el mapeo mediante la transformación de inversión de la geometría descrita resulte en dos esferas *concéntricas*. Para lograr esto, primero se sitúa un punto E sobre el eje z de tal forma que las distancias $\overline{P_1E}$ y $\overline{P_2E}$ de las tangentes de los círculos de radio R_1 y R_2 , respectivamente, sean iguales a una distancia R_0 (ver Fig. 2.3). Luego se traza un círculo L de radio R_0 centrado en E . Finalmente, cualquiera de los puntos de intersección del círculo L con el eje z de simetría, esto es σ y κ , serán un centro de inversión apropiado [24]. Elegiremos al punto σ como el centro de inversión, el cual también será el origen de nuestro sistema coordenado (ver Fig. 2.3). Ya definido a σ como el centro de inversión, se pueden determinar las posiciones de los centros de los círculos sobre el eje z de simetría con respecto a dicho punto. El centro de la esfera S_1 está posicionado sobre el eje z en $z_a = R_0 + h_1$ y el centro de la esfera S_2 se encuentra en $z_b = R_0 - h_2$. Aquí, h_1 (h_2) es la distancia de E al centro de las esferas S_1 (S_2) y por ende

$$d = h_1 + h_2. \quad (2.4)$$

La distancia h_j ($j = 1, 2$) se puede obtener a partir de R_1 , R_2 y d como

$$h_j = \frac{d^2 + (-1)^{j-1}(R_1^2 - R_2^2)}{2d}, \quad j = 1, 2. \quad (2.5)$$

La Ec. (2.5) se obtiene de manera directa de la Ec. (2.4) y de la siguiente relación (ver Fig. 2.3)

$$R_0^2 = h_1^2 - R_1^2 = h_2^2 - R_2^2. \quad (2.6)$$

Ahora aplicamos la transformación de inversión [relaciones (2.3)] al sistema geométrico descrito (Fig. 2.3). Como habíamos adelantado la geometría resultante de dicha

transformación en el espacio (r_1, θ_1, ϕ_1) son dos esferas concéntricas como se ilustra en la Fig. 2.4. La esfera S_1 de radio R_1 se transforma en la esfera S'_1 de radio a_1 mientras que la esfera S_2 de radio R_2 se transforma en la esfera S'_2 de radio a_2 . Los radios a_j ($j = 1, 2$) están determinados por los parámetros geométricos originales y el factor R de la transformación de inversión mediante

$$a_j = \frac{R^2}{2R_0} [(h_j + R_j - R_0)/(h_j + R_j + R_0)]^{2(1-j)+1}, \quad j = 1, 2. \quad (2.7)$$

El centro de las esferas S'_1 y S'_2 no coincide con el origen del sistema de inversión, sino que está localizado sobre el eje z_1 en la coordenada axial

$$z_{c1} = R^2/(2R_0). \quad (2.8)$$

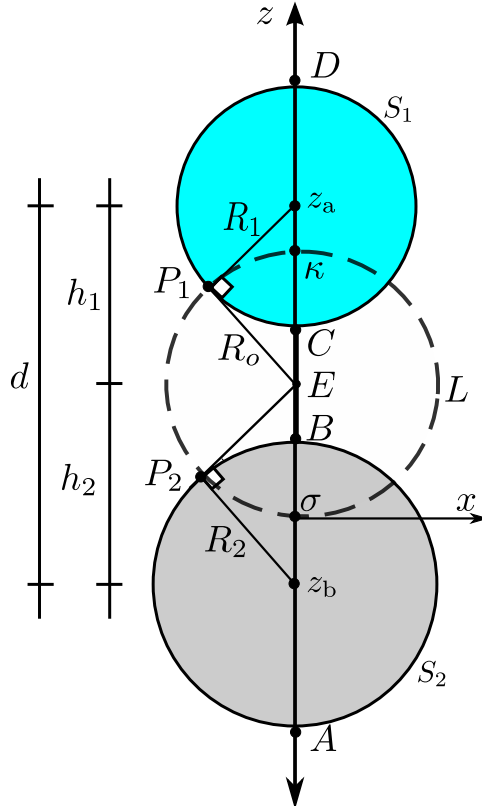


Figura 2.3: Geometría del dímero

La derivación de las Ecs. (2.7) y (2.8) se encuentra en el apéndice A. De la Fig. 2.4 se observa que: la región que está dentro de la esfera S_1 se mapea en el interior de la esfera S'_1 , el interior de la esfera S_2 se mapea en la zona exterior a la esfera S'_2 y el resto del espacio se mapea en la región comprendida entre las esferas S'_1 y S'_2 .

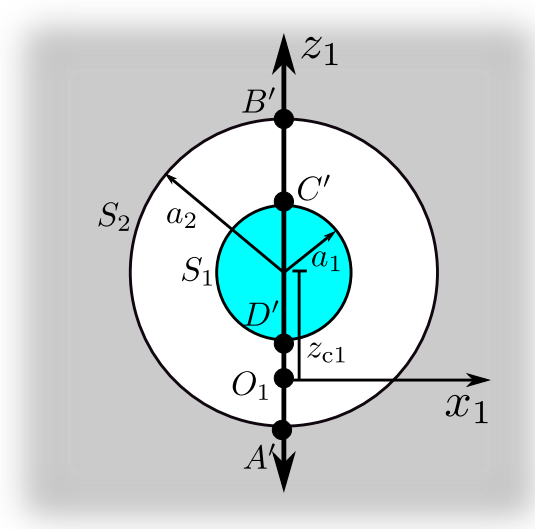


Figura 2.4: Geometría resultante en el espacio de inversión de la transformación de un dímero.

Capítulo 3

Potencial eléctrico en el espacio de inversión

Dado que se estudiarán los campos generados por un dipolo eléctrico que estará localizado en la cercanía de dos nano-esferas (separadas entre sí unos cuantos nanómetros) y que estará oscilando armónicamente con una frecuencia angular ω dentro de los rangos espectrales del visible ($390 \text{ nm} < \lambda_0 < 780 \text{ nm}$) y del ultravioleta cercano ($300 \text{ nm} < \lambda_0 < 390 \text{ nm}$), el dipolo y el dímero se situarán dentro de un volumen $V \ll \lambda_0^3$ [λ_0 es la longitud de onda en el vacío asociada a la frecuencia angular ω]. Por consiguiente, los campos generados por el dipolo en dicho volumen V pueden ser obtenidos mediante la *aproximación cuasi-estática* [efectos de retardo despreciados].

Se considera que los campos y las fuentes oscilan armónicamente con la dependencia $\exp[-i\omega t]$ y de aquí en adelante se omitirá este fasor temporal. Se tomará en cuenta únicamente un entorno lineal y no magnético [constante magnética $\bar{\mu} = 1$] cuya constante dieléctrica es $\epsilon(\mathbf{r}, \omega)$ [espacialmente inhomogéneo]. Más particularmente, se asume que dicho entorno está compuesto por varios dominios espaciales homogéneos.

En el límite cuasi-estático, el campo eléctrico $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ generado por el dipolo eléctrico

es determinado a partir del potencial eléctrico $\Phi(\mathbf{r})$ como

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla\Phi(\mathbf{r}), \quad (3.1)$$

donde $\Phi(\mathbf{r})$ satisface la ecuación de Poisson

$$\nabla^2\Phi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m}\rho_D(\mathbf{r}). \quad (3.2)$$

Aquí, ϵ_0 es la permitividad eléctrica del vacío, ϵ_m es la constante dieléctrica donde se encuentra embebido el dipolo y $\rho_D(\mathbf{r})$ es la densidad de carga del dipolo puntual la cual está dada por

$$\rho_D(\mathbf{r}) = -\boldsymbol{\mu} \cdot \nabla\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0), \quad (3.3)$$

donde $\delta(\dots)$ es la función delta de Dirac y \mathbf{r}_0 es la posición donde se localiza el dipolo cuyo momento es $\boldsymbol{\mu}$.

Como se ha mencionado, nuestro objetivo es encontrar el campo eléctrico que genera un dipolo en la cercanía de un dímero. Para esto es necesario encontrar la solución de la Ec. (3.2), es decir, obtener $\Phi(\mathbf{r})$. En el capítulo 1 se mostró como la geometría del dímero se puede transformar a un sistema compuesto por dos esferas concéntricas. En principio un sistema de dos esferas concéntricas nos ofrecería una simplificación para hallar la solución analítica de nuestro problema. La cuestión es cómo podríamos obtener $\Phi(\mathbf{r})$ si trabajaríamos en el espacio inverso. Resulta que tendríamos que resolver la siguiente ecuación en el espacio de inversión

$$\nabla_1^2\Psi(\mathbf{r}_1) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m}\tilde{\rho}_D(\mathbf{r}_1). \quad (3.4)$$

Aquí, $\Psi(\mathbf{r}_1)$ está relacionado con $\Phi(\mathbf{r})$ a través de

$$\Phi(r, \theta, \phi) \equiv \frac{1}{r}\Psi[r_1(r), \theta_1(\theta), \phi_1(\phi)], \quad (3.5)$$

donde (r, θ, ϕ) y (r_1, θ_1, ϕ_1) , como se había establecido en la sección 1.2 son las coordenadas esféricas en el espacio original y el de inversión, respectivamente; hacemos alusión nuevamente que la correspondencia entre estos dos espacios está dada por las relaciones (1.3). La distribución $\tilde{\rho}_D(\mathbf{r}_1)$ puede ser interpretada como una densidad de carga *efectiva*, ya que en el sentido estricto las unidades de $\tilde{\rho}_D(\mathbf{r}_1)$ son Q/l^3 [Q (carga), l (longitud)]. Específicamente, se obtiene que

$$\tilde{\rho}_D(\mathbf{r}_1) = \tilde{q}\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{01}) - \tilde{\boldsymbol{\mu}} \cdot \nabla_1 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{01}), \quad (3.6)$$

es decir, $\tilde{\rho}_D(\mathbf{r}_1)$ está constituido por una distribución debida a una carga puntual efectiva y a un dipolo puntual efectivo, localizados ambos en \mathbf{r}_{01} (el mapeo del punto \mathbf{r}_0 donde se ubica el dipolo puntual en el espacio original). Explícitamente, la carga efectiva \tilde{q} y el momento dipolar efectivo $\tilde{\boldsymbol{\mu}}$ están dados por

$$\tilde{q} = \frac{r_{01}^2}{R^2} \mu_r, \quad (3.7)$$

$$\tilde{\boldsymbol{\mu}} = \frac{r_{01}^3}{R^2} (\mu_r \mathbf{n}_{r1} + \mu_\theta \mathbf{n}_{\theta1} + \mu_\phi \mathbf{n}_{\phi1}). \quad (3.8)$$

Aquí, $r_{01} = |\mathbf{r}_{01}|$; \mathbf{n}_{r1} , $\mathbf{n}_{\theta1}$ y $\mathbf{n}_{\phi1}$ son los vectores unitarios esféricos radial, polar y azimutal, respectivamente, en el espacio de inversión; $\mu_r, \mu_\theta, \mu_\phi$ están relacionados con las componentes esféricas del dipolo $\boldsymbol{\mu}$ como

$$\boldsymbol{\mu} = -\mu_r \mathbf{n}_r + \mu_\theta \mathbf{n}_\theta + \mu_\phi \mathbf{n}_\phi, \quad (3.9)$$

donde, similarmente, \mathbf{n}_r , \mathbf{n}_θ y \mathbf{n}_ϕ son los vectores unitarios esféricos radial polar y azimutal, respectivamente, pero en el espacio original. Nótese que, de acuerdo a las Ecs. (3.7) y (3.9): la carga efectiva \tilde{q} y el momento dipolar efectivo $\tilde{\boldsymbol{\mu}}$ dependen de la distancia radial r_{01} , la dirección de la componente radial de $\tilde{\boldsymbol{\mu}}$ es opuesta a la de la componente radial de $\boldsymbol{\mu}$ y la carga efectiva \tilde{q} en el espacio de inversión es proporcional únicamente a la componente radial del dipolo $\boldsymbol{\mu}$.

Para encontrar el potencial eléctrico $\Phi(\mathbf{r})$ que genera un dipolo puntual mediante la transformación de inversión, se hallaría $\Psi(\mathbf{r}_1)$ resolviendo la ecuación de Poisson (3.4) cuya excitación es causada por una carga efectiva puntual y un dipolo efectivo puntual. Una vez encontrada $\Psi(\mathbf{r}_1)$, el potencial eléctrico $\Phi(\mathbf{r})$ se obtiene a través de la Ec. (3.5). Finalmente adelantamos que las condiciones de frontera que $\Psi(\mathbf{r}_1)$ deben satisfacer en una interfaz en el espacio de inversión son distintas a las que satisface $\Phi(\mathbf{r})$ en el espacio original.

El resto de este capítulo trata sobre la derivación de la Ec. (3.4) y la expresión explícita de $\tilde{\rho}_D(\mathbf{r}_1)$ [Ec. (3.6)]. Sabemos que un dipolo puntual puede ser concebido a partir de considerar dos cargas puntuales con signos opuestos y separadas una distancia entre sí; en la sección 2.1 se detallará esta concepción así como la obtención de la densidad de carga asociada a un dipolo puntual [Ec. (3.3)]. Se usará este sistema de cargas puntuales para encontrar la respuesta eléctrica de un dipolo puntual en el espacio de inversión [Ecs. (3.4) y (3.6)]. Por consiguiente, como punto de partida, será necesario hallar la respuesta eléctrica de una carga puntual en el espacio de inversión la cual se presentará en la sección 2.2. Ya conocida esta última respuesta se podrá proceder con la derivación de las expresiones que buscamos obtener (secciones 2.3 y 2.4).

3.1. Dipolo puntual y su densidad de carga.

Un dipolo puntual, como su nombre lo indica, está localizado en un punto \mathbf{r}_0 . Como habíamos dicho, este dipolo puede ser formado colocando dos cargas puntuales que tienen cargas contrarias y se ubican en distintos puntos; una de las cargas puntuales posee una carga q y está situada en $\mathbf{r}_e^+ = \mathbf{r}_0 + \Delta\mathbf{s}$, mientras que la otra tiene carga $-q$ y posición $\mathbf{r}_e^- = \mathbf{r}_0$ [$\Delta\mathbf{s} \equiv \mathbf{r}_e^+ - \mathbf{r}_e^- = \Delta s \mathbf{n}_s$, $\Delta s = |\Delta\mathbf{s}|$ y \mathbf{n}_s es

un vector unitario en la dirección de $\Delta\mathbf{s}$]. El momento dipolar de este sistema de cargas es $\boldsymbol{\mu} = \mu\mathbf{n}_s = q\Delta s\mathbf{n}_s$ (independiente de la elección del origen). Si queremos que esta distribución de cargas puntuales se encuentre cada vez más localizada en la cercanía de \mathbf{r}_0 , pero que a su vez el momento dipolar $\boldsymbol{\mu}$ no cambie, tendríamos que hacer $\Delta s \rightarrow 0$ de tal manera que $q\Delta s$ permanezca constante (igual a μ). Entonces al realizar este límite, acompañado de la restricción mencionada, tendríamos un dipolo localizado en \mathbf{r}_0 , esto es, un dipolo puntual.

Como hemos visto el potencial eléctrico $\Phi(\mathbf{r})$ que produciría el dipolo puntual tendría que satisfacer la ecuación de Poisson dada por la Ec. (3.2). A continuación mostraremos como se obtiene la densidad de carga $\rho_D(\mathbf{r})$ [Ec. (3.3)] de un dipolo puntual a partir del sistema con dos cargas puntuales.

Consideremos un dipolo orientado en la dirección x . Un dipolo con esta orientación se logra colocando particularmente las cargas puntuales en $\mathbf{r}_e^+ = (x_0 + \Delta x)\mathbf{n}_x + y_0\mathbf{n}_y + z_0\mathbf{n}_z$ y $\mathbf{r}_e^- = x_0\mathbf{n}_x + y_0\mathbf{n}_y + z_0\mathbf{n}_z$ y por ende su momento dipolar es $\boldsymbol{\mu} = \mu_x\mathbf{n}_x = q\Delta x\mathbf{n}_x$. Aquí, \mathbf{n}_x , \mathbf{n}_y , \mathbf{n}_z son los vectores unitarios cartesianos en las direcciones x, y, z , respectivamente.

La densidad de carga de esta distribución de cargas está dada por la superposición de las densidades de carga correspondientes a cada carga puntual, esto es,

$$\begin{aligned}\rho_x(\mathbf{r}) &= q\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e^+) - q\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e^-), \\ &= q\{\delta[x - (x_0 + \Delta x)]\delta(y - y_0)\delta(z - z_0) \\ &\quad - \delta(x - x_0)\delta(y - y_0)\delta(z - z_0)\}.\end{aligned}\tag{3.10}$$

En la Ec. (3.10) se ha expresado las funciones delta de Dirac en coordenadas cartesianas. Ahora haciendo la expansión del primer término del lado derecho de la

Ec. (3.10) en una serie de Taylor alrededor de x_0 , se obtiene

$$\rho_{\bar{x}}(\mathbf{r}) = q \left[\frac{\partial}{\partial x_0} \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0) \Delta x + \mathcal{O}^{(2)}(\Delta x) \right], \quad (3.11)$$

donde los términos de segundo orden y superior están contenidos en $\mathcal{O}^{(2)}(\Delta x)$. Como una nota aparte, en virtud de que más adelante realizaremos varias expansiones en series de Taylor, de aquí en adelante $\mathcal{O}^{(2)}(\dots)$ denotará todas las contribuciones a partir del segundo orden de la serie de potencias en cuestión. Aplicando a $\rho_{\bar{x}}(\mathbf{r})$ el límite $\Delta x \rightarrow 0$ y la restricción $q\Delta x = \mu_x$, los términos $\mathcal{O}^{(2)}(\Delta x)$ tienden a cero, por lo que

$$\begin{aligned} \rho_x(\mathbf{r}) &\equiv \lim_{\substack{\Delta x \rightarrow 0 \\ q\Delta x = \mu_x}} \rho_{\bar{x}}(\mathbf{r}) = \mu_x \frac{\partial}{\partial x_0} \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0) \\ &= \mu_x \frac{\partial}{\partial x_0} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Nótese que la distribución de carga está localizada en \mathbf{r}_0 .

Repetiendo el mismo análisis para las demás orientaciones del dipolo, tenemos que la densidad de carga para un dipolo puntual es

$$\rho_D(\mathbf{r}) = \rho_x(\mathbf{r}) + \rho_y(\mathbf{r}) + \rho_z(\mathbf{r}) = \boldsymbol{\mu} \cdot \nabla_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = -\boldsymbol{\mu} \cdot \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0). \quad (3.13)$$

El gradiente ∇_0 (∇) opera en las coordenadas \mathbf{r}_0 (\mathbf{r}). En la Ec. (3.13) hemos utilizado la propiedad $\nabla_0 f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = -\nabla f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$, donde f es una función arbitraria. La Ec. (3.13) es lo que ya establecimos en la Ec. (3.3), derivando así la expresión explícita de la densidad de carga asociada a un dipolo puntual.

3.2. Potencial generado por una carga puntual en el espacio de inversión

Se derivará la ecuación en el espacio de inversión que permitirá encontrar el potencial eléctrico $\Phi_e(\mathbf{r})$ que genera una carga puntual q situada en el punto \mathbf{r}_e y

embebida en un medio con constante dieléctrica ϵ_m .

En el espacio original, el potencial eléctrico $\Phi_e(\mathbf{r})$ que genera una carga puntual satisface la ecuación de Poisson

$$\nabla^2 \Phi_e(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \rho_Q(\mathbf{r}), \quad (3.14)$$

donde $\rho_Q(\mathbf{r})$ es la densidad de la carga puntual que está dada por

$$\rho_Q(\mathbf{r}) = q\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_e). \quad (3.15)$$

Ahora se transformará la Ec. (3.14) al espacio de inversión. Expresamos el potencial $\Phi_e(\mathbf{r})$ en coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) y definimos

$$g(r, \theta, \phi) \equiv \nabla^2 \Phi_e(r, \theta, \phi), \quad (3.16)$$

esto es, $g(r, \theta, \phi)$ es el laplaciano de $\Phi_e(r, \theta, \phi)$. Explícitamente,

$$\begin{aligned} g(r, \theta, \phi) &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial}{\partial r} \Phi_e(r, \theta, \phi) \right] + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \Phi_e(r, \theta, \phi) \right] \\ &\quad + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \Phi_e(r, \theta, \phi). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Aplicando la transformación (2.3) a la Ec. (3.17), se obtiene

$$\begin{aligned} g(r_1, \theta_1, \phi_1) &= \frac{r_1^5}{R^6} \left\{ \frac{1}{r_1^2} \frac{\partial}{\partial r_1} \left[r_1^2 \frac{\partial}{\partial r_1} \left[\frac{R^2}{r_1} \Phi_e(r_1, \theta_1, \phi_1) \right] \right] \right. \\ &\quad + \frac{1}{r_1^2 \sin \theta_1} \frac{\partial}{\partial \theta_1} \left[\sin \theta_1 \frac{\partial}{\partial \theta_1} \left[\frac{R^2}{r_1} \Phi_e(r_1, \theta_1, \phi_1) \right] \right] \\ &\quad \left. + \frac{1}{r_1^2 \sin^2 \theta_1} \frac{\partial^2}{\partial \phi_1^2} \left[\frac{R^2}{r_1} \Phi_e(r_1, \theta_1, \phi_1) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Aquí, definimos

$$\Psi_e(r_1, \theta_1, \phi_1) \equiv \frac{R^2}{r_1} \Phi_e(r_1, \theta_1, \phi_1). \quad (3.19)$$

Introduciendo $\Psi_e(r_1, \theta_1, \phi_1)$ en la Ec. (3.18), tenemos que $g(r_1, \theta_1, \phi_1)$ está dado por

$$g(r_1, \theta_1, \phi_1) = \frac{r_1^5}{R^6} \nabla_1^2 \Psi_e(r_1, \theta_1, \phi_1). \quad (3.20)$$

Ahora veremos como se transforma la densidad de carga $\rho_Q(\mathbf{r})$ al espacio de inversión.

Expresando la Ec. (3.15) en coordenadas esféricas resulta

$$\rho_Q(\mathbf{r}) = q \left[\frac{1}{r_e^2} \delta(r - r_e) \delta(\cos \theta - \cos \theta_e) \delta(\phi - \phi_e) \right], \quad (3.21)$$

donde (r_e, θ_e, ϕ_e) son las coordenadas esféricas de \mathbf{r}_e . Aplicando la transformación de inversión (2.3) a la Ec. (3.21) se llega a

$$\rho_Q(r_1, \theta_1, \phi_1) = q \left[\frac{r_{e1}^2}{R^4} \delta \left(\frac{R^2}{r_1} - \frac{R^2}{r_{e1}} \right) \delta(\cos \theta_1 - \cos \theta_{e1}) \delta(\phi_1 - \phi_{e1}) \right]. \quad (3.22)$$

Aquí, $(r_{e1}, \theta_{e1}, \phi_{e1})$ son las coordenadas esféricas en el espacio de inversión del punto \mathbf{r}_{e1} que le corresponde a \mathbf{r}_e . La Ec. (3.22) puede ser reescrita usando la propiedad

$$\delta[u(x)] = \sum_{k=1}^N \frac{\delta(x - x_k)}{\left| \frac{d}{dx} u(x_k) \right|}, \quad (3.23)$$

donde $u(x_k) = 0$ [$k = 1 \dots N$ y N es el número de raíces que posee la función $u(x)$].

Por lo tanto la Ec. (3.22) se convierte en

$$\begin{aligned} \rho_Q(r_1, \theta_1, \phi_1) &= q \frac{r_{e1}^6}{R^6} \left[\frac{1}{r_{e1}^2} \delta(r_1 - r_{e1}) \delta(\cos \theta_1 - \cos \theta_{e1}) \delta(\phi_1 - \phi_{e1}) \right], \\ &= q \frac{r_{e1}^6}{R^6} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{e1}). \end{aligned} \quad (3.24)$$

Igualando la Ec. (3.20) con la Ec. (3.24), se obtiene

$$\nabla_1^2 \Psi_e(\mathbf{r}_1) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \tilde{\rho}_Q(\mathbf{r}_1), \quad (3.25)$$

donde

$$\tilde{\rho}_Q(\mathbf{r}_1) = \tilde{q} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{e1}), \quad (3.26)$$

$$\tilde{q} = qr_{e1}. \quad (3.27)$$

Nótese que en el espacio inverso $\Psi_e(\mathbf{r}_1)$ satisface la ecuación de Poisson [Ec. (3.25)]

donde $\tilde{\rho}_Q(\mathbf{r}_1)$ representa una densidad de carga debida también a una fuente puntual

localizada en \mathbf{r}_{e1} , pero con una carga efectiva \tilde{q} cuyo valor depende de q y de la distancia del punto \mathbf{r}_{e1} al origen [ver Ec. (3.27)]. Una vez que se encuentra $\Psi_e(\mathbf{r}_1)$ [la solución a la Ec. (3.25)], el potencial $\Phi_e(\mathbf{r})$ en el espacio original se obtiene mediante la Ec. (3.19) aplicándole la transformación de vuelta al espacio original, esto es,

$$\Phi_e(r, \theta, \phi) = \frac{1}{r} \Psi_e[r_1(r), \theta_1(\theta), \phi_1(\phi)]. \quad (3.28)$$

Mencionamos que las Ecs. (3.26-3.28) ya fueron obtenidas en la Ref. [24].

3.3. Densidad de carga efectiva en el espacio de inversión de un dipolo puntual

Regresamos al escenario descrito en la sección 2.1 donde se tienen dos cargas puntuales. Para este caso, de manera directa con la utilización de las Ecs. (3.25-3.27), el potencial $\Psi(\mathbf{r}_1)$ en el espacio de inversión que genera nuestro sistema de cargas puntuales satisface

$$\nabla_1^2 \Psi(\mathbf{r}_1) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \tilde{\rho}_d(\mathbf{r}_1), \quad (3.29)$$

donde

$$\tilde{\rho}_d(\mathbf{r}_1) = qr_{e1}^+ \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{e1}^+) - qr_{e1}^- \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{e1}^-), \quad (3.30)$$

siendo \mathbf{r}_{e1}^+ (\mathbf{r}_{e1}^-) el mapeo correspondiente del punto \mathbf{r}_e^+ (\mathbf{r}_e^-) mediante la transformación de inversión.

Lo que buscamos obtener es la distribución de carga $\tilde{\rho}_D(\mathbf{r}_1)$ para un dipolo puntual, esto es,

$$\tilde{\rho}_D(\mathbf{r}_1) = \lim_{\substack{\Delta s \rightarrow 0 \\ q\Delta s = \mu}} \tilde{\rho}_d(\mathbf{r}_1). \quad (3.31)$$

Para ello expresaremos el momento dipolar $\boldsymbol{\mu}$ del sistema (en el espacio original) en su descomposición vectorial esférica, tal como en la Ec. (3.9), es decir, $\boldsymbol{\mu} =$

$-\mu_r \mathbf{n}_r + \mu_\theta \mathbf{n}_\theta + \mu_\phi \mathbf{n}_\phi$, recalcando que nuestra convención de la componente radial de $\boldsymbol{\mu}$ tiene un signo menos. A continuación encontraremos la distribución de la carga efectiva de un dipolo puntual en el espacio de inversión debido a cada una de las componentes esféricas de $\boldsymbol{\mu}$.

3.3.1. Dipolo radial

Para el caso del dipolo en dirección radial, usando coordenadas esféricas, las cargas $-q$ y q se localizan en $\mathbf{r}_r^- = (r_0 + \Delta r, \theta_0, \phi_0)$ y $\mathbf{r}_r^+ = (r_0, \theta_0, \phi_0)$, respectivamente. Nótese que si $\Delta r > 0$, entonces la carga q ($-q$) se encuentra más cerca (alejada) del origen [ver Fig 3.1(a)], dando una componente radial del dipolo $-q\Delta r = -\mu_r$, clarificando la convención de la componente radial antes mencionada.

Haciendo uso de la Ec. (3.26), la densidad de carga en el espacio de inversión para el sistema conformado por estas cargas puntuales está dada por

$$\tilde{\rho}_{\bar{r}}(\mathbf{r}_1) = \tilde{q}^- \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{r1}^-) + \tilde{q}^+ \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{r1}^+), \quad (3.32)$$

donde $\mathbf{r}_{r1}^- = (r_{01}^-, \theta_{01}, \phi_{01})$, $\mathbf{r}_{r1}^+ = (r_{01}^+, \theta_{01}, \phi_{01})$ [$r_{01}^- = R^2/(r_0 + \Delta r)$, $r_{01}^+ = R^2/r_0$, $\theta_{01} = \theta_0$, $\phi_{01} = \phi_0$], $\tilde{q}^- = -qr_{01}^-$ y $\tilde{q}^+ = qr_{01}^+$. El sistema resultante está dibujado en la Fig 3.1(b).

Expresando las funciones delta de Dirac de la Ec. (3.32) en coordenadas esféricas se obtiene

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{\bar{r}}(\mathbf{r}_1) = & -q\alpha(r_0 + \Delta r) \frac{\delta[r_1 - \alpha(r_0 + \Delta r)]\delta(\cos \theta_1 - \cos \theta_{01})\delta(\phi_1 - \phi_{01})}{[\alpha(r_0 + \Delta r)]^2} \\ & + q\alpha(r_0) \frac{\delta[r_1 - \alpha(r_0)]\delta(\cos \theta_1 - \cos \theta_{01})\delta(\phi_1 - \phi_{01})}{[\alpha(r_0)]^2}, \end{aligned} \quad (3.33)$$

donde, para más claridad hemos definido $\alpha(u) \equiv R^2/u$. Expandiendo en una serie de Taylor el primer término del lado derecho de la Ec. (3.33) alrededor de r_0 , $\tilde{\rho}_r(\mathbf{r}_1)$ se

reduce a

$$\tilde{\rho}_{\bar{r}}(\mathbf{r}_1) = -q \left\{ \frac{\partial}{\partial r_0} \left[\alpha(r_0) \frac{\delta[r_1 - \alpha(r_0)] \delta(\cos \theta_1 - \cos \theta_{01}) \delta(\phi_1 - \phi_{01})}{[\alpha(r_0)]^2} \right] \Delta r + \mathcal{O}^{(2)}(\Delta r) \right\}. \quad (3.34)$$

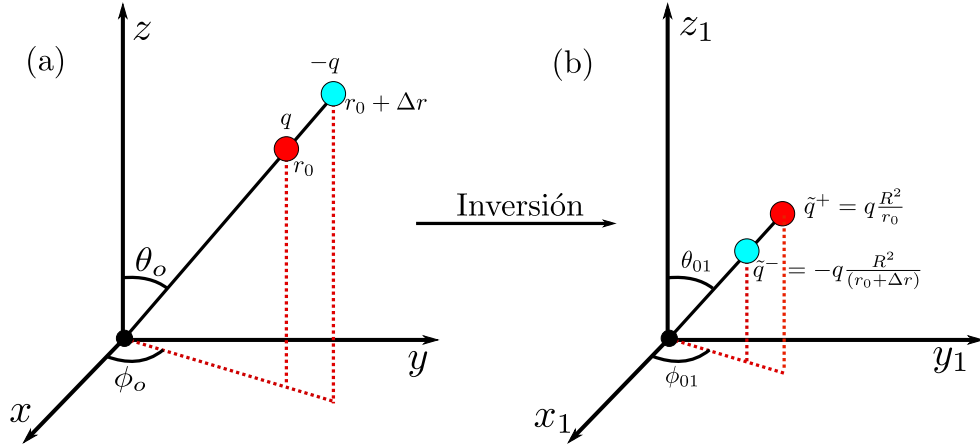


Figura 3.1: Construcción del dipolo radial. (a) Espacio original. (b) Mapeo del dipolo en el espacio de inversión.

Ahora para lograr el dipolo puntual en la dirección radial se aplica a $\tilde{\rho}_{\bar{r}}(\mathbf{r}_1)$ el límite cuando $\Delta r \rightarrow 0$ manteniendo el producto $q\Delta r$ igual a la constante μ_r , esto es,

$$\tilde{\rho}_r(\mathbf{r}_1) = \lim_{\substack{\Delta r \rightarrow 0 \\ q\Delta r = \mu_r}} \tilde{\rho}_{\bar{r}}(\mathbf{r}_1). \quad (3.35)$$

Al tomar este límite resulta que $\mathcal{O}^{(2)}(\Delta r) \rightarrow 0$, sobreviviendo únicamente el término de primer orden. Por lo tanto, realizando la derivada parcial indicada en la Ec. (3.34)

y haciendo la sustitución $\alpha(r_0) \equiv R^2/r_0 = r_{01}$, se obtiene

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}_r(\mathbf{r}_1) &= \mu_r \frac{r_{01}^2}{R^2} \left[\frac{1}{r_{01}^2} \delta(r_1 - r_{01}) \delta(\cos \theta_1 - \cos \theta_{01}) \delta(\phi_1 - \phi_{01}) \right] \\ &\quad + \mu_r \frac{r_{01}^3}{R^2} \frac{\partial}{\partial r_{01}} \left[\frac{1}{r_{01}^2} \delta(r_1 - r_{01}) \delta(\cos \theta_1 - \cos \theta_{01}) \delta(\phi_1 - \phi_{01}) \right], \\ &= \mu_r \frac{r_{01}^2}{R^2} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{01}) + \mu_r \frac{r_{01}^3}{R^2} \frac{\partial}{\partial r_{01}} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{01}).\end{aligned}\quad (3.36)$$

Nótese, tal como habíamos anticipado [Ecs. (3.6) y (3.7)], el primer término de la Ec. (3.36) corresponde a una fuente puntual con carga efectiva $\tilde{q} = \mu_r r_{01}^2 / R^2$, localizada en $\mathbf{r}_{01} = (r_{01}, \theta_{01}, \phi_{01})$ que es el mapeo del punto $\mathbf{r}_0 = (r_0, \theta_0, \phi_0)$ donde se localizará el dipolo puntual en el espacio original. Como habíamos visto en la Ec. (3.27), la carga efectiva en el espacio de inversión depende de la distancia del origen al punto donde se ubica la carga. Para este caso las cargas q y $-q$ están a una distancia radial diferente, consecuentemente la suma de las cargas efectivas en el espacio de inversión no se anula; este es el motivo por el cual aparece dicha carga puntual efectiva. Además, la carga efectiva es positiva (negativa) si la componente radial de $\boldsymbol{\mu}$ es negativa (positiva) [ver Ec. (3.36)]. Por otro lado, como se verá más adelante, el segundo término del lado derecho de la Ec. (3.36) está relacionado con la distribución de carga de un dipolo puntual efectivo en la dirección radial. También se puede notar de la Ec. (3.36) y de la Fig. 3.1 que si el dipolo radial en el espacio original apunta hacia el origen, entonces en el espacio de inversión el dipolo radial estará orientado en la dirección opuesta.

3.3.2. Dipolo polar

Para obtener la distribución de carga efectiva en el espacio de inversión de un dipolo orientado en dirección polar consideramos una carga $-q$ [q] situada en \mathbf{r}_θ^- [\mathbf{r}_θ^+] cuyas coordenadas esféricas son (r_0, θ_0, ϕ_0) [$(r_0, \theta_0 + \Delta\theta, \phi_0)$], tal como se ilustra en

la Fig. 3.2(a).

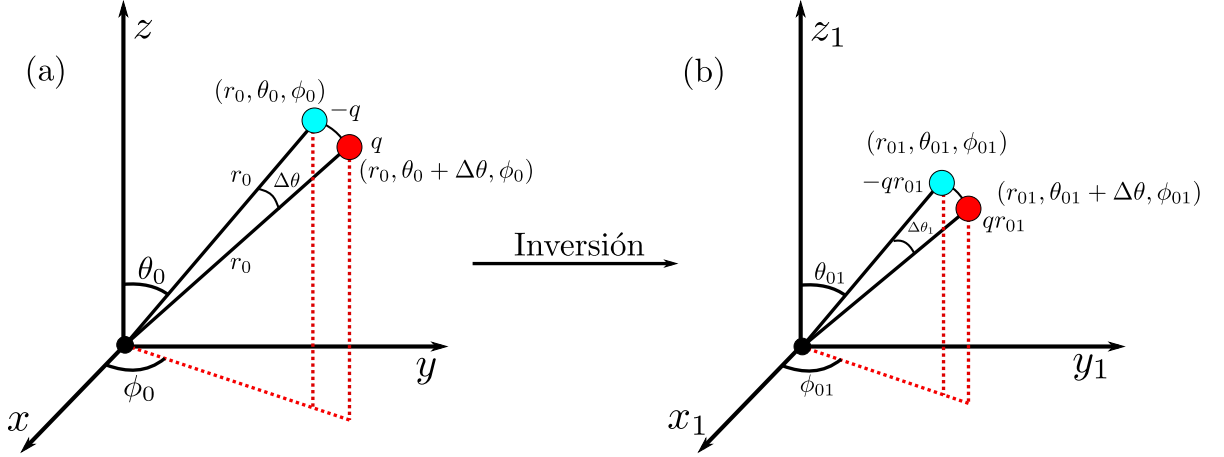


Figura 3.2: Construcción del dipolo polar. (a) Espacio original. (b) Mapeo del dipolo en el espacio de inversión.

Nuevamente usando la Ec. (3.26), la densidad de carga polar en el espacio de inversión es

$$\tilde{\rho}_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}_1) = qr_{01}[\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{\theta_1}^+) - \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{\theta_1}^-)], \quad (3.37)$$

donde $\mathbf{r}_{\theta_1}^- = (r_{01}, \theta_{01}, \phi_{01})$, $\mathbf{r}_{\theta_1}^+ = (r_{01}, \theta_{01} + \Delta\theta_1, \phi_{01})$ [$r_{01} = R^2/r_0$, $\theta_{01} = \theta_0$, $\phi_{01} = \phi_0$, $\Delta\theta_1 = \Delta\theta$]. Esta distribución se muestra en la Fig. 3.2(b). Similarmente al caso radial, expresamos las funciones delta de Dirac de la Ec. (3.37) en coordenadas esféricas, dando como resultado

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}_1) = & qr_{01} \left\{ \frac{1}{r_{01}^2} \delta(r_1 - r_{01}) \delta\{\cos \theta_1 - \cos[\beta(\theta_0 + \Delta\theta)]\} \delta(\phi_1 - \phi_{01}) \right. \\ & \left. - \frac{1}{r_{01}^2} \delta(r_1 - r_{01}) \delta\{\cos \theta_1 - \cos[\beta(\theta_0)]\} \delta(\phi_1 - \phi_{01}) \right\}, \quad (3.38) \end{aligned}$$

donde, como en el caso anterior, con la intención de dar más transparencia, se define $\beta(u) \equiv u$. Otra vez realizamos la expansión en una serie de Taylor del primer término

de lado derecho de la Ec. (3.38), pero ahora alrededor de θ_0 y $\tilde{\rho}_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}_1)$ se simplifica a

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{\theta}(\mathbf{r}_1) = & qr_{01} \left\{ \frac{\partial}{\partial \theta_0} \left[\frac{1}{r_{01}^2} \delta(r_1 - r_{01}) \delta[\cos \theta_1 - \cos \beta(\theta_0)] \delta(\phi_1 - \phi_{01}) \right] \Delta\theta \right. \\ & \left. + \mathcal{O}^{(2)}(\Delta\theta) \right\}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Ahora si queremos obtener la distribución del dipolo puntual en la dirección polar, se aplica a $\tilde{\rho}_{\theta}(\mathbf{r}_1)$ el límite $\Delta\theta \rightarrow 0$, pero conservando $qr_0\Delta\theta = \mu_{\theta}$, es decir,

$$\tilde{\rho}_{\theta}(\mathbf{r}_1) = \lim_{\substack{\Delta\theta \rightarrow 0 \\ qr_0\Delta\theta = \mu_{\theta}}} \tilde{\rho}_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}_1). \quad (3.40)$$

El límite de la Ec. (3.40) da como resultado

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{\theta}(\mathbf{r}_1) = & \mu_{\theta} \frac{r_{01}^3}{R^2} \left\{ \frac{1}{r_{01}} \frac{\partial}{\partial \theta_{01}} \left[\frac{\delta(r_1 - r_{01}) \delta(\cos \theta_1 - \cos \theta_{01}) \delta(\phi_1 - \phi_{01})}{r_{01}^2} \right] \right\}, \\ = & \mu_{\theta} \frac{r_{01}^3}{R^2} \left\{ \frac{1}{r_{01}} \frac{\partial}{\partial \theta_{01}} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{01}) \right\}. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Para llegar a la Ec. (3.41), se toma en cuenta que, cuando $\Delta\theta \rightarrow 0$, también las contribuciones $\mathcal{O}^{(2)}(\Delta\theta)$ se hacen cero y $\beta(\theta_0) \equiv \theta_0 = \theta_{01}$. A diferencia del caso radial, la carga neta efectiva en el espacio de inversión es nula debido a que las distancias de las posiciones de las cargas q y $-q$ al origen son iguales (misma coordenada radial) y la orientación del dipolo polar no cambia al ir al espacio de inversión.

3.3.3. Dipolo azimutal

El dipolo orientado en la dirección azimutal se obtiene considerando una carga $-q$ situada en $\mathbf{r}_{\phi}^{-} = (r_0, \theta_0, \phi_0)$ y una carga positiva q localizada en $\mathbf{r}_{\phi}^{+} = (r_0, \theta_0, \phi_0 + \Delta\phi)$ tal como se representa en la Fig. 3.3(a).

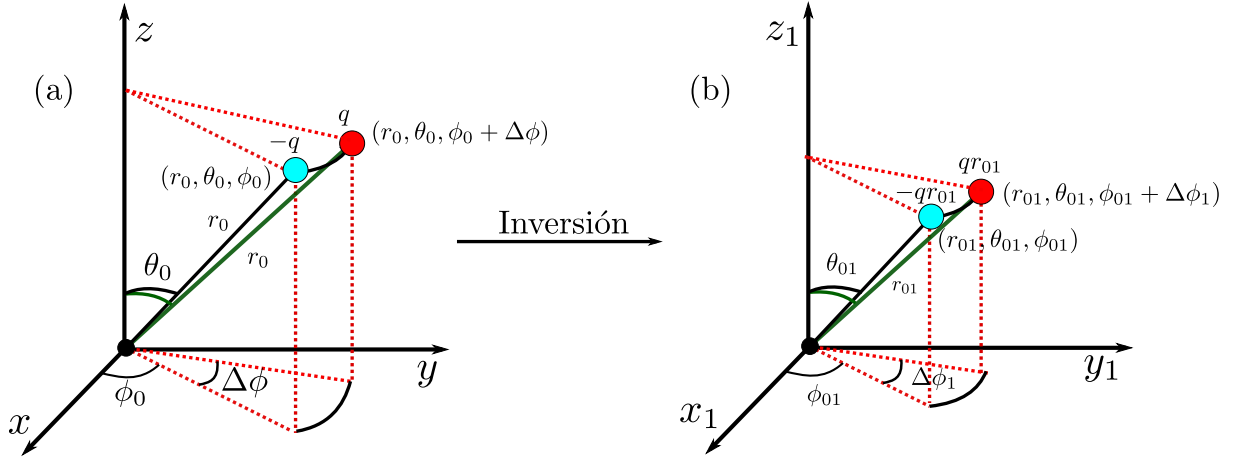


Figura 3.3: Construcción del dipolo azimutal. (a) Espacio original. (b) Mapeo del dipolo en el espacio de inversión.

Al igual que la coordenada polar θ , la coordenada azimutal ϕ no cambia con la transformación de inversión. Como consecuencia, la derivación para obtener la densidad de carga de un dipolo puntual azimutal es análoga a la del dipolo polar, así que describiremos concisamente este proceso.

Como se observa en la Fig. 3.3(b), la densidad de carga efectiva en el espacio de inversión que resulta para este par de cargas puntuales es

$$\tilde{\rho}_{\bar{\phi}}(\mathbf{r}_1) = qr_{01}[\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{\phi_1}^+) - \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{\phi_1}^-)], \quad (3.42)$$

donde $\mathbf{r}_{\phi_1}^+ = (r_{01}, \theta_{01}, \phi_{01} + \Delta\phi_1)$, $\mathbf{r}_{\phi_1}^- = (r_{01}, \theta_{01}, \phi_{01})$ [$r_{01} = R^2/r_0$, $\theta_{01} = \theta_0$, $\phi_{01} = \phi_0$, $\Delta\phi_1 = \Delta\phi$]. Después de representar la Ec. (3.42) en coordenadas esféricas y de realizar la expansión en una serie de potencias de $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{\phi_1}^+)$ alrededor de ϕ_0 , obtenemos que

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{\bar{\phi}}(\mathbf{r}_1) = & qr_{01} \left\{ \frac{\partial}{\partial \phi_0} \left[\frac{1}{r_{01}^2} \delta(r_1 - r_{01}) \delta(\cos \theta_1 - \cos \theta_{01}) \delta[\phi_1 - \beta(\phi_0)] \right] \Delta\phi \right. \\ & \left. + \mathcal{O}^{(2)}(\Delta\phi) \right\}. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Aquí, $\beta(u)$ está definido como en la sección 2.3.2. Al aplicar a $\tilde{\rho}_{\vec{\phi}}(\mathbf{r}_1)$ el límite $\Delta\phi \rightarrow 0$, pero siendo $qr_0 \sin \theta_0 \Delta\phi = \mu_\phi$ [los términos $\mathcal{O}^{(2)}(\Delta\phi)$ se anulan] se llega a la densidad de carga efectiva $\tilde{\rho}_\phi(\mathbf{r}_1)$ del dipolo puntual, siendo ésta explícitamente

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}_\phi(\mathbf{r}_1) &= \mu_\phi \frac{r_{01}^3}{R^2} \left\{ \frac{1}{r_{01} \sin \theta_{01}} \frac{\partial}{\partial \phi_{01}} \left[\frac{1}{r_{01}^2} \delta(r_1 - r_{01}) \delta(\cos \theta_1 - \cos \theta_{01}) \delta(\phi_1 - \phi_{01}) \right] \right\}, \\ &= \mu_\phi \frac{r_{01}^3}{R^2} \left\{ \frac{1}{r_{01} \sin \theta_{01}} \frac{\partial}{\partial \phi_{01}} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{01}) \right\}.\end{aligned}\quad (3.44)$$

Como será evidente en la próxima sección, la densidad de carga efectiva $\tilde{\rho}_\phi(\mathbf{r}_1)$ corresponde a la de un dipolo azimutal efectivo. Al igual que el dipolo polar, la carga efectiva total en el espacio de inversión es nula porque también la coordenada radial de ambas cargas es igual, asimismo la transformación de inversión no altera la orientación del dipolo azimutal.

3.4. Potencial de un dipolo puntual en el espacio de inversión

La densidad de carga efectiva $\tilde{\rho}_D(\mathbf{r}_1)$ en el espacio de inversión asociada a un dipolo puntual orientado arbitrariamente en el espacio original es simplemente la superposición de las densidades de las cargas efectivas radial, polar y azimutal que ya se obtuvieron anteriormente [Ecs. (3.36), (3.41) y (3.44), respectivamente]. Por lo tanto

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}_D(\mathbf{r}_1) &= \tilde{\rho}_r(\mathbf{r}_1) + \tilde{\rho}_\theta(\mathbf{r}_1) + \tilde{\rho}_\phi(\mathbf{r}_1), \\ &= \mu_r \frac{r_{01}^2}{R^2} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{01}) + \frac{r_{01}^3}{R^2} \left[\mu_r \frac{\partial}{\partial r_{01}} + \frac{\mu_\theta}{r_{01}} \frac{\partial}{\partial \theta_{01}} + \frac{\mu_\phi}{r_{01} \sin \theta_{01}} \frac{\partial}{\partial \phi_{01}} \right] \\ &\quad \times \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{01}).\end{aligned}\quad (3.45)$$

Nótese que el término dentro del corchete [...] de la Ec. (3.45) está conectado con el gradiente en coordenadas esféricas, por lo que dicha ecuación puede ser reescrita

como

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}_D(\mathbf{r}_1) &= \tilde{q}\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{01}) + \tilde{\boldsymbol{\mu}} \cdot \nabla_{01}\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{01}), \\ &= \tilde{q}\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{01}) - \tilde{\boldsymbol{\mu}} \cdot \nabla_1\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{01}),\end{aligned}\tag{3.46}$$

donde

$$\tilde{q} = \mu_r \frac{r_{01}^2}{R^2},\tag{3.47}$$

$$\tilde{\boldsymbol{\mu}} = \frac{r_{01}^3}{R^2}(\mu_r \mathbf{n}_{r_1} + \mu_\theta \mathbf{n}_{\theta_1} + \mu_\phi \mathbf{n}_{\phi_1}).\tag{3.48}$$

El gradiente ∇_{01} (∇_1) opera sobre las coordenadas \mathbf{r}_{01} (\mathbf{r}_1), por lo tanto la distribución $\tilde{\rho}_D(\mathbf{r}_1)$ es la fuente que genera $\Psi(\mathbf{r}_1)$ en el espacio de inversión, satisfaciendo la ecuación de Poisson

$$\nabla_1^2 \Psi(\mathbf{r}_1) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \tilde{\rho}_D(\mathbf{r}_1),\tag{3.49}$$

donde $\tilde{\rho}_D(\mathbf{r}_1)$ [Ec. (3.46)] es una distribución debida a una carga puntual efectiva \tilde{q} y aun dipolo puntual efectivo $\tilde{\boldsymbol{\mu}}$. Una vez que se obtiene $\Psi(\mathbf{r}_1)$, el potencial $\Phi(\mathbf{r})$ se obtiene a través de la relación

$$\Phi(r, \theta, \phi) = \frac{1}{r} \Psi[r_1(r), \theta_1(\theta), \phi_1(\phi)].\tag{3.50}$$

Por consiguiente hemos derivado las Ecs. (3.4-3.6) que se habían postulado al inicio de este capítulo.

Capítulo 4

Potencial y campo eléctrico creado por un dipolo en la cercanía del dímero: ubicación y orientación axial

Como habíamos mencionado nuestro problema central es hallar el campo eléctrico $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ generado por un dipolo que oscila armónicamente y se sitúa en la cercanía de dos esferas dieléctricas. Y justificamos que este campo eléctrico puede ser obtenido a partir de encontrar el potencial eléctrico $\Phi(\mathbf{r})$ [aproximación cuasi-estática].

Se toma en cuenta el mismo sistema geométrico (dímero) que ha sido descrito en el capítulo 1, tal como se ilustra nuevamente en la Fig. 4.1(a). Este entorno posee las siguientes propiedades dieléctricas: el medio en el interior de la esfera S_1 [S_2] tiene una constante dieléctrica $\epsilon_1(\omega)$ [$\epsilon_2(\omega)$] y ambas esferas dieléctricas están rodeadas de un medio con constante dieléctrica $\epsilon_m(\omega)$.

En particular, se analiza el caso donde el dipolo se encuentra afuera de las esferas dieléctricas y sobre el eje z , es decir, su posición es

$$\mathbf{r}_0 = z_d \mathbf{n}_z; \quad (4.1)$$

además se restringe la orientación de su momento dipolar en la dirección z , esto es,

$$\boldsymbol{\mu} = \mu \mathbf{n}_z. \quad (4.2)$$

Asumiendo esta ubicación y esta orientación del dipolo particulares, el objetivo principal de este capítulo es obtener el potencial $\Phi(\mathbf{r})$ que genera dicho dipolo usando la transformación de inversión; el campo eléctrico es concomitante con el potencial $\Phi(\mathbf{r})$ [Ec. (3.1)]. Por consiguiente, aquí encontraremos $\Psi(\mathbf{r}_1)$ resolviendo la ecuación de Poisson (3.49) (espacio de inversión) dada la densidad de carga efectiva correspondiente al dipolo con la localización y orientación anteriormente mencionada. Como se estableció en el capítulo 2, una vez encontrada $\Psi(\mathbf{r}_1)$, $\Phi(\mathbf{r})$ es obtenida con la Ec. (3.50).

4.1. Potencial Ψ en el espacio de inversión

En el espacio de inversión, como se ha mostrado en el capítulo 1, la geometría resultante del dímero son dos esferas concéntricas S'_1 y S'_2 [véase de nuevo esta geometría en la Fig. 4.1(b)]. Asumiendo las propiedades dieléctricas del dímero que se mencionaron, las propiedades dieléctricas del entorno resultante en el espacio de inversión son: el interior [exterior] de S'_1 [S'_2] posee una constante dieléctrica $\epsilon_1(\omega)$ [$\epsilon_2(\omega)$], mientras que la región comprendida entre las esferas S'_1 y S'_2 tiene una constante dieléctrica ϵ_m .

Anteriormente se había mostrado que el centro de las esferas concéntricas S'_1 y S'_2 no coincide con el origen O_1 del espacio de inversión sino que está localizado sobre el eje z_1 en $z_{c1} = R^2/(2R_0)$ [Ec. (2.8)]. Es conveniente tener un sistema de referencia, denominado 2, cuyo origen O_2 coincida con el centro de dichas esferas concéntricas, de esta manera la representación del potencial tendrá una simetría esférica respecto a

este origen O_2 . Las coordenadas de este nuevo sistema de referencia se relacionan con las del sistema de referencia inicial del espacio de inversión mediante una traslación en la dirección axial. Las relaciones entre las coordenadas esféricas (r_2, θ_2, ϕ_2) del sistema de referencia 2 y las del marco de referencia inicial (r_1, θ_1, ϕ_1) están dadas por

$$r_2 = \sqrt{r_1^2 + z_{c1}^2 - 2r_1 z_{c1} \cos \theta_1}, \quad (4.3)$$

$$\cos \theta_2 = \frac{r_1 \cos \theta_1 - z_{c1}}{\sqrt{r_1^2 + z_{c1}^2 - 2r_1 z_{c1} \cos \theta_1}}, \quad (4.4)$$

$$\phi_2 = \phi_1. \quad (4.5)$$

Las Ecs. (4.3) y (4.4) se obtienen directamente usando trigonometría [ver Fig. 4.1(b)]. Debido a la mencionada traslación axial, las coordenadas ϕ_2 y ϕ_1 son iguales [Ec. (4.5)].

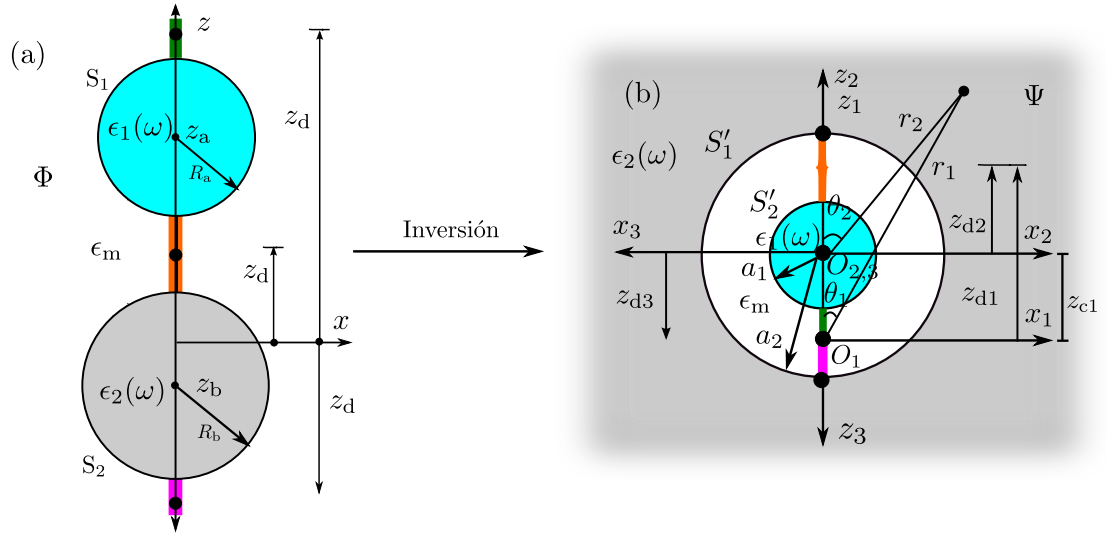


Figura 4.1: Configuración de las esferas dieléctricas. (a) Espacio original. (b) Espacio de inversión.

Por otro lado, como se indicó, el dipolo puntual está localizado en \mathbf{r}_0 [Ec. (4.1)]. Por lo tanto el mapeo de este punto axial al espacio de inversión se ubica sobre el

eje z_1 , en

$$\mathbf{r}_{01} = z_{d1}\mathbf{n}_{z1}, \quad z_{d1} = \frac{R^2}{z_d}; \quad (4.6)$$

siendo \mathbf{n}_{z1} el vector unitario en la dirección z_1 . En \mathbf{r}_{01} se localiza la carga efectiva y el dipolo efectivo. En la Fig. 4.1 hemos incluido el mapeo de los puntos del eje z que están fuera de las esferas (ubicación del dipolo) al espacio de inversión.

En el ya definido sistema de referencia con origen en el centro de las esferas concéntricas S'_1 y S'_2 , el punto fuente se ubica ahora en

$$\mathbf{r}_{02} = z_{d2}\mathbf{n}_{z2}, \quad z_{d2} = z_{d1} - z_{c1}, \quad (4.7)$$

donde \mathbf{n}_{z2} es el vector unitario en la dirección de z_2 .

Por conveniencia algebraica requerimos que el punto fuente en el espacio de inversión esté posicionado sobre un eje azimutal positivo. Por lo tanto, si la coordenada fuente z_{d2} es negativa, entonces no se cumple la condición anterior. A consecuencia de esto, es necesario definir aún otro sistema más de referencia donde el punto fuente satisfaga el requerimiento azimutal que se ha mencionado. Por lo contrario, si z_{d2} es positivo, en principio, no es necesario definir otro sistema de referencia, dado que z_{d2} se sitúa ya sobre el eje azimutal positivo z_2 . Sin embargo para efectos de simplicidad, definiremos un nuevo sistema de referencia, denominado 3, que considere ambos casos; el origen O_3 de este marco de referencia es el centro de las esferas concéntricas S'_1 y S'_2 . Obviamente, si z_{d2} es positivo, entonces el sistema de referencia (x_3, y_3, z_3) [coordenadas cartesianas] coincide con el sistema (x_2, y_2, z_2) . Si sucede lo contrario, $z_{d2} < 0$, entonces el sistema de referencia 3 está relacionado con el sistema 2 mediante una rotación de π radianes alrededor del eje y_2 . Por consiguiente, las relaciones entre las coordenadas esféricas de los sistemas de referencia 2 y 3 están definidas por

$$r_3 = r_2, \quad \cos \theta_3 = \cos \gamma \cos \theta_2, \quad \phi_3 = \gamma + \cos \gamma \phi_2. \quad (4.8)$$

Aquí

$$\gamma = \begin{cases} 0 & \text{si } z_{d2} > 0 \\ \pi & \text{si } z_{d2} < 0 \end{cases}, \quad (4.9)$$

es decir, γ es la coordenada polar de \mathbf{r}_{02} . Finalmente la posición \mathbf{r}_{03} de la fuente (carga y dipolo efectivos) en el sistema de referencia 3 simplemente es

$$\mathbf{r}_{03} = z_{d3}\mathbf{n}_{z3}, \quad z_{d3} = |z_{d2}|, \quad (4.10)$$

donde \mathbf{n}_{z3} es el vector unitario en la dirección z_3 . Nótese que \mathbf{r}_{03} se sitúa sobre el eje azimutal positivo.

Como en el sistema de referencia (r_3, θ_3, ϕ_3) se obtendrá Ψ , sólo nos resta encontrar la densidad de carga efectiva en función de las coordenadas (r_3, θ_3, ϕ_3) . Se había visto que la orientación del momento dipolar la hemos fijado en la dirección z [Ec. (4.2)]. Por lo tanto, es claro que este dipolo $\boldsymbol{\mu}$ tendrá únicamente una componente radial cuando se expresa en su forma vectorial esférica; usando la convención definida en la Ec. (3.9), tenemos que esta componente es

$$\mu_r = -\cos\theta_0\mu, \quad \theta_0 = \begin{cases} 0 & \text{si } z_d > 0 \\ \pi & \text{si } z_d < 0 \end{cases}, \quad (4.11)$$

donde θ_0 es la coordenada esférica de \mathbf{r}_0 [Ec. (4.1)].

Dada la componente radial μ_r , en el espacio de inversión aparecerá una carga efectiva [Ec. (3.47)]

$$\tilde{q} = -\frac{r_{01}^2}{R^2} \cos\theta_0\mu, \quad (4.12)$$

$$r_{01} = |z_{d1}|. \quad (4.13)$$

Esta carga está localizada en \mathbf{r}_{03} . Nótese de la Ec. (4.12) que si el momento dipolar apunta hacia abajo, es decir, $\mu < 0$, entonces la carga efectiva \tilde{q} será positiva (negativa) cuando $z_d > 0$ ($z_d < 0$). En el caso opuesto, si el momento dipolar apunta hacia

arriba, esto es, $\mu > 0$, entonces la carga efectiva tendrá signo negativo (positivo) cuando $z_d > 0$ ($z_d < 0$).

Por otro lado, en el espacio de inversión [marco de referencia 1] se tiene un dipolo efectivo [Ec. (3.48)]

$$\tilde{\boldsymbol{\mu}} = \frac{r_{01}^3}{R^2} \mu_r \cos \theta_0 \mathbf{n}_{z1} = -\frac{r_{01}^3}{R^2} \mu \mathbf{n}_{z1}, \quad (4.14)$$

donde \mathbf{n}_{z1} es el vector unitario cartesiano en la dirección z_1 . Mientras que en el sistema de referencia 2, el vector $\tilde{\boldsymbol{\mu}}$, se expresa como

$$\tilde{\boldsymbol{\mu}} = -\frac{r_{01}^3}{R^2} \mu \mathbf{n}_{z2}, \quad (4.15)$$

donde \mathbf{n}_{z2} es el vector unitario en la dirección z_2 . Nótese que la componente en ambos sistemas es la misma [Ecs. (4.13) y (4.14)], esto obedece a que la relación entre los sistemas de referencia 1 y 2 es a través de una traslación axial [ver Ec. (4.12)].

Finalmente el vector $\tilde{\boldsymbol{\mu}}$ visto desde el sistema de referencia 3 está dado por

$$\tilde{\boldsymbol{\mu}} = -\frac{r_{01}^3}{R^2} \mu \cos \gamma \mathbf{n}_{z3}, \quad (4.16)$$

donde \mathbf{n}_{z3} es el vector unitario en la dirección z_3 . Por lo tanto, de la Ec. (4.16), si $\mu < 0$, entonces la componente cartesiana en la dirección z_3 de $\tilde{\boldsymbol{\mu}}$ es positiva (negativa) cuando $z_{d2} > 0$ ($z_{d2} < 0$); mientras que en el caso contrario, $\mu > 0$, $\tilde{\boldsymbol{\mu}}$ apuntará hacia el eje z_3 negativo (positivo) si $z_{d2} > 0$ ($z_{d2} < 0$).

Por consiguiente, la ecuación particular a resolver es la siguiente:

$$\nabla_3^2 \Psi(\mathbf{r}_3) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \tilde{\rho}_D(\mathbf{r}_3), \quad (4.17)$$

donde la geometría y propiedades dieléctricas del entorno se muestran en la Fig. 4.1(b) y

$$\tilde{\rho}_D(\mathbf{r}_3) = \tilde{q}\delta(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_{03}) - \tilde{\boldsymbol{\mu}} \cdot \nabla_3 \delta(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_{03}). \quad (4.18)$$

Aquí \tilde{q} [$\tilde{\boldsymbol{\mu}}$] está dado por la Ec. (4.12) [Ec. (4.16)].

4.2. Potencial resultante $\Psi(\mathbf{r}_3)$

Ahora procederemos a resolver la Ec. (4.17) en el espacio de inversión. Como vimos las esferas concéntricas y dieléctricas son excitadas por una carga efectiva \tilde{q} y un dipolo efectivo $\tilde{\boldsymbol{\mu}}$, ambas excitaciones están localizadas en $\mathbf{r}_{03} = z_{d3}\mathbf{n}_{z3}$ ($a_1 < z_{d3} < a_2$).

Si el punto campo \mathbf{r}_3 se encuentra en la región delimitada por $a_1 < |\mathbf{r}_3| < a_2$ (punto campo entre las esferas S'_1 y S'_2), existen dos trayectorias de interacción del punto fuente \mathbf{r}_{03} al punto campo \mathbf{r}_3 : (1) la trayectoria directa y (2) la trayectoria que va de las esferas y desde ahí al punto campo \mathbf{r}_3 . Cuando $r_3 < a_1$ ($r_3 > a_2$), es decir, el punto campo está en el interior (exterior) de la esfera S'_1 (S'_2), solamente existe una trayectoria de interacción. Por lo tanto el potencial $\Psi(\mathbf{r}_3)$ puede ser expresado como

$$\Psi(\mathbf{r}_3) = \sum_{\alpha=1}^2 \begin{cases} \Psi_{0d}^{(\alpha)}(\mathbf{r}_3) + \Psi_{0s}^{(\alpha)}(\mathbf{r}_3), & \text{si } a_1 < |\mathbf{r}_3| < a_2 \\ \Psi_1^{(\alpha)}(\mathbf{r}_3), & \text{si } |\mathbf{r}_3| < a_1 \\ \Psi_2^{(\alpha)}(\mathbf{r}_3), & \text{si } |\mathbf{r}_3| > a_2 \end{cases} . \quad (4.19)$$

Aquí, en la región $a_1 < r_3 < a_2$, $\Psi_{0d}^{(1)}(\mathbf{r}_3)$ [$\Psi_{0d}^{(2)}(\mathbf{r}_3)$] es el potencial creado por la carga efectiva [dipolo efectivo] en ausencia de las esferas concéntricas, correspondiendo a la trayectoria directa de interacción; $\Psi_{0s}^{(1)}(\mathbf{r}_3)$ es el potencial esparcido, originado por la redistribución de carga en las esferas que es inducido por la carga efectiva y $\Psi_{0s}^{(2)}(\mathbf{r}_3)$ es el potencial esparcido por las esferas que genera el dipolo efectivo, estas contribuciones corresponden a la trayectoria indirecta. Mientras que $\Psi_1^{(\alpha)}(\mathbf{r}_3)$ [$\Psi_2^{(\alpha)}(\mathbf{r}_3)$] es el potencial interno [externo] en la esfera S'_1 [S'_2] debido a la redistribución de carga antes mencionada; $\alpha = 1$ corresponde a la carga efectiva y $\alpha = 2$ está asociada al dipolo efectivo.

En general es posible expresar cualquier potencial como una superposición de multipolos. Debido a que nuestro problema tiene simetría esférica con respecto al sistema (r_3, θ_3, ϕ_3) , resulta apropiado usar esta expansión multipolar. Dicha expansión multipolar tiene la forma general

$$\begin{aligned} \psi(r_3, \theta_3, \phi_3) = & \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \left[\left(a_{nm} r_3^n + \frac{b_{nm}}{r_3^{n+1}} \right) P_n^m(\cos \theta_3) \cos(m\phi_3) \right. \\ & \left. + \left(c_{nm} r_3^n + \frac{d_{nm}}{r_3^{n+1}} \right) P_n^m(\cos \theta_3) \sin(m\phi_3) \right], \end{aligned} \quad (4.20)$$

donde a_{nm} , b_{nm} , c_{nm} , d_{nm} son constantes y $P_n^m(\dots)$ representan los polinomios asociados de Legendre de grado n y orden m los cuales se definen como

$$P_n^m(u) = (1-u)^{m/2} \frac{d}{du^m} P_n(u), \quad (4.21)$$

siendo $P_n(u)$ el polinomio de Legendre de grado n y orden $m = 0$ ($P_n \equiv P_n^0$). Cada modo de la serie multipolar satisface la ecuación de Laplace.

Para nuestro caso, la solución ψ únicamente tiene los términos multipolares de orden $m = 0$, es decir, ψ es independiente del ángulo ϕ_3 . Esto se explica del hecho que la carga efectiva y el dipolo efectivo están ubicados sobre el eje azimutal, aunado a que el dipolo efectivo está orientado a lo largo de este eje. Por tanto, la solución particular de $\psi(\mathbf{r}_3)$ [Ec. (4.20)] es reducida a

$$\psi(r_3, \theta_3) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(a_{n0} r_3^n + \frac{b_{n0}}{r_3^{n+1}} \right) P_n(\cos \theta_3). \quad (4.22)$$

Considerando esto último, la solución en cada una de las tres regiones se establecerá a continuación.

En la región $a_1 < r_3 < a_2$, la solución del potencial esparcido $\Psi_s^{(\alpha)}(\mathbf{r}_3)$ ($\alpha = 1, 2$) está dada por

$$\Psi_{0s}^{(\alpha)}(r_3, \theta_3) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tilde{\sigma}_\alpha}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \left(A_n^{(\alpha)} r_3^n + \frac{B_n^{(\alpha)}}{r_3^{n+1}} \right) P_n(\cos \theta_3), \quad (4.23)$$

donde $A_n^{(\alpha)}$ y $B_n^{(\alpha)}$ son coeficientes que indican el peso de cada multipolo, $\tilde{\sigma}_1 \equiv \tilde{q}$ [Ec. (4.12)] y $\tilde{\sigma}_2 \equiv \tilde{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{n}_{z3}$ [Ec. (4.16)].

Los potenciales $\Psi_{0d}^{(1)}(\mathbf{r}_3)$ y $\Psi_{0d}^{(2)}(\mathbf{r}_3)$, como habíamos descrito, corresponden a la interacción directa y por consiguiente estos potenciales satisfacen la ecuación de Poisson (4.17) considerando un entorno en el que no existen esferas, es decir, un medio ilimitado con constante dieléctrica ϵ_m . Las expresiones explícitas de $\Psi_{0d}^{(1)}(\mathbf{r}_3)$ [carga] y $\Psi_{0d}^{(2)}(\mathbf{r}_3)$ [dipolo] son ya conocidas [38], siendo éstas:

$$\Psi_{0d}^{(1)}(\mathbf{r}_3) = \frac{1}{4\pi\epsilon_o\epsilon_m} \frac{\tilde{q}}{|\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_{03}|} = \frac{\tilde{\sigma}_1}{4\pi\epsilon_o\epsilon_m} \frac{1}{(r_3^2 + z_{d3}^2 - 2r_3z_{d3}\cos\theta_3)^{1/2}}, \quad (4.24)$$

$$\Psi_{0d}^{(2)}(\mathbf{r}_3) = \frac{1}{4\pi\epsilon_o\epsilon_m} \tilde{\boldsymbol{\mu}} \cdot \frac{\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_{03}}{|\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_{03}|^3} = \frac{\tilde{\sigma}_2}{4\pi\epsilon_o\epsilon_m} \frac{r_3 \cos\theta_3 - z_{d3}}{(r_3^2 + z_{d3}^2 - 2r_3z_{d3}\cos\theta_3)^{3/2}}. \quad (4.25)$$

En el interior de la esfera S'_1 ($r_3 < a_1$), la solución para el potencial $\Psi_1^{(\alpha)}(\mathbf{r}_3)$ posee una expansión multipolar de la siguiente forma

$$\Psi_1^{(\alpha)}(r_3, \theta_3) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tilde{\sigma}_\alpha}{4\pi\epsilon_o\epsilon_m} C_n^{(\alpha)} r_3^n P_n(\cos\theta_3), \quad (\alpha = 1, 2). \quad (4.26)$$

donde $C_n^{(\alpha)}$ es una constante (amplitud del multipolo). En la expansión (4.26) los términos que son proporcionales a $r_3^{-(n+1)}$ han sido ignorados debido a que el potencial debe ser finito en el origen.

Por último, el potencial $\Psi_2^{(\alpha)}(\mathbf{r}_3)$ corresponde a la región $r_3 > a_2$ está dado por

$$\Psi_2^{(\alpha)}(r_3, \theta_3) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tilde{\sigma}_\alpha}{4\pi\epsilon_o\epsilon_m} \frac{D_n^{(\alpha)}}{r_3^{n+1}} P_n(\cos\theta_3), \quad (4.27)$$

donde el peso del multipolo es el coeficiente $D_n^{(\alpha)}$. En la Ec. (4.27) no hemos tomado en cuenta los términos proporcionales a r_3^n dado que $\Psi(\mathbf{r}_3)$ no debe diverger en el límite cuando $r_3 \rightarrow \infty$.

Ahora, solamente nos hace falta encontrar los coeficientes $A_n^{(\alpha)}$, $B_n^{(\alpha)}$, $C_n^{(\alpha)}$ y $D_n^{(\alpha)}$. Estos son determinados a partir de evaluar las condiciones de frontera las cuales serán tratadas en la siguiente sección.

4.3. Condiciones de frontera.

Estableceremos las condiciones de frontera que el potencial Ψ (en el espacio de inversión) debe satisfacer.

4.3.1. Primera condición de frontera

En el espacio original, el potencial eléctrico es continuo en la superficie de las esferas S_1 y S_2 , esto es,

$$\Phi_j(\mathbf{b}_j) = \Phi_0(\mathbf{b}_j), \quad j = 1, 2, \quad (4.28)$$

siendo $\Phi_0(\mathbf{r})$ el potencial en la región exterior a las esferas S_1 y S_2 , $\Phi_j(\mathbf{r})$ el potencial en el interior de S_j y \mathbf{b}_j un punto arbitrario que se ubica en la superficie de la esfera S_j [$j = 1, 2$].

Usamos la Ec. (3.50) para establecer la condición de frontera en el espacio de inversión. Mediante esta ecuación se obtiene directamente que

$$\Psi_j(\mathbf{b}_{1j}) = \Psi_0(\mathbf{b}_{1j}) \quad j = 1, 2, \quad (4.29)$$

donde $\Psi_0(\mathbf{r}_3)$ es el potencial en la región comprendida entre las dos esferas concéntricas S'_1 y S'_2 , $\Psi_1(\mathbf{r}_3)$ [$\Psi_2(\mathbf{r}_3)$] es el potencial en el interior [exterior] de S'_1 [S'_2] y \mathbf{b}_{1j} es el mapeo de un punto \mathbf{b}_j de la esfera S_j a un punto de la esfera S'_j en el espacio de inversión. De la Ec. (4.29) se postula que el potencial Ψ en el espacio de inversión es también continuo en una interfaz.

4.3.2. Segunda condición de frontera

La otra condición de frontera en el espacio original establece que las componentes normales del vector desplazamiento $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ en la interfaz de cualquiera de las esferas

S_1 y S_2 son continuas, esto es,

$$\mathbf{N}_j(\mathbf{b}_j) \cdot \mathbf{D}_j(\mathbf{b}_j) = \mathbf{N}_j(\mathbf{b}_j) \cdot \mathbf{D}_0(\mathbf{b}_j), \quad j = 1, 2 \quad (4.30)$$

donde $\mathbf{D}_0(\mathbf{r})$ es el vector desplazamiento en el exterior de las esferas, $\mathbf{D}_j(\mathbf{r})$ es el vector desplazamiento en el interior de la esfera S_j ($j = 1, 2$) y $\mathbf{N}(\mathbf{b}_j)$ es un vector unitario normal a la superficie S_j en el punto frontera \mathbf{b}_j .

En el límite *cuasi-estático*, $\mathbf{D}_\beta(\mathbf{r})$ ($\beta = 0, 1, 2$) se puede obtener a partir del potencial por medio de

$$\mathbf{D}_\beta(\mathbf{r}) = -\varepsilon_0 \epsilon_\beta \nabla \Phi_\beta(\mathbf{r}), \quad \beta = 0, 1, 2, \quad (4.31)$$

donde $\epsilon_0 \equiv \epsilon_m$. Por lo tanto, la condición de frontera (4.30) puede ser reescrita como

$$\epsilon_0 \frac{\partial}{\partial s_j} \Phi_0(\mathbf{r}) \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{b}_j} = \epsilon_j \frac{\partial}{\partial s_j} \Phi_j(\mathbf{r}) \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{b}_j}, \quad j = 1, 2 \quad (4.32)$$

donde $\partial/\partial s_j = \mathbf{N}(\mathbf{b}_j) \cdot \nabla$ es la derivada direccional en la dirección del vector $\mathbf{N}(\mathbf{b}_j)$.

La particularidad de nuestro sistema geométrico [véase Fig. 4.1(a)] implica que el vector normal unitario $\mathbf{N}_j(\mathbf{b}_j)$ sobre la superficie de la esfera S_j esté compuesto por una componente radial y otra polar. Específicamente $\mathbf{N}_j(\mathbf{b}_j)$ está dado por

$$\mathbf{N}_j(r, \theta) = \frac{\mathbf{n}_r}{R_j} (r - z_j \cos \theta) + \frac{\mathbf{n}_\theta}{R_j} (z_j \sin \theta), \quad j = 1, 2, \quad (4.33)$$

recordando que: R_j es el radio de la esfera S_j y $z_1 \equiv z_a$ [$z_2 \equiv z_b$] es la coordenada axial del centro de la esfera S_1 [S_2]. Las coordenadas radial r y polar θ de la Ec. (4.33) ubican algún punto de dicha esfera, es decir, satisfacen

$$r^2 + z_j^2 - 2rz_j \cos \theta = R_j^2. \quad (4.34)$$

Para la geometría, la ubicación y la orientación del dipolo que estamos considerando, el potencial $\Phi_\beta(\mathbf{r})$ ($\beta = 0, 1, 2$) sólo depende de las coordenadas r y θ . Asumiendo lo

anterior y usando la Ec. (4.33), resulta

$$\frac{\partial}{\partial s_j} \Phi_\beta(r, \theta) \equiv \frac{1}{R_j} \left[(r - z_j \cos \theta) \frac{\partial}{\partial r} \Phi_\beta(r, \theta) + \frac{z_j \sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \Phi_\beta(r, \theta) \right], \quad (4.35)$$

$\beta = 0, 1, 2$ y $j = 1, 2$. Obviamente la Ec. (4.35) es evaluada en los puntos (r, θ, ϕ) que cumplen con la Ec. (4.34).

Nótese que la Ec. (4.35) depende de las coordenadas y factores geométricos del espacio original y ahora transformaremos dicha ecuación al espacio de inversión en términos de su geometría (esferas concéntricas) y de sus coordenadas esféricas. De acuerdo a los argumentos geométricos mencionados en la sección 3.2, el potencial $\Psi_\beta(\mathbf{r}_3)$ ($\beta = 0, 1, 2$) únicamente depende de r_3 y θ_3 . Ahora es necesario establecer una relación entre las coordenadas del espacio de inversión (r_3, θ_3, ϕ_3) y las coordenadas del espacio original (r, θ, ϕ) , éstas resultan ser

$$\frac{r_3}{\Omega} = \left[\frac{1}{r} (4R_0^2 + r^2 - 4rR_0 \cos \theta)^{1/2} \right], \quad (4.36)$$

$$\cos \theta_3 = \cos \gamma \frac{2R_0 \cos \theta - r}{(4R_0^2 + r^2 - 4rR_0 \cos \theta)^{1/2}}, \quad (4.37)$$

$$\phi_3 = \gamma + \cos \gamma \phi, \quad (4.38)$$

$$\Omega \equiv z_{c1} = R^2/2R_0. \quad (4.39)$$

Obsérvese de la Ec. (4.36) que r_3 está normalizado respecto a Ω , la distancia entre el centro de las esferas concéntricas y el origen \mathcal{O}_1 . También que las Ecs. (4.36) y (4.37) sólo dependen de las coordenadas r y θ . La Ec. (3.50) y las consideraciones geométricas descritas nos conduce a la siguiente relación

$$\Phi_\beta(r, \theta) = \frac{1}{r} \Psi_\beta[r_3(r, \theta), \theta_3(r, \theta)]. \quad (4.40)$$

Usando la Ec. (4.40), las derivadas parciales de la Ec. (4.35) están dadas por

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} [\Phi_\beta(r, \theta)] &= \frac{1}{r} \left[\frac{\partial r_3}{\partial r} \frac{\partial}{\partial r_3} \Psi_\beta(r_3, \theta_3) + \frac{\partial \theta_3}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \theta_3} \Psi_\beta(r_3, \theta_3) \right] \\ &\quad - \frac{1}{r^2} \Psi_\beta(r_3, \theta_3), \end{aligned} \quad (4.41)$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta} [\Phi_\beta(r, \theta)] = \frac{1}{r} \left[\frac{\partial r_3}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial r_3} \Psi_\beta(r_3, \theta_3) + \frac{\partial \theta_3}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial \theta_3} \Psi_\beta(r_3, \theta_3) \right], \quad (4.42)$$

$\beta = 0, 1, 2$. Los factores de transformación de las Ecs. (4.41) y (4.42) en función de las coordenadas (r_3, θ_3, ϕ_3) resultan

$$\frac{1}{\Omega} \frac{\partial r_3}{\partial r} = -\frac{1}{r} \left(\frac{r_3}{\Omega} + \cos \gamma \cos \theta_3 \right), \quad (4.43)$$

$$\frac{1}{\Omega} \frac{\partial r_3}{\partial \theta} = \sin \theta_3, \quad (4.44)$$

$$\frac{\partial \theta_3}{\partial r} = \cos \gamma \frac{1}{r} \frac{\sin \theta_3}{(r_3/\Omega)}, \quad (4.45)$$

$$\frac{\partial \theta_3}{\partial \theta} = \cos \gamma + \frac{\cos \theta_3}{(r_3/\Omega)}. \quad (4.46)$$

La derivación de las Ecs. (4.43)-(4.46) se presentan en el apéndice B. Finalmente las expresiones $z_j \sin \theta$ y $r - z_j \cos \theta$ de la Ec. (4.35) en términos de las coordenadas (r_3, θ_3, ϕ_3) del espacio de inversión son equivalentes a (véase el apéndice B)

$$f_j(r_3, \theta_3) \equiv z_j \sin[\theta(r, \theta_3)] = \frac{(r_3/\Omega) \sin \theta_3 [R_0 + (-1)^{j-1} h_j]}{[(r_3/\Omega)^2 + 1 + 2(r_3/\Omega) \cos \gamma \cos \theta_3]^{1/2}}, \quad (4.47)$$

$$g_j(r_3, \theta_3) \equiv r(r, \theta_3) - z_j \cos[\theta(r, \theta_3)] = \tau_j \sqrt{R_j^2 - [f_j(r_3, \theta_3)]^2}, \quad (4.48)$$

($j = 1, 2$). Aquí,

$$\tau_1 = \begin{cases} -\cos(\gamma) & \text{si } 0 < \theta_3 < \frac{\pi}{2} + \cos(\gamma)\theta_c \\ \cos(\gamma) & \text{si } \frac{\pi}{2} + \cos(\gamma)\theta_c < \theta_3 < \pi \end{cases}, \quad (4.49)$$

$$\tau_2 = 1, \quad (4.50)$$

donde $\sin \theta_c = R_1/(R_0 + h_1) = \tilde{a}_1$.

Sustituyendo las Ecs. (4.43)-(4.46) en las Ecs. (4.41) y (4.42), luego estas últimas junto con las Ecs. (4.47)-(4.48) se sustituyen en la Ec. (4.35) y se obtiene

$$\frac{\partial \Phi_\beta}{\partial s_j} = \frac{1}{R_j} \frac{1}{r^2} \Gamma_{\beta j}(r_3, \theta_3), \quad (4.51)$$

donde

$$\begin{aligned} \Gamma_{\beta j}(r_3, \theta_3) \equiv & \Lambda_{1j}(r_3, \theta_3) \Omega \frac{\partial}{\partial r_3} \Psi_\beta(r_3, \theta_3) + \Lambda_{2j}(r_3, \theta_3) \frac{\partial}{\partial \theta_3} \Psi_\beta(r_3, \theta_3) \\ & - g_j(r_3, \theta_3) \Psi_\beta(r_3, \theta_3). \end{aligned} \quad (4.52)$$

Aquí

$$\Lambda_{1j}(r_3, \theta_3) \equiv \sin \theta_3 f_j(r_3, \theta_3) - \left(\frac{r_3}{\Omega} + \cos \gamma \cos \theta_3 \right) g_j(r_3, \theta_3), \quad (4.53)$$

$$\Lambda_{2j}(r_3, \theta_3) \equiv \cos \gamma \frac{\sin \theta_3}{(r_3/\Omega)} g_j(r_3, \theta_3) + \left[\cos \gamma + \frac{\cos \theta_3}{(r_3/\Omega)} \right] f_j(r_3, \theta_3). \quad (4.54)$$

Por último, tenemos que la coordenada radial r_3 que está en la superficie de la esfera S'_j es simplemente $r_3 = a_j$ ya que el centro de la esfera S'_j coincide con el origen del sistema de referencia (r_3, θ_3, ϕ_3) . Por consiguiente, usando la Ec. (4.51) en la Ec. (4.32) se obtiene

$$\epsilon_0 \Gamma_{0j}(a_j, \theta_3) = \epsilon_j \Gamma_{jj}(a_j, \theta_3), \quad j = 1, 2. \quad (4.55)$$

La Ec. (4.55) es la segunda condición de frontera que Ψ debe satisfacer. Aquí aprovechamos para mencionar que una condición de frontera no fue establecida apropiadamente en [24]. Nótese que la expresión analítica de esta condición resultó ser complicada. Desafortunadamente la simplificación en la geometría y la forma propuesta de la solución Ψ en el espacio de inversión no vino acompañada de una segunda condición de frontera simple.

4.4. Matriz de coeficientes

Ya con las condiciones de frontera [Ecs. (4.29) y (4.55)] establecidas, es posible determinar $A_n^{(\alpha)}$, $B_n^{(\alpha)}$, $C_n^{(\alpha)}$ y $D_n^{(\alpha)}$ [$\alpha = 1, 2$; $n = 0, 1, 2, 3, \dots$].

Para eliminar la dependencia explícita de R^2 de las soluciones propuestas $\Psi_{0s}^{(\alpha)}$, $\Psi_1^{(\alpha)}$ y $\Psi_2^{(\alpha)}$ [Ecs. (4.23), (4.26) y (4.27), respectivamente] y de los potenciales $\Psi_{0d}^{(\alpha)}$ [Ecs. (4.24) y (4.25)], realizamos las siguientes transformaciones en las ecuaciones mencionadas donde apliquen: $A_n^{(\alpha)} = \Omega^{-(n+1+\delta_{2\alpha})}\tilde{A}_n^{(\alpha)}$, $B_n^{(\alpha)} = \Omega^{(n-\delta_{2\alpha})}\tilde{B}_n^{(\alpha)}$, $C_n^{(\alpha)} = \Omega^{-(n+1+\delta_{2\alpha})}\tilde{C}_n^{(\alpha)}$, $D_n^{(\alpha)} = \Omega^{(n-\delta_{2\alpha})}\tilde{D}_n^{(\alpha)}$, $\tilde{r}_3 = r_3/\Omega$, $\bar{\sigma}_\alpha = \tilde{\sigma}_\alpha/\Omega^{(1+\delta_{2\alpha})}$ y $\tilde{z}_{d3} = z_{d3}/\Omega$. Los coeficientes $\tilde{A}_n^{(\alpha)}$, $\tilde{B}_n^{(\alpha)}$, $\tilde{C}_n^{(\alpha)}$ y $\tilde{D}_n^{(\alpha)}$ son adimensionales, y δ_{ij} es la delta de Kronecker. Por consiguiente,

$$\Psi_{0s}^{(\alpha)}(\tilde{r}_3, \theta_3) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\bar{\sigma}_\alpha}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \left(\tilde{A}_n^{(\alpha)}\tilde{r}_3^n + \frac{\tilde{B}_n^{(\alpha)}}{\tilde{r}_3^{n+1}} \right) P_n(\cos \theta_3), \quad \tilde{a}_1 < \tilde{r}_3 < \tilde{a}_2, \quad (4.56)$$

$$\Psi_1^{(\alpha)}(\tilde{r}_3, \theta_3) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\bar{\sigma}_\alpha}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \tilde{C}_n^{(\alpha)}\tilde{r}_3^n P_n(\cos \theta_3), \quad \tilde{r}_3 < \tilde{a}_1, \quad (4.57)$$

$$\Psi_2^{(\alpha)}(\tilde{r}_3, \theta_3) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\bar{\sigma}_\alpha}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \frac{\tilde{D}_n^{(\alpha)}}{\tilde{r}_3^{n+1}} P_n(\cos \theta_3), \quad \tilde{r}_3 > \tilde{a}_2. \quad (4.58)$$

Aquí, $\tilde{a}_j = a_j/\Omega$ ($j = 1, 2$), es decir, los radios de las esferas concéntricas en el espacio de inversión son normalizados con respecto a Ω y explícitamente $\bar{\sigma}_1 = -2R_0 \cos \theta_{0\mu}/|z_d|^2$ y $\bar{\sigma}_2 = -(2R_0)^2 \cos \theta_{02\mu}/|z_d|^3$. Mientras que los potenciales de interacción directa quedan:

$$\Psi_{0d}^{(1)}(\tilde{r}_3, \theta_3) = \frac{\bar{\sigma}_1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \frac{1}{(\tilde{r}_3^2 + \tilde{z}_{d3}^2 - 2\tilde{r}_3\tilde{z}_{d3} \cos \theta_3)^{1/2}}, \quad (4.59)$$

$$\Psi_{0d}^{(2)}(\tilde{r}_3, \theta_3) = \frac{\bar{\sigma}_2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \frac{\tilde{r}_3 \cos \theta_3 - \tilde{z}_{d3}}{(\tilde{r}_3^2 + \tilde{z}_{d3}^2 - 2\tilde{r}_3\tilde{z}_{d3} \cos \theta_3)^{3/2}}. \quad (4.60)$$

Dado que en el sistema de referencia 3 las esferas S'_1 y S'_2 están centradas en el origen, luego (a_1, θ_3, ϕ_3) [(a_2, θ_3, ϕ_3)] denota todos los puntos en la interfaz S'_1 [S'_2].

En consideración de lo anterior, la primera condición [Ec. (4.29)] demanda que

$$\Psi_j^{(\alpha)}(\tilde{a}_j, \theta_3) = \Psi_0^{(\alpha)}(\tilde{a}_j, \theta_3), \quad \alpha, j = 1, 2, \quad (4.61)$$

donde

$$\Psi_0^{(\alpha)}(\tilde{a}_j, \theta_3) = \Psi_{0d}^{(\alpha)}(\tilde{a}_j, \theta_3) + \Psi_{0s}^{(\alpha)}(\tilde{a}_j, \theta_3). \quad (4.62)$$

Haciendo uso de las Ecs. (4.56-4.60) en la Ec (4.61) encontramos explícitamente que

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[\tilde{A}_n^{(\alpha)} \tilde{a}_j^n + \frac{\tilde{B}_n^{(\alpha)}}{\tilde{a}_j^{n+1}} - \delta_{1j} \tilde{C}_n^{(\alpha)} \tilde{a}_j^n - \delta_{2j} \frac{\tilde{D}_n^{(\alpha)}}{\tilde{a}_j^{n+1}} \right] P_n(\cos \theta_3) = -\xi^{(\alpha)}(\tilde{a}_j, \theta_3), \quad (4.63)$$

donde $\alpha, j = 1, 2$ y

$$\xi^{(\alpha)}(\tilde{a}_j, \theta_3) \equiv \Psi_{0d}^{(\alpha)}(\tilde{a}_j, \theta_3) / [\bar{\sigma}_\alpha / 4\pi\epsilon_0\epsilon_m]. \quad (4.64)$$

Debido a la redefinición de los potenciales Ψ_β [$\beta = 0, 1, 2$, Ecs. (4.56-4.60)] para poder aplicar correctamente la segunda condición de frontera [Ec. (4.55)], es importante hacer notar que en la Ec. (4.52) $\partial/\partial r_3 \equiv \Omega^{-1}\partial/\partial \tilde{r}_3$. Tomando en cuenta lo anterior y la obtención explícita de las derivadas parciales $\partial/\partial \tilde{r}_3$ y $\partial/\partial \theta_3$ de Ψ_β que aparecen en la Ec. (4.51), la evaluación de la segunda condición de frontera [Ec. (4.55)] resulta:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left\{ w_{1n}(\tilde{a}_j, \theta_3) \left[\tilde{A}_n^{(\alpha)} - \left(\frac{\epsilon_j}{\epsilon_0} \right) \delta_{1j} \tilde{C}_n^{(\alpha)} \right] + w_{2n}(\tilde{a}_j, \theta_3) \times \right. \\ \left. \left[\tilde{B}_n^{(\alpha)} - \left(\frac{\epsilon_j}{\epsilon_0} \right) \delta_{2j} \tilde{D}_n^{(\alpha)} \right] \right\} = \chi_j^{(\alpha)}(\tilde{a}_j, \theta_3). \quad (4.65)$$

Aquí

$$w_{1n}(\tilde{a}_j, \theta_3) = [n\tilde{a}_j^{n+1}\Lambda_{1j}(\tilde{a}_j\Omega, \theta_3) - \tilde{a}_j^n g_j(\tilde{a}_j\Omega, \theta_3)]P_n(\cos \theta_3) \\ - \tilde{a}_j^n \Lambda_{2j}(\tilde{a}_j\Omega, \theta_3)P_n^1(\cos \theta_3), \quad (4.66)$$

$$w_{2n}(\tilde{a}_j, \theta_3) = - \left[\frac{(n+1)}{\tilde{a}_j^{n+2}} \Lambda_{1j}(\tilde{a}_j \Omega, \theta_3) + \frac{1}{\tilde{a}_j^{n+1}} g_j(\tilde{a}_j \Omega, \theta_3) \right] P_n(\cos \theta_3) - \frac{1}{\tilde{a}_j^{n+1}} \Lambda_{2j}(\tilde{a}_j \Omega, \theta_3) P_n^1(\cos \theta_3), \quad (4.67)$$

donde en las Ecs. (4.66) y (4.67) hemos considerado el hecho que $\partial P_n[\cos \theta_3]/\partial \theta_3 = -P_n^1[\cos \theta_3]$ [véase Ec. (4.21)]. Por último,

$$\chi_j^{(\alpha)}(\tilde{a}_j, \theta_3) \equiv -\Lambda_{1j}(\tilde{a}_j \Omega, \theta_3) v_1^{(\alpha)}(\tilde{a}_j, \theta_3) + \sin \theta_3 \Lambda_{2j}(\tilde{a}_j \Omega, \theta_3) v_2^{(\alpha)}(\tilde{a}_j, \theta_3) + g_j(\tilde{a}_j \Omega, \theta_3) \xi^{(\alpha)}(\tilde{a}_j, \theta_3), \quad (4.68)$$

donde

$$v_1^{(1)}(\tilde{r}_3, \theta_3) \equiv \left[\frac{\bar{\sigma}_1}{4\pi \varepsilon_0 \epsilon_m} \right]^{-1} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}_3} \Psi_{0d}^{(1)}(\tilde{r}_3, \theta_3) = \frac{\tilde{z}_{d3} \cos \theta_3 - \tilde{r}_3}{(\tilde{r}_3^2 + \tilde{z}_{d3}^2 - 2\tilde{r}_3 \tilde{z}_{d3} \cos \theta_3)^{3/2}}, \quad (4.69)$$

$$v_1^{(2)}(\tilde{r}_3, \theta_3) \equiv \left[\frac{\bar{\sigma}_2}{4\pi \varepsilon_0 \epsilon_m} \right]^{-1} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}_3} \Psi_{0d}^{(2)}(\tilde{r}_3, \theta_3) = \frac{3\tilde{r}_3 \tilde{z}_{d3} - 2(\tilde{r}_3^2 + \tilde{z}_{d3}^2) \cos \theta_3 + \tilde{r}_3 \tilde{z}_{d3} \cos^2 \theta_3}{(\tilde{r}_3^2 + \tilde{z}_{d3}^2 - 2\tilde{r}_3 \tilde{z}_{d3} \cos \theta_3)^{5/2}}, \quad (4.70)$$

$$v_2^{(1)}(\tilde{r}_3, \theta_3) \equiv \left[\frac{\bar{\sigma}_1}{4\pi \varepsilon_0 \epsilon_m} \right]^{-1} \frac{\partial}{\partial \theta_3} \Psi_{0d}^{(1)}(\tilde{r}_3, \theta_3) = \frac{\tilde{r}_3 \tilde{z}_{d3}}{(\tilde{r}_3^2 + \tilde{z}_{d3}^2 - 2\tilde{r}_3 \tilde{z}_{d3} \cos \theta_3)^{3/2}}, \quad (4.71)$$

$$v_2^{(2)}(\tilde{r}_3, \theta_3) \equiv \left[\frac{\bar{\sigma}_2}{4\pi \varepsilon_0 \epsilon_m} \right]^{-1} \frac{\partial}{\partial \theta_3} \Psi_{0d}^{(2)}(\tilde{r}_3, \theta_3) = \frac{\tilde{r}_3(\tilde{r}_3^2 - 2\tilde{z}_{d3}^2 + \tilde{r}_3 \tilde{z}_{d3} \cos \theta_3)}{(\tilde{r}_3^2 + \tilde{z}_{d3}^2 - 2\tilde{r}_3 \tilde{z}_{d3} \cos \theta_3)^{5/2}}. \quad (4.72)$$

Las Ecs. (4.63) y (4.65) establecen un sistema lineal de ecuaciones donde $\tilde{A}_n^{(\alpha)}$, $\tilde{B}_n^{(\alpha)}$, $\tilde{C}_n^{(\alpha)}$ y $\tilde{D}_n^{(\alpha)}$ son los coeficientes incógnitos. Nótese que cada coordenada polar θ_3 de un punto de la esfera (S'_1 o S'_2) define una ecuación lineal. Por lo tanto, la resolución de este sistema de ecuaciones lineales nos conducirá finalmente a determinar el potencial Φ que genera un dipolo orientado en la dirección z y ubicado sobre el eje azimutal z . También observamos que la dependencia de la Ec. (4.65) con la coordenada polar no es meramente proporcional a $P_n(\cos \theta_3)$ o $P_n^1(\cos \theta_3)$, sino que dicha dependencia polar es mucho más compleja y por consiguiente una solución analítica del sistema lineal no puede hallarse. Ante esta situación, los coeficientes $\tilde{A}_n^{(\alpha)}$, $\tilde{B}_n^{(\alpha)}$, $\tilde{C}_n^{(\alpha)}$ y $\tilde{D}_n^{(\alpha)}$

se obtendrán numéricamente. Esta implementación numérica se describe a continuación. Primero el límite superior de la sumatoria de las Ecs. (4.63) y (4.65) debe ser truncado hasta un número entero L_{\max} . Como consecuencia, se tendrá $4(1 + L_{\max})$ coeficientes por determinar $[\tilde{A}_n^{(\alpha)}, \tilde{B}_n^{(\alpha)}, \tilde{C}_n^{(\alpha)}$ y $\tilde{D}_n^{(\alpha)}$, $n = 0, 1, 2, \dots, L_{\max}]$. Lo anterior obliga a tener al menos $4(1 + L_{\max})$ ecuaciones lineales para encontrar dichos coeficientes. Como habíamos dicho cada coordenada polar θ_3 de un punto de cualquier esfera (S'_1 o S'_2) define una ecuación lineal distinta [véase Ecs. (4.63) y (4.65)], por lo tanto para tener al menos $4(1 + L_{\max})$ ecuaciones necesitamos al menos $(1 + L_{\max})$ valores distintos de θ_3 [θ_{3i} , $i = 1, \dots, M$ donde $M \geq (1 + L_{\max})$ y $0 \leq \theta_{3i} \leq \pi$]. El sistema de ecuaciones que se ha descrito puede ser expresado como

$$\overbrace{\begin{bmatrix} \mathcal{A}_{in}(\tilde{a}_1, \theta_{3i}) & \mathcal{B}_{in}(\tilde{a}_1, \theta_{3i}) & \mathcal{C}_{in}(\tilde{a}_1, \theta_{3i}) & \mathcal{D}_{in}(\tilde{a}_1, \theta_{3i}) \\ \mathcal{A}_{in}(\tilde{a}_2, \theta_{3i}) & \mathcal{B}_{in}(\tilde{a}_2, \theta_{3i}) & \mathcal{C}_{in}(\tilde{a}_2, \theta_{3i}) & \mathcal{D}_{in}(\tilde{a}_2, \theta_{3i}) \\ \bar{\mathcal{A}}_{in}(\tilde{a}_1, \theta_{3i}) & \bar{\mathcal{B}}_{in}(\tilde{a}_1, \theta_{3i}) & \bar{\mathcal{C}}_{in}(\tilde{a}_1, \theta_{3i}) & \bar{\mathcal{D}}_{in}(\tilde{a}_1, \theta_{3i}) \\ \bar{\mathcal{A}}_{in}(\tilde{a}_2, \theta_{3i}) & \bar{\mathcal{B}}_{in}(\tilde{a}_2, \theta_{3i}) & \bar{\mathcal{C}}_{in}(\tilde{a}_2, \theta_{3i}) & \bar{\mathcal{D}}_{in}(\tilde{a}_2, \theta_{3i}) \end{bmatrix}}^{\mathcal{A}} \mathbb{X}^{(\alpha)} = \overbrace{\begin{bmatrix} -\xi_i^{(\alpha)}(\tilde{a}_1) \\ -\xi_i^{(\alpha)}(\tilde{a}_2) \\ \chi_i^{(\alpha)}(\tilde{a}_1) \\ \chi_i^{(\alpha)}(\tilde{a}_2) \end{bmatrix}}^{\mathcal{B}}, \quad (4.73)$$

Aquí, $\mathcal{A}_{in}(\tilde{a}_j, \theta_{3i})$ [$\bar{\mathcal{A}}_{in}(\tilde{a}_j, \theta_{3i})$] es el factor multiplicativo del coeficientes \tilde{A}_n de la Ec. (4.63) [Ec. (4.65)] para el punto de la esfera S'_j con coordenada radial normalizada \tilde{a}_j y coordenada polar θ_{3i} y por tanto define una submatriz cuya dimensión es $M \times (L_{\max} + 1)$; de manera análoga los factores multiplicativos de los coeficientes \tilde{B}_n , \tilde{C}_n y \tilde{D}_n para el dicho punto frontera de la Ec. (4.63) [Ec. (4.65)] están dados \mathcal{B}_{in} , \mathcal{C}_{in} y \mathcal{D}_{in} [$\bar{\mathcal{B}}_{in}$, $\bar{\mathcal{C}}_{in}$ y $\bar{\mathcal{D}}_{in}$], respectivamente. $\xi_i^{(\alpha)}(\tilde{a}_j) \equiv \xi^{(\alpha)}(\tilde{a}_j, \theta_{3i})$ y $\chi_i^{(\alpha)}(\tilde{a}_j) \equiv \chi^{(\alpha)}(\tilde{a}_j, \theta_{3i})$ [$j = 1, 2$] son los bloques columna de orden M que están relacionados con el potencial ya conocido que genera el dipolo en ausencia de las esferas [Ecs. (4.64) y (4.68)]; \mathbb{X} es el vector columna de coeficientes, esto es,

$$[\mathbb{X}^{(\alpha)}]^T = [\tilde{A}_0^{(\alpha)} \dots \tilde{A}_{L_{\max}}^{(\alpha)}, \tilde{B}_0^{(\alpha)} \dots \tilde{B}_{L_{\max}}^{(\alpha)}, \tilde{C}_0^{(\alpha)} \dots \tilde{C}_{L_{\max}}^{(\alpha)}, \tilde{D}_0^{(\alpha)} \dots \tilde{D}_{L_{\max}}^{(\alpha)}], \quad (4.74)$$

donde el superíndice T denota transpuesta.

En principio una matriz cuadrada ($M = L_{\max} + 1$) parecería ser suficiente para determinar $\mathbb{X}^{(\alpha)}$. Sin embargo, un sistema sobredeterminado ($M > L_{\max} + 1$) nos provee una solución mucho más robusta ya que esta solución numérica, obtenida a través del algoritmo de descomposición QR [39], minimiza el error cuadrático medio, esto es,

$$\text{Mínimo}[\|\mathcal{A}\mathbb{X} - \mathcal{B}\|_2] \equiv \text{Mínimo} \left[\sum_{i=1}^{4M} \left| \mathcal{B}_i - \sum_{j=1}^{4(L_{\max}+1)} \mathcal{A}_{ij} \mathbb{X}_j \right|^2 \right]. \quad (4.75)$$

Esto se traduce a que la resolución numérica de los coeficientes $\mathbb{X}^{(\alpha)}$ logra que las condiciones de frontera en los puntos (a_j, θ_{3i}) de la esfera S'_j sean satisfechas lo mejor posible. Mencionamos que el método de múltiples multipolos [39–41] para hallar campos electromagnéticos se basa en el mismo principio: los coeficientes de los términos de las expansiones multipolares determinados son los que mejor satisfacen las condiciones de frontera en puntos discretos predeterminados sobre las interfaces.

El método de transformación de inversión para encontrar el potencial generado por un dipolo que se ha implementado es un método semi-analítico ya que la forma funcional de la expansión del potencial es conocida, mientras que la amplitud de cada término de la expansión es obtenida numéricamente.

4.5. Potencial y campo eléctrico

Ya obtenido el potencial $\Psi_{\beta}^{(\alpha)}(\tilde{r}_3, \theta_3)$ ($\beta = 0, 1, 2, \alpha = 1, 2$) en el espacio de inversión, el potencial en el espacio original resultante es [Ec.(4.40)]

$$\Phi_{\beta}(r, \theta) = \sum_{\alpha=1}^2 \frac{1}{r} \Psi_{\beta}^{(\alpha)}[\tilde{r}_3(r, \theta), \theta_3(r, \theta)], \quad \beta = 0, 1, 2. \quad (4.76)$$

Aludimos nuevamente que $\tilde{r}_3(r, \theta)$ y $\theta_3(r, \theta)$ explícitamente están dados por las Ecs. (4.36) y (4.37), respectivamente.

Ahora el campo eléctrico es obtenido de manera directa mediante la Ec. (3.1), esto es,

$$\mathbf{E}_\beta(r, \theta) = -\frac{\partial}{\partial x}\Phi_\beta(r, \theta)\mathbf{n}_x - \frac{\partial}{\partial y}\Phi_\beta(r, \theta)\mathbf{n}_y - \frac{\partial}{\partial z}\Phi_\beta(r, \theta)\mathbf{n}_z. \quad (4.77)$$

Las derivadas parciales cartesianas de la Ec. (4.77) se pueden expresar en coordenadas esféricas como sigue

$$\frac{\partial}{\partial x}\Phi_\beta(r, \theta) = \sin\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial r}\Phi_\beta(r, \theta) + \frac{\cos\theta \cos\phi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}\Phi_\beta(r, \theta), \quad (4.78)$$

$$\frac{\partial}{\partial y}\Phi_\beta(r, \theta) = \sin\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial r}\Phi_\beta(r, \theta) + \frac{\cos\theta \sin\phi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}\Phi_\beta(r, \theta), \quad (4.79)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}\Phi_\beta(r, \theta) = \cos\theta \frac{\partial}{\partial r}\Phi_\beta(r, \theta) - \frac{\sin\theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}\Phi_\beta(r, \theta). \quad (4.80)$$

Las derivadas del potencial $\Phi_\beta(r, \theta)$ respecto a r y θ están dadas por

$$\frac{\partial}{\partial r}\Phi_\beta(r, \theta) = \sum_{\alpha=1}^2 \left[-\frac{\Psi_\beta^{(\alpha)}(\tilde{r}_3, \theta_3)}{r^2} + \frac{1}{r} \mathcal{L}_1 \Psi_\beta^{(\alpha)}(\tilde{r}, \theta_3) \right], \quad (4.81)$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta}\Phi_\beta(r, \theta) = \sum_{\alpha=1}^2 \frac{1}{r} \mathcal{L}_2 \Psi_\beta^{(\alpha)}(\tilde{r}_3, \theta_3), \quad (4.82)$$

donde los operadores \mathcal{L}_1 y \mathcal{L}_2 se definen de la siguiente manera

$$\mathcal{L}_1 \equiv \frac{\partial \tilde{r}_3}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}_3} + \frac{\partial \theta_3}{\partial r} \frac{\partial}{\partial \theta_3}, \quad (4.83)$$

$$\mathcal{L}_2 \equiv \frac{\partial \tilde{r}_3}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}_3} + \frac{\partial \theta_3}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial \theta_3}. \quad (4.84)$$

Las Ecs. (4.43)-(4.46) definen los factores $\partial \tilde{r}_3 / \partial r$, $\partial \tilde{r}_3 / \partial \theta$, $\partial \theta_3 / \partial r$ y $\partial \theta_3 / \partial \theta$, respectivamente. Por último las expresiones explícitas de $\mathcal{L}_1 \Psi_\beta^{(\alpha)}$ y $\mathcal{L}_2 \Psi_\beta^{(\alpha)}$ se encuentran en el apéndice C y con éstas las componentes cartesianas del campo eléctrico se pueden calcular.

Capítulo 5

Excitación dipolar de las resonancias plasmónicas de un dímero de plata

Un metal real absorbe energía electromagnética y ésta es disipada en forma de calor (pérdidas óhmicas). Nuestro objetivo del presente capítulo es analizar el impacto que tienen las pérdidas presentes en un metal real sobre la excitación de las resonancias plasmónicas de un dímero mediante un dipolo. Para realizar este análisis, aplicaremos el método que hemos desarrollado en los capítulos anteriores para encontrar el campo eléctrico generado por un dipolo posicionado en el eje longitudinal del dímero y orientado a lo largo de ese eje. Se considera un dímero conformado por nano-partículas esféricas de plata y de igual tamaño. Se explora la dependencia de los campos plasmónicos con el tamaño y la separación de las nano-partículas y la ubicación del dipolo. Por lo tanto, veremos si es verdaderamente posible excitar las resonancias plasmónicas de un dímero real por medio de un dipolo.

En primera instancia, en la sección 5.1, se describe la función dieléctrica de la plata que como veremos es dependiente del tamaño de las nano-esferas. En la sección 5.2, se presentan las características generales de los modos plasmónicos de un dímero

ideal constituido por nano-esferas de igual tamaño. Además esta sección describe diferentes enfoques para obtener los modos plasmónicos del dímero y discute las maneras por las cuales dichas resonancias plasmónicas pueden ser excitadas. Finalmente, presentamos los resultados en la sección 5.3.

5.1. Constante dieléctrica de un metal noble

Las propiedades dielectro-magnéticas de los metales se originan principalmente de la presencia de *electrones libres*. En este contexto el metal puede ser representado como un gas de electrones donde el movimiento balístico de un electrón es limitado por defectos del cristal e interacciones electrón-electrón, electrón-fonón y electrón-impureza. Sin embargo, en las regiones espectrales del visible y del ultra-violeta cercano, los electrones ligados (transiciones interbanda) contribuyen significativamente a la respuesta electromagnética del metal en dichas regiones espectrales [42]. Por lo tanto, la constante dieléctrica $\epsilon(\omega)$ que caracteriza la respuesta electromagnética de los metales puede ser expresada como

$$\epsilon(\omega) = 1 + \chi_d(\omega) + \chi_i(\omega). \quad (5.1)$$

Aquí, $\chi_i(\omega)$ es la susceptibilidad que corresponde a la contribución de los electrones ligados y $\chi_d(\omega)$ es la susceptibilidad asociada a los electrones libres que está dada por el modelo de Drude, esto es,

$$\chi_d(\omega) = -\frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\tilde{\gamma}_d\omega}, \quad (5.2)$$

donde $\omega_p = \tilde{n}e^2/(m\epsilon_0)$ es la frecuencia de plasma, [\tilde{n} la densidad de electrones libres por unidad de volumen y e (m) es la carga (masa efectiva) del electrón] y $\tau_d \equiv 1/\tilde{\gamma}_d = \ell_\infty/v_F$ es el tiempo promedio entre colisiones [ℓ_∞ es el camino libre

medio del electrón entre colisiones y v_F es la velocidad de Fermi]. Al ser nuestro caso de estudio nano-partículas de plata, consideramos $\omega_p = 1.38 \times 10^{16}$ rad/s, $v_F = 2.7 \times 10^{13}$ nm/s y $\ell_\infty = 52$ nm [43,44].

Si la dimensión de la partícula ℓ es comparable o menor que ℓ_∞ , entonces la trayectoria libre media entre colisiones es reducida con respecto a ℓ_∞ . Aunado a este efecto de confinamiento, la interacción de los electrones libres con los átomos de la superficie del medio que rodea a la partícula [reacciones de transferencia de carga temporal] causa un desfaseamiento del movimiento colectivo de los electrones afectando a la constante dieléctrica [43–45]. Estudios experimentales y teóricos han hallado que la susceptibilidad correspondiente a los electrones libres de una partícula esférica metálica sigue siendo descrita por el modelo de Drude, pero con un factor de amortiguamiento $\tilde{\gamma}_d$ dependiente del tamaño de la partícula, es decir,

$$\chi_d(\omega, a) = -\frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\tilde{\gamma}_d(a)\omega}, \quad (5.3)$$

donde

$$\tilde{\gamma}_d(a) = \tilde{\gamma}_d + (A_1 + A_2)\frac{v_F}{a} = \tilde{\gamma}_d + A\frac{v_F}{a}. \quad (5.4)$$

Aquí, A_1 y A_2 son factores adimensionales debido a los mencionados efectos de confinamiento y de interacción superficial. El factor $A = A_1 + A_2$ es determinado experimentalmente. Los valores típicos de A son: $A = 0.25$ para el vacío, $A = 0.26$ para el Ne, $A = 0.9$ para el CO, $A = 1.3$ para SiO₂, $A = 1.6$ para el Al₂O₃ y $A = 3.6$ para el Cr₂O₃ [45,46]. Por otro lado, la susceptibilidad interbanda χ_i no es afectada por la reducción del tamaño de la partícula si ésta posee más de aproximadamente 200 átomos [43–45] y esto se cumplirá para los casos que estudiaremos. Con lo antes mencionado, la constante dieléctrica $\epsilon(\omega)$ para una partícula esférica metálica es

$$\epsilon(\omega, a) = 1 + \chi_d(\omega, a) + \chi_i(\omega). \quad (5.5)$$

Mencionamos que la contribución debida a efectos no-locales (la polarización del material en cierto punto \mathbf{r} no sólo depende del campo eléctrico en ese punto sino también en sus punto vecinos) debería ser tomada en cuenta para una representación más exacta de la constante dieléctrica [20]. La inclusión de estos efectos no-locales mostraría resonancias plasmónicas que ocurren a frecuencias mayores que la frecuencia de plasma (ω_p) [20]. Sin embargo, como nuestro estudio sólo abordará frecuencias que están por debajo de dicha frecuencia de plasma, hemos ignorado estas correcciones no-locales.

En la Fig. 5.1 se muestra la constante dieléctrica ϵ de la plata en función de la longitud de onda del espacio libre λ_0 para un medio ilimitado y radios de partículas $a = 5$ nm y 15 nm. Se ha elegido el valor de $A = 0.25$, ya que el dímero estará embebido en el vacío. Las gráficas de la Fig. 5.1 fueron obtenidas de la siguiente manera. La constante dieléctrica de la plata $\epsilon(\omega)$ (medio ilimitado) se obtiene mediante la interpolación de los datos experimentales de la Ref. [47]. Luego, $\chi_i(\omega)$ se calcula a partir de la Ec. (5.1) ya que $\epsilon(\omega)$ y $\chi_d(\omega)$ son conocidos.

Finalmente, la constante dieléctrica de la plata que depende del tamaño es obtenida de las Ecs. (5.3) y (5.4). Como se ve en la Fig. 5.1(a), la parte real de $\epsilon(\lambda_0, a)$ prácticamente no varía con respecto a la del medio ilimitado con la reducción del tamaño de la partícula, por lo contrario la parte imaginaria de $\epsilon(\lambda_0, a)$ [Fig. 5.1(b)] muestra un cambio significativo cuando $\lambda_0 \gtrsim 325$ nm.

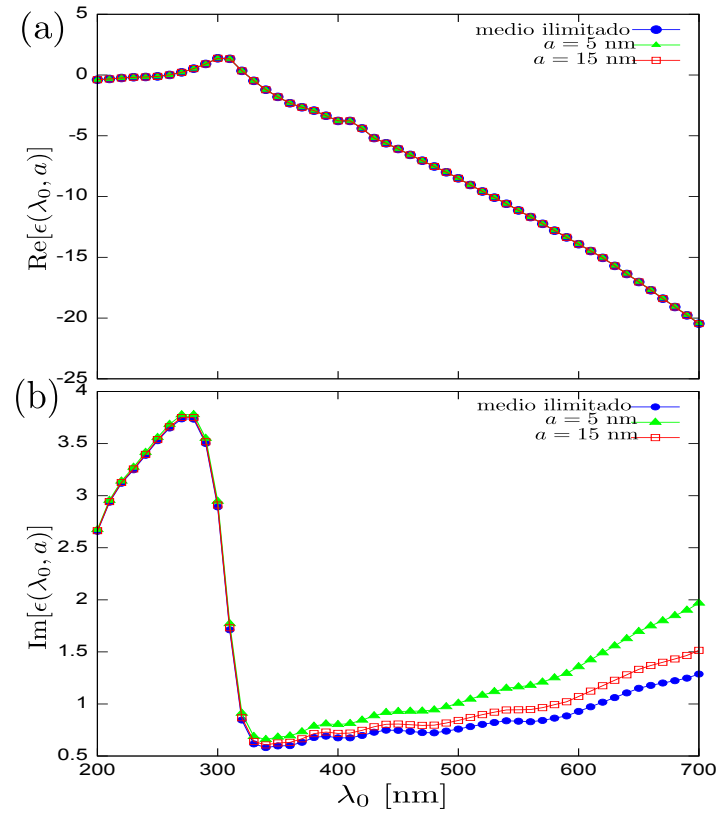


Figura 5.1: Constante dieléctrica de la plata ϵ como una función de la longitud de onda del vacío λ_0 para un medio ilimitado y partículas de radio $a = 5$ nm y 15 nm. (a) $\text{Re}[\epsilon]$. (b) $\text{Im}[\epsilon]$.

5.2. Plasmones de superficie en un dímero

En nanopartículas metálicas, oscilaciones colectivas de electrones libres (plasmones de superficie) pueden ser excitadas con campos electromagnéticos (típicamente con frecuencias dentro y más allá del espectro óptico). La excitación de estas oscilaciones plasmónicas permiten confinar campos ópticos a una escala nanométrica. Las frecuencias de resonancias plasmónicas de un conjunto de nanopartículas metálicas están determinadas por la geometría (forma y distribución espacial de las partículas), propiedades dieléctricas del metal y del medio que rodea a dichas partículas.

El sistema más simple de un *conjunto* de nanopartículas es un dímero (dos nanopartículas esféricas) el cual es objeto de nuestro estudio. A continuación describiremos las características físicas de las resonancias plasmónicas que ocurren en dicha nano-estructura, asimismo explicaremos la manera de excitar sus resonancias.

5.2.1. Metodología para la obtención de los modos

Hibridación plasmónica

Primero exploraremos que es posible determinar las frecuencias de resonancias del dímero si se conocen los modos y frecuencias de resonancia de cada esfera cuando la otra no está presente. Los aspectos esenciales de este efecto pueden ilustrarse si consideramos un sistema análogo mecánico compuesto de un par cuerpos (cada uno tiene masa m) que son atados a resortes con constantes elásticas $k = m\omega_0^2$ (estos resortes están anclados a paredes opuestas), además otro resorte, con constante elástica $k_1 = m\omega_0^2 f^2$ ($f^2 \geq 0$ es un factor adimensional), une ambos cuerpos, tal como se ilustra en la Fig. 5.2(a). Si $f = 0$, entonces $k_1 = 0$, implicando que no hay interacción entre dichos cuerpos y simplemente ellos oscilan de manera independiente con la misma frecuencia ω_0 . Haciendo la analogía con nuestro sistema plasmónico, ω_0 correspondería a la frecuencia plasmónica de una partícula metálica aislada (suponemos por ahora que sólo tiene una frecuencia de resonancia), ver Fig. 5.2(a). Por lo contrario, si $f > 0$, entonces se establece una interacción entre los dos cuerpos. Se encuentra que el desplazamiento de las partículas $\mathbf{x}(t) = [x_1(t), x_2(t)]$ puede ser descrito por la superposición de dos modos $\mathbf{x}_1(t) = \cos(\omega_0 t)[1, 1]$ y $\mathbf{x}_2(t) = \cos(\omega_0 f t)[-1, 1]$, esto es, $\mathbf{x}(t) = A\mathbf{x}_1(t) + B\mathbf{x}_2(t)$ (A y B son constantes). El modo $\mathbf{x}_1(t)$ corresponde al movimiento en el cual las dos masas oscilan en fase, mientras que en el otro modo

$\mathbf{x}_2(t)$, las masas oscilan con una diferencia de fase de π radianes. También se nota, como resultado de la interacción, que la frecuencia de oscilación del modo 2 es más grande que ω_0 . Análogamente con nuestro sistema plasmónico, la interacción entre los electrones libres de cada partícula causa la conformación de dos nuevos modos de oscilación donde los movimientos colectivos de los electrones de ambas partículas están correlacionados; la frecuencia de uno es más grande que ω_0 y la del otro tiene una frecuencia inferior a ω_0 [nuestro modelo masa-resorte no predice esta reducción de frecuencia con respecto a ω_0].

Para ahondar con más características de estas oscilaciones electrónicas, consideremos el modo plasmónico más fundamental de una partícula, es decir, el modo dipolar donde el desplazamiento de la carga ocasiona que los polos opuestos de la partícula presenten un exceso y déficit de carga negativa y por ende esta redistribución de carga genera un dipolo. Como habíamos mencionado, la interacción entre los electrones de las partículas genera dos modos, como se indica en la Fig. 5.2(b). Nótese que la distribución de carga de cada partícula corresponde a la de un dipolo. La diferencia reside en que para el modo 1 los dipolos de las partículas están orientados en el mismo sentido y por consiguiente el momento dipolar total \mathbf{p}_T del dímero asociado a este modo es la suma constructiva de los dipolos de cada partícula, mientras que para el modo 2, por lo contrario, las orientaciones de dichos dipolos están en sentidos opuestos dando como resultado que el momento dipolar total \mathbf{p}_T sea nulo. Como consecuencia de lo anterior, cuando el dímero es excitado con un haz de luz, dicho haz se acopla con el modo 1 más fuerte que con el modo 2 [fuerza de interacción $\mathbf{p}_T \cdot \mathbf{E}$], razón por la cual el modo 1 (2) es denominado modo brillante (oscuro). Por otro lado, ya habíamos dicho que la frecuencia de oscilación ω_1 (ω_2) del modo 1 (2) es menor (mayor) que ω_0 . Este hecho está relacionado con la energía

(electrostática) de la distribución de carga del sistema; la energía correspondiente al modo 1 es menor que la del modo 2.

Hasta este punto, usando una analogía del comportamiento de un sistema masa-resorte, nos ha permitido tener una abstracción simple de la física sobre la formación de las resonancias plasmónicas que ocurren en el dímero, asimismo la descripción de algunas de sus características cualitativas. La formalización de este marco teórico donde las resonancias plasmónicas de un sistema complejo de partículas pueden ser entendidas mediante la interacción de los modos plasmónicos de las partículas individuales que componen dicho sistema se le denomina hibridación plasmónica [48,49]; análoga a la teoría de hibridación, que explica la creación de los orbitales moleculares a partir de los orbitales de los átomos que conforman las correspondientes moléculas. Este formalismo [48,49], para calcular las frecuencias de resonancia plasmónica, asume que los electrones libres del metal son modelados como un fluido incompresible, irrotacional y con carga. A través del análisis de la dinámica de las deformaciones del fluido, se encuentra que el movimiento de dichas deformaciones se reducen a la superposición de un conjunto de osciladores armónicos. Por ejemplo, para una esfera sólida, las frecuencias de dichos osciladores coinciden con las frecuencias de resonancia predichas por la teoría de Mie [48]. Ahora si se consideran dos conjuntos de osciladores correspondientes a cada partícula que describen la dinámica de las deformaciones del fluido de carga. Al interactuar este par de conjuntos (interacción de Coulomb), se forma un sistema de osciladores acoplados, creando la aparición de nuevos modos, tal como lo describimos. En particular este formalismo fue aplicado por Norlander et al. para cuantificar las frecuencias de resonancia plasmónica de un dímero constituido por partículas esféricas [50].

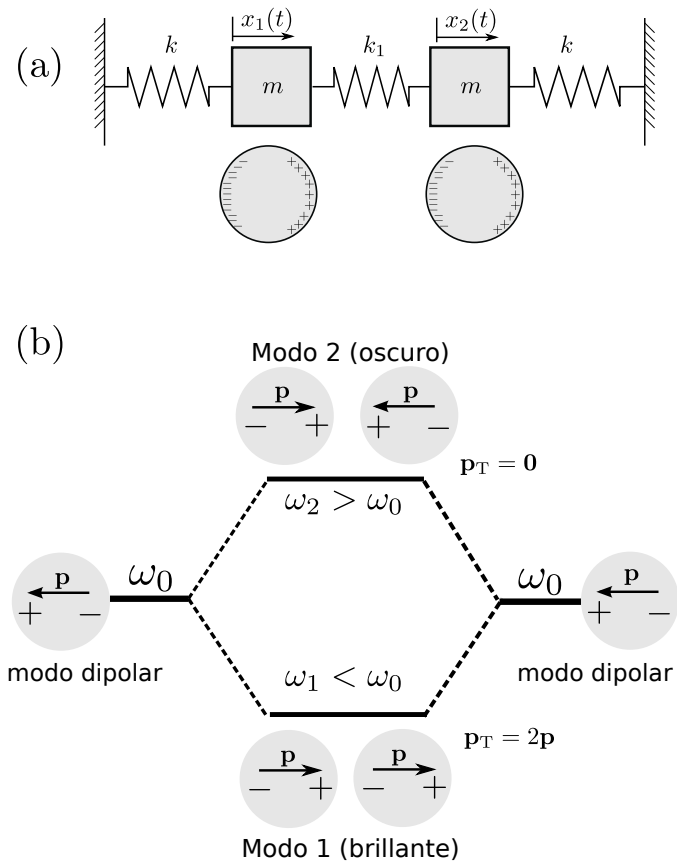


Figura 5.2: (a) Analogía del modelo masa-resorte con la descripción de las resonancias plasmónicas del dímero. (b) Diagrama esquemático de la hibridación plasmónica en una nanoestructura compuesta por dos esferas (ilustra el modo de resonancia elemental, esto es, el modo dipolar.)

Modos bi-esféricos de la ecuación de Laplace

En el sistema de coordenadas bi-esféricas (ξ, η, ϕ) , se requiere la definición de dos focos F_1 y F_2 (el eje z es la línea que pasa por esos puntos y el origen O está ubicado en el punto medio entre F_1 y F_2) para referenciar un punto P arbitrario en el espacio: la coordenada ξ es el ángulo F_1PF_2 , la coordenada η es el logaritmo natural de la razón entre las distancias $\overline{PF_1}$ y $\overline{PF_2}$ y la coordenada ϕ el ángulo entre la proyección de

\overline{OP} sobre el plano xy y el eje x . En este sistema de coordenadas, las superficies donde η es constante describen esferas *no* concéntricas. Como consecuencia de esto último, el sistema de coordenadas bi-esféricas es adecuado para describir la geometría del dímero. Más aún, la ecuación de Laplace es separable en este sistema de coordenadas, por lo tanto, el potencial ψ puede ser expandido por una superposición de modos que satisfacen dicha ecuación, esto es [30, 51]

$$\psi(\xi, \eta, \phi) = \sqrt{\cosh \eta - \cos \xi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \sum_{\sigma\beta} A_{nm}^{(\sigma\beta)} \psi_{nm}^{(\sigma\beta)}(\xi, \eta, \phi), \quad (5.6)$$

donde $\sigma = \pm$, $\beta = e$, o y

$$\psi_{nm}^{(\pm e)}(\xi, \eta, \phi) = e^{\pm(n+1/2)\eta} P_n^m[\cos \xi] \cos(m\phi), \quad (5.7)$$

$$\psi_{nm}^{(\pm o)}(\xi, \eta, \phi) = e^{\pm(n+1/2)\eta} P_n^m[\sin \xi] \sin(m\phi). \quad (5.8)$$

Aquí $A_{nm}^{(\sigma\beta)}$ es un coeficiente que se determina mediante las condiciones de frontera que satisface ψ en la interfaz del dímero con el medio que lo rodea y depende de la forma de la fuente de excitación.

Para encontrar los modos del sistema, se eliminan las fuentes de excitación. Esto conduce a un problema de eigenvalores y eigenvectores (modos). Originalmente Ruppín abordó el estudio de los modos plasmónicos del dímero usando esta metodología [51]. Con la misma metodología, posteriormente, Klimov y Guzatov extendieron el análisis de estos modos [30, 52].

Óptica de transformación (inversión)

El enfoque de la transformación óptica se basa en que los campos electromagnéticos en cualesquiera de dos espacios relacionados mediante una regla de mapeo \mathcal{R} ($\mathbf{r}_A \xleftrightarrow{\mathcal{R}} \mathbf{r}_{A'}$) obedecen la misma forma funcional de las ecuaciones de Maxwell [9].

Como consecuencia de este hecho, la función dieléctrica en un punto $\mathbf{r}_{A'}$ no es igual a ella en el punto de mapeo \mathbf{r}_A [$\epsilon(\mathbf{r}_{A'}) \neq \epsilon(\mathbf{r}_A(\mathbf{r}_{A'}))$], sino que una conexión mucho más compleja entre $\epsilon(\mathbf{r}_A)$ y $\epsilon(\mathbf{r}_{A'})$ se establece [9]; lo mismo aplica para la función magnética y las fuentes.

Recientemente, Pendry et al. aplicaron este enfoque de transformación óptica con la regla del mapeo de inversión para el estudio de las resonancias plasmónicas del dímero [25, 53]: la aproximación *cuasi-estática* de las ecuaciones de Maxwell fue empleada [potencial eléctrico $\Phi(\mathbf{r}_1) \xleftrightarrow{\mathcal{R}} \Phi(\mathbf{r})$, usando la convención establecida anteriormente, \mathbf{r} (\mathbf{r}_1) denota un punto en el espacio original (inversión)]. Para diferenciar entre nuestro tratamiento y el de ellos, nosotros aplicamos la transformación de inversión a la ecuación de Poisson con una fuente dipolar. En cualesquiera de estos tratamientos, uno encuentra que $\Phi(\mathbf{r}_1) \propto |\mathbf{r}_1| \Psi(\mathbf{r}_1)$. Por un lado, dado que la Ref. [25] considera ausencia de cargas, $\Psi(\mathbf{r}_1)$ satisface la ecuación de Laplace [$\nabla_1^2 \Psi(\mathbf{r}_1) = 0$]. Por otro lado, nuestro estudio contiene un dipolo como fuente y por tanto, como demostramos, $\Psi(\mathbf{r}_1)$ se encuentra resolviendo otra ecuación de Poisson en la cual la fuente está conformada por otro dipolo más una carga puntual [Ec. (3.49)] y la función dieléctrica del entorno vista por $\Psi(\mathbf{r}_1)$ es simplemente $\epsilon(\mathbf{r}_1) = \epsilon(\mathbf{r}(\mathbf{r}_1))$. Por lo tanto, nosotros nos enfocamos en $\Psi(\mathbf{r}_1)$ en lugar de $\Phi(\mathbf{r}_1)$ y por ende derivamos las condiciones de frontera que $\Psi(\mathbf{r}_1)$ satisface en la interfaz. Nuestro trabajo puede ser considerado como una extensión del estudio [24] donde una metodología similar fue aplicada para obtener el potencial creado por una carga puntual. Recientemente otro estudio nuestro ha sido también encaminado a encontrar el potencial creado por un dipolo en la cercanía de un dímero mediante el método de inversión [54] el cual podría usarse para encontrar los modos dicha nano-estructura si las fuentes de excitación son eliminadas. Por consiguiente, nuestro formalismo teórico presentado

en [54] provee una forma alternativa de hallar los modos plasmónicos del dímero por medio de la transformación de inversión.

5.2.2. Características de los modos

Para ilustrar las características de los modos, consideraremos que las nano-esferas tienen el mismo radio, esto es, $\bar{R} = R_1 = R_2$; además, ambas nanopartículas poseen la misma constante dieléctrica ($\epsilon = \epsilon_1 = \epsilon_2$).

Como mencionamos anteriormente, para obtener los modos plasmónicos en el dímero, se debe resolver un problema de eigenvectores donde ϵ/ϵ_m es el eigenvalor a hallar. Por consiguiente, las frecuencias de resonancia de los modos dependen del material específico del dímero y del medio que rodea al dímero. De aquí en adelante supondremos que las nano-esferas están inmersas en vacío, es decir, $\epsilon_m = 1$. Los eigenvectores y eigenvalores dependen del factor d/\bar{R} [30], recordando que d es la distancia entre los centros de las esferas. Es importante mencionar que el número azimutal m de la Ec. (4.20) se conserva bajo la transformación de inversión y este número determina una familia de soluciones de los eigenvectores y eigenvalores. Para el dímero compuesto de partículas de igual dimensión, los modos pueden clasificarse en tres tipos [30,52,55], denominados "a", "s" y "c" (más adelante describiremos sus propiedades). Por lo tanto, el potencial de cada modo se denota como $\Phi_{ms}^{(i)}(\mathbf{r})$ donde $i = a, s, c$, $m = 0, 1, 2, \dots$ (número azimutal) es la familia, y $s = 1, 2, 3, \dots$ indexa a los distintos modos de cada familia.

Para describir las propiedades de los modos consideramos los casos: (1) $\bar{R} = 15$ nm y $d = 36$ nm, y (2) $\bar{R} = 15$ nm y $d = 32$ nm. Más aún, nos restringimos a la familia de modos $m = 0$. Para estos casos la Fig. 5.3 muestra las curvas de contorno del potencial $\Phi_{01}^{(i)}(\mathbf{r})$ [$i = a, s, c$ y $\mathbf{r} \in$ plano xz], es decir, el potencial de los

modos plasmónicos de orden más bajo de cada uno de los distintos tipos de la familia $m = 0$. Estos fueron obtenidos mediante el método de transformación de inversión (omitiendo fuentes de excitación) [54] donde los eigenvalores $\epsilon [\epsilon_m = 1]$ y eigenmodos (coeficientes \bar{A}_l , \bar{B}_l , \bar{C}_l y \bar{D}_l de las expansiones multipolares¹ $l = 0, \dots, l_{\max}$) fueron provistos por J. R. Zurita-Sánchez (comunicación privada, marzo del 2014). Para efectos de comparación de los diferentes modos $\Phi_{01}^{(i)}(\mathbf{r})$ ($i = a, s, c$), cada uno de ellos ha sido normalizado de tal manera que $\text{Max}[\Phi_{01}^{(i)}(\mathbf{r})] = 5$ u (u denota unidades arbitrarias).

Las figuras 5.3(a) y (A) muestran la estructura espacial de los modos $\Phi_{01}^{(a)}(\mathbf{r})$ [$\mathbf{r} \in \text{plano } xz$] para $d = 36$ nm y 32 nm, respectivamente. Nótese que el potencial $\Phi_{01}^{(a)}(\mathbf{r})$ es antisimétrico con respecto al plano que es paralelo al plano xy e intersecta al eje z en el punto medio entre la distancia del espacio vacío que separa a ambas esferas. De aquí en adelante, este plano es denominado *plano de simetría modal*. Cuando $d = 36$ nm, la eigen-constante dieléctrica correspondiente al modo $\Phi_{01}^{(a)}(\mathbf{r})$ es $\epsilon_{01}^{(a)} = -2.7487$. Disminuyendo la separación entre las esferas a $d = 32$ nm, la eigen-constante dieléctrica del modo $\Phi_{01}^{(a)}(\mathbf{r})$ decrece a $\epsilon_{01}^{(a)} = -3.9732$. Lo anterior, considerando la respuesta dieléctrica del metal con el modelo de plasma, implica que la frecuencia del modo $\Phi_{01}^{(a)}(\mathbf{r})$ se recorra hacia el rojo conforme la separación entre las esferas se va reduciendo.

¹ $\Phi_{01}^{(i)}(\mathbf{r})$ ($i = a, s, c$) es obtenido usando las expansiones multipolares de las Ecs. (4.56)-(4.58) haciendo los reemplazos $\tilde{A}_l^{(1)} \rightarrow \bar{A}_l$, $\tilde{B}_l^{(1)} \rightarrow \bar{B}_l$, $\tilde{C}_l^{(1)} \rightarrow \bar{C}_l$ y $\tilde{D}_l^{(1)} \rightarrow \bar{D}_l$, $\tilde{A}_l^{(2)} = \tilde{B}_l^{(2)} = \tilde{C}_l^{(2)} = \tilde{D}_l^{(2)} = 0$ y $\bar{\sigma}_1(4\pi\epsilon_0\epsilon_m)^{-1} \rightarrow K$ (K es una constante arbitraria) y $\Psi_{0d}^{(1)} = \Psi_{0d}^{(2)} = 0$.

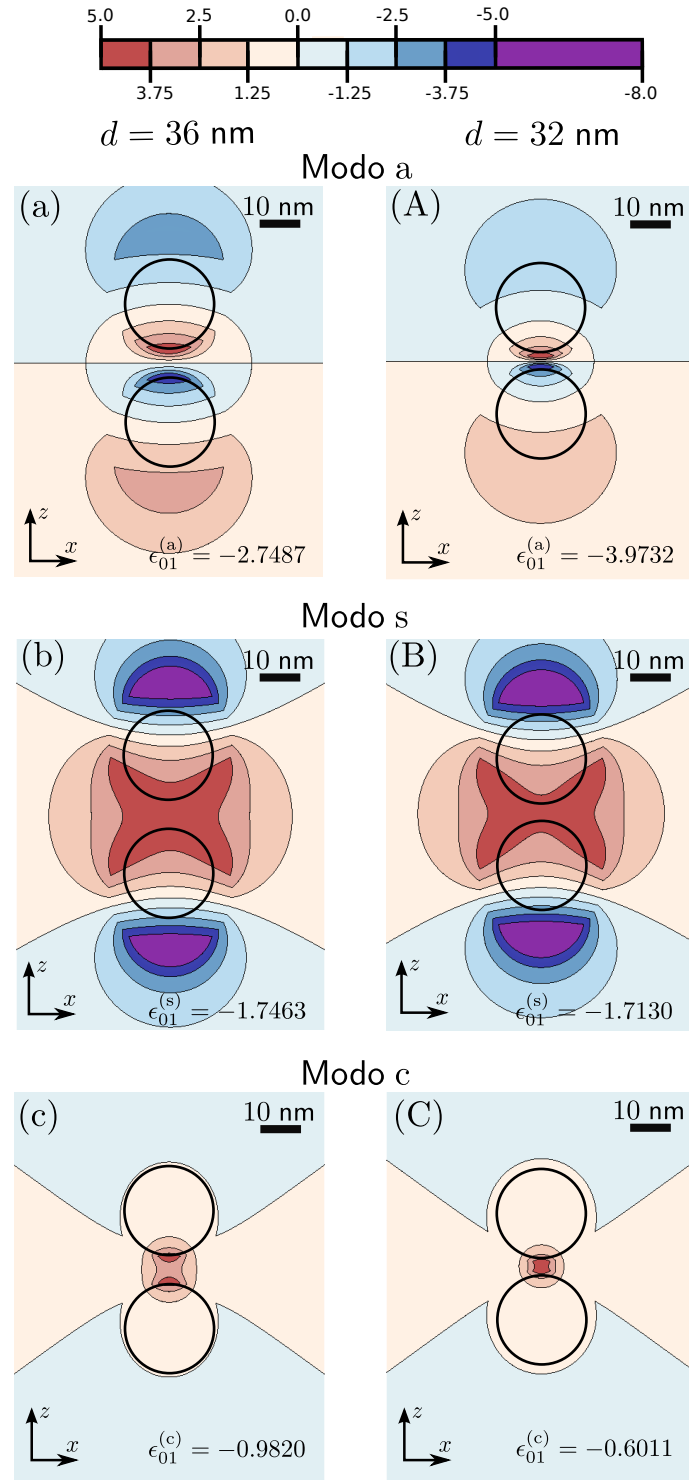


Figura 5.3: Distribución espacial del potencial de los modos plasmónicos para un dímero con nano-esferas iguales (radio $\bar{R} = 15 \text{ nm}$). Para $d = 36 \text{ nm}$: (a) $\Phi_{01}^{(a)}(\mathbf{r})$, (b) $\Phi_{01}^{(s)}(\mathbf{r})$ y (c) $\Phi_{01}^{(c)}(\mathbf{r})$. Para $d = 32 \text{ nm}$: (A) $\Phi_{01}^{(a)}(\mathbf{r})$, (B) $\Phi_{01}^{(s)}(\mathbf{r})$ y (C) $\Phi_{01}^{(c)}(\mathbf{r})$. Aquí $\mathbf{r} \in$ plano xz .

De la Fig. 5.3(a) se observa que el área alrededor del polo inferior (superior) de la nano-esfera superior (inferior) es donde se localiza la región de más alto (bajo) potencial. Cuando nos alejamos hacia arriba (abajo) de esta zona de alto (bajo) potencial, el potencial decrece (aumenta) hasta alcanzar un mínimo (máximo) relativo del potencial con magnitud moderada en la parte superior (inferior) cercana al plano superior (inferior). Al reducir la separación entre los centros de las esferas [Fig. 5.3(A)], el mismo comportamiento del potencial descrito para la Fig. 5.3(a) es observado, pero a diferencia del caso anterior, las líneas de contorno se contraen más hacia el plano de simetría modal. Consiguientemente, el área de las regiones de más alto y de más bajo potencial se ven disminuidas y por ende estas regiones están más localizadas en la zona alrededor de los polos adyacentes.

Contrario al modo $\Phi_{01}^{(a)}(\mathbf{r})$, el potencial $\Phi_{01}^{(s)}(\mathbf{r})$ del modo "s" es simétrico respecto al plano de simetría modal, tal como se ilustra en las Figs. 5.3(b) y (B). La Fig. 5.3(b) muestra el modo $\Phi_{01}^{(s)}(\mathbf{r})$ [$\mathbf{r} \in \text{plano } xz$] para $d = 36$ nm, donde se observa que el área de la región de más alto potencial comprende los alrededores de la parte inferior de la esfera de arriba y de la parte superior de la esfera de abajo, mientras que las zonas de más bajo potencial se sitúan en la cercanía de los polos exteriores del dímero [polo norte (sur) de la esfera superior (inferior)]. Cuando se disminuye la separación a $d = 32$ nm [véase Fig. 5.3(B)], en comparación al caso $d = 32$ nm, notamos que las líneas de contorno de $\Phi_{01}^{(s)}(\mathbf{r})$ no sufren una distorsión significativa, salvo los bordes inferior y superior de la línea de contorno $\Phi_{01}^{(a)}(\mathbf{r}) = 3.75$ u que delimita la región de alto potencial y el borde inferior (superior) de la región superior (inferior) circunscrita por las líneas de contorno $\Phi_{01}^{(s)}(\mathbf{r}) = -3.75$ u y -5 u donde dichos bordes se contraen hacia el plano de simetría modal. Por otro lado, para el caso $d = 36$ nm ($d = 32$ nm) la eigen-constante dieléctrica que caracteriza al modo correspondiente es de

$\epsilon_{01}^{(s)} = -1.7463$ ($\epsilon_{01}^{(s)} = -1.7130$). En consecuencia un incremento ocurrió en la eigen-constante dieléctrica al disminuir la separación entre las esferas lo cual indica que la frecuencia de oscilación del modo $\Phi_{01}^{(s)}(\mathbf{r})$, si consideramos el mencionado modelo de plasma para describir la respuesta dieléctrica del metal, se recorre ligeramente hacia el azul a medida que la separación entre las esferas disminuye.

Por último, las gráficas de contorno del modo $\Phi_{01}^{(c)}(\mathbf{r})$ ($\mathbf{r} \in$ plano xz) están dibujadas en las Figs. 5.3(c) y (C). Al igual que el modo "s", el potencial $\Phi_{01}^{(c)}(\mathbf{r})$ es simétrico respecto al plano de simetría modal. A diferencia de los otros dos tipos de modos, independientemente de la separación $d = 36$ nm o $d = 32$ nm [Figs. 5.3(c) y (C), respectivamente], el área de más alto potencial (delimitado por la línea de contorno $\Phi_{01}^{(c)}(\mathbf{r}) = 3.75$ u) está enteramente concentrada en el espacio vacío entre las superficies adyacentes de las nano-esferas. Además, apreciamos que en casi toda la región dentro de las nano-esferas, el potencial $\Phi_{01}^{(a)}(\mathbf{r})$ interno posee valores de tan solo entre 0 u y 1.25 u; en la restante región interna situada en la vecindad de los polos adyacentes de las esferas, el valor del potencial $\Phi_{01}^{(c)}(\mathbf{r})$ interno es mayor que 2.5 u, pero sin exceder a 3.75 u. Por lo tanto, la variación espacial del potencial $\Phi_{01}^{(c)}(\mathbf{r})$ interno de las nano-esferas es mucho más lenta que la de los otros modos. Por otro lado, cuando $d = 36$ nm ($d = 32$ nm) la eigen-constante dieléctrica es de $\epsilon_{01}^{(c)} = -0.9820$ ($\epsilon_{01}^{(c)} = -0.6011$). Esto último indica que la eigen-constante dieléctrica aumenta conforme la separación entre las esferas decrece y ésta tiende a cero conforme $d \rightarrow 2\bar{R}$ [30]. Esto implica que, asumiendo la descripción del metal ideal, la frecuencia de oscilación de este modo se recorre hacia el azul a medida que d disminuye y ésta tiende a la de plasma (ω_p) cuando $d \rightarrow 2\bar{R}$. Es sabido que a la frecuencia de plasma ω_p , se excitan plasmones volumétricos [56].

5.2.3. Excitación de las resonancias plasmónicas

Como habíamos mencionado, la interacción de campos electromagnéticos externos con un conjunto de nano-partículas metálicas posibilita la excitación de sus resonancias plasmónicas. La distribución espacial de carga inherente al modo propio determina cuales son las características del haz (frecuencia, polarización y estructura espacial) o de la fuente (frecuencia, localización y estructura de la corriente) necesarias para excitar dicho modo. Para ejemplificar lo anterior, discutiremos sobre la excitación de los modos plasmónicos de un dímero, en particular de los modos $\Phi_{01}^{(i)}(\mathbf{r})$ ($i = a, s, c$) vistos en la sección 5.2.2.

La densidad de carga superficial ρ_s en las interfaces de las nano-esferas está dada por:

$$\rho_s(\mathbf{b}_j) = \varepsilon_0 \left(\frac{\epsilon_j - \epsilon_0}{\epsilon_j} \right) E_{N0}(\mathbf{b}_j), \quad j = 1, 2, \quad (5.9)$$

donde $E_{N0}(\mathbf{b}_j)$ es la componente del campo eléctrico en el medio ϵ_0 que es normal a la superficie S_j en el punto \mathbf{b}_j . Las deformaciones pequeñas del fluido de electrones se manifiestan en una densidad volumétrica de carga diferente de cero que aparece alrededor de la superficie de las nano-partículas. Y en el límite cuando las deformaciones tienden a ser infinitesimales, la mencionada densidad de carga puede ser considerada que está localizada en la superficie [48].

En la Fig. 5.4 se muestra la distribución de la carga superficial del dímero para los modos plasmónicos $\Phi_{01}^{(i)}$ ($i = a, s, c$) cuando $\bar{R} = 15$ nm y $d = 36$ nm. A continuación se describe como interpretar las gráficas de la Fig. 5.4. Los círculos con líneas discontinuas indican los puntos de las esferas S_1 y S_2 sobre el plano xz . Luego se traza una línea radial que pase por cualquier centro de S_1 o S_2 . La distancia entre los puntos de intersección de esta línea radial con la curva continua y con el círculo

discontinuo es proporcional a la magnitud de la densidad de carga superficial ρ_s en el punto correspondiente de S_j ($j = 1, 2$). Si el punto de intersección de la curva continua se localiza en el interior (exterior) del círculo S_j ($j = 1, 2$), entonces la densidad de carga ρ_s es negativa (positiva). Hemos calculado la carga Q_j sobre la superficie S_j ($j = 1, 2$) del dímero de los casos de la Fig. 5.4, esto es

$$Q_j = \int_{S_j} \rho_s(\mathbf{b}_j) ds,$$

obteniendo $Q_j = 0$ para cualquiera de estos casos. Verificando así la neutralidad de la carga de la nanoestructura.

Para poder excitar los modos plasmónicos $\Phi_{01}^{(i)}$ ($i = a, s, c$), se requiere una configuración específica del campo eléctrico externo que pueda inducir la distribución de carga superficial ρ_s mostrada en la Fig. 5.4.

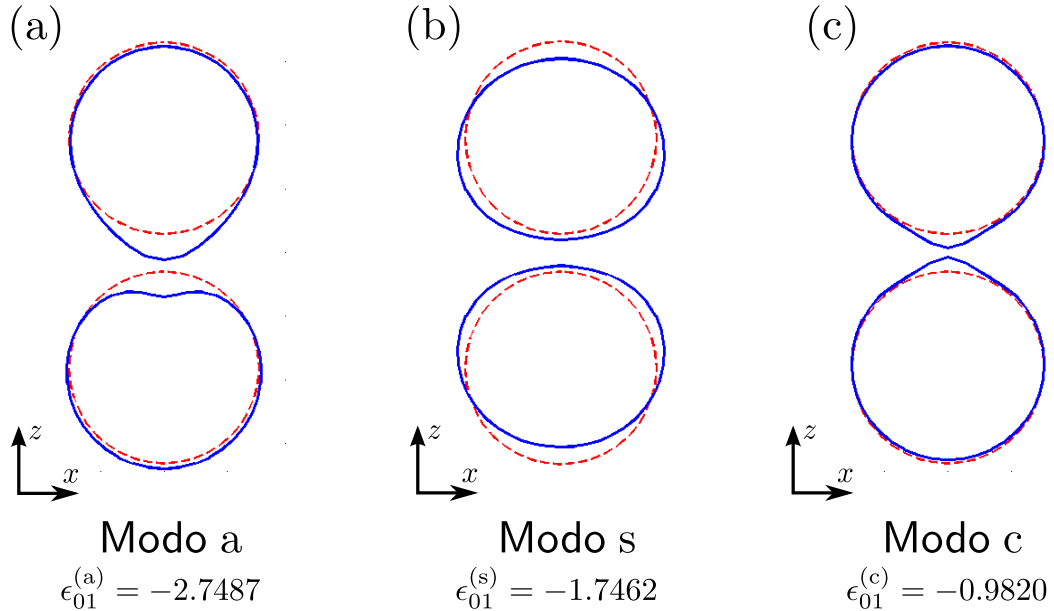


Figura 5.4: Distribución de la carga superficial ρ_s de los modos plasmónicos de orden más bajo ($s = 1$) de la familia $m = 0$ en las interfaces del dímero para $\bar{R} = 15$ nm y $d = 36$ nm. (a) "a", (b) "b" y (c) modo "c". Línea roja discontinua: superficie del dímero. Curva azul continua: ρ_s .

Si una onda plana cuya polarización del campo eléctrico está orientada a lo largo del eje axial (dirección- z) incide sobre el dímero, entonces esta onda desplazaría los electrones de ambas nano-esferas en el sentido contrario de la polarización y por consiguiente la parte superior de cada nano-esfera acumularía carga del mismo signo y su parte inferior concentraría carga con polaridad opuesta. Considerando lo anterior y la comparación de $\rho_s(\mathbf{b}_j)$ de los modos $\Phi_{01}^{(i)}(\mathbf{r})$ ($i = a, s, c$), observamos que la mencionada onda plana solo podría inducir la distribución de carga de $\Phi_{01}^{(a)}(\mathbf{r})$ [Fig. 5.4(a)]. Por lo tanto, dicha onda plana podría, de los tres modos $\Phi_{01}^{(i)}$ ($i = a, s, c$), excitar únicamente al modo $\Phi_{01}^{(a)}(\mathbf{r})$. Con respecto a los modos $\Phi_{01}^{(s)}(\mathbf{r})$ y $\Phi_{01}^{(c)}(\mathbf{r})$, podríamos considerar otras ondas planas con diversas polarizaciones y no hallaríamos una que pudiera inducir una distribución de carga similar a la correspondiente a estos modos [véase Figs. 5.4(b) y (c)]. Dado que en experimentos sobre excitación de plasmones en nano-partículas usan típicamente ondas planas, los modos $\Phi_{01}^{(s)}(\mathbf{r})$ y $\Phi_{01}^{(c)}(\mathbf{r})$ son llamados oscuros porque no es posible excitarlos con dicha forma de campo externo, mientras que lo opuesto sucede para el modo $\Phi_{01}^{(a)}(\mathbf{r})$ y por eso se le nombra brillante. Esto había sido mencionado brevemente en la sección 5.2.1.

Ahora consideramos una fuente de excitación dipolar localizada en el eje axial, digamos entre las nano-esferas, y momento orientado a lo largo de ese eje. Dado que este dipolo está constituido por una carga positiva y otra negativa separados entre sí, la carga positiva (negativa) de éste atraería (alejaría) a los electrones libres de la nano-esfera que está más cerca a la carga en cuestión. Entonces de acuerdo a la Fig. 5.4, el dipolo axial descrito sólo podría inducir la distribución de carga superficial ρ_s como la ilustrada en la Fig. 5.4(a) y por ende la excitación del modo $\Phi_{01}^{(a)}(\mathbf{r})$ sería factible mediante esta fuente de excitación particular. Como una nota suplementaria, desde un punto de vista realista, un átomo o molécula excitada se

comporta en esencia como un dipolo. Por otro lado, si quisiéramos excitar los modos $\Phi_{01}^{(s)}(\mathbf{r})$ y $\Phi_{01}^{(c)}(\mathbf{r})$, fuentes conformadas por configuraciones más complejas de carga se necesitaría. Por ejemplo, un cuadrupolo lineal constituido por dos dipolos axiales invertidos y de igual magnitud induciría presumiblemente una distribución de carga similar a la de la Figs. 5.4(b) y (c).

5.3. Resultados

En esta parte aplicaremos nuestro formalismo teórico para obtener el campo generado por un dipolo oscilante y examinaremos la excitación de las resonancias plasmónicas de esta nanoestructura mediante el dipolo.

La configuración a analizar se describe a continuación. El dipolo está localizado en $\mathbf{r}_0 = z_d \mathbf{n}_z$ (afuera de las nano-esferas y en el eje longitudinal del dímero), posee un momento dipolar $\mathbf{p} = -p \mathbf{n}_z$ ($p > 0$) y oscila con una frecuencia angular $\omega_0 = 2\pi c/\lambda_0$ (donde λ_0 es la longitud de onda en el espacio libre). Asumimos un dímero constituido por nano-esferas metálicas de *plata* y de igual tamaño (radio $\bar{R} = R_1 = R_2$) donde el medio que las rodea es vacío ($\epsilon_m = 1$). Recapitulando la sección 5.1, la función dieléctrica ϵ de la nano-esfera de plata es dependiente de su tamaño y ésta modela realistamente la respuesta dieléctrica del dímero.

Con los parámetros geométricos y dieléctricos de la configuración descrita, los coeficientes $[\tilde{A}_l^{(\alpha)}, \tilde{B}_l^{(\alpha)}, \tilde{C}_l^{(\alpha)}, \tilde{D}_l^{(\alpha)}; \alpha = 1, 2 \text{ y } l = 0 \dots l_{\max}]$ de las expansiones multipolares [Ecs. (4.56)-(4.58)] son obtenidos resolviendo numéricamente el sistema lineal sobredeterminado [Ec. (4.73)]. Ya conocidos estos coeficientes, el potencial $\Phi_\beta(r, \theta)$ [Ec. 4.76] o el campo eléctrico $\mathbf{E}_\beta(\mathbf{r})$ [Ec. (4.77)] ($\beta = 0, 1, 2$) queda determinado. Se ha verificado la convergencia de las series multipolares del potencial asimismo el cumplimiento de las condiciones de frontera de $\Phi_\beta(r, \theta)$ en las superficies de las

nano-esferas [Ec. (4.28) y (4.30)].

En lo que resta del capítulo, el campo eléctrico esparcido $\mathbf{E}_s(\mathbf{r})$ se entiende como aquél que surge únicamente de la redistribución de la carga dentro de las nano-esferas: si \mathbf{r} está fuera del dímero, $\mathbf{E}_s(\mathbf{r})$ se obtiene sólo de $\Psi_{0s}^{(\alpha)}(\mathbf{r}_3)$ [Ec. (4.23); ($\alpha = 1, 2$)] (se ha omitido la distribución directa $\Psi_{0d}^{(\alpha)}(\mathbf{r}_3)$ [Ecs. (4.24) y (4.25)]); cuando \mathbf{r} está dentro de S_j , $\mathbf{E}_s(\mathbf{r})$ emana de $\Psi_j^{(\alpha)}(\mathbf{r}_3)$ [$j = 1, 2$; Ec. (4.26) y (4.27)].

En la sección 5.2.3 mostramos que un dipolo teniendo la ubicación y la polarización descritas podría excitar el modo $\Phi_{01}^{(a)}$. En particular analizaremos si es verdaderamente posible la excitación de este modo por medio de dicho dipolo cuando un modelo realista (inclusión de pérdidas) de la respuesta dieléctrica de las nano-esferas metálicas es considerado. Además, se examina la dependencia del campo eléctrico esparcido $\mathbf{E}_s(\mathbf{r})$ con el tamaño y separación de las partículas, y la ubicación axial del dipolo. También, se estudia la excitación de un modo antisimétrico de orden superior.

5.3.1. Dipolo en el plano de simetría modal

Asumimos que el dipolo está situado en el punto medio entre la distancia que separa las superficies de ambas nano-esferas, es decir, la intersección del eje z con el plano de simetría modal. Si $\bar{R} = R_1 = R_2$, entonces la coordenada axial del dipolo es $z_d = R_0 = (\sqrt{d^2 - 4\bar{R}^2})/2$ (respecto al centro de inversión).

Primero consideramos un radio $\bar{R} = 15$ nm y una separación entre los centros de las nanopartículas $d = 36$ nm. En este caso, la frecuencia de oscilación del dipolo es $2\pi c/\omega_0 = 375.71$ nm para la cual la función dieléctrica es $\epsilon(\omega_0) = -2.7487 + 0.70i$. Nótese que la parte real de $\epsilon(\omega_0)$ coincide con la eigen-constante $\epsilon_{01}^{(a)}$, por lo tanto, se pretende excitar al modo plasmónico "a". La Fig. 5.5(a) muestra la intensidad del campo esparcido $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ para la configuración descrita donde $\mathbf{r} \in$ plano xz .

Se observa que $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ es más intenso en la región que está alrededor de los polos adyacentes de las nano-esferas. Además, se aprecia que el campo interno de las nano-esferas exhibe variaciones espaciales a una escala menor que $2\bar{R}$. Ahora examinamos la situación donde mantenemos el mismo tamaño de las nano-esferas ($\bar{R} = 15$ nm), pero reducimos la distancia entre las esferas a $d = 32$ nm. Como consecuencia de esto y con la finalidad de que $\text{Re}[\epsilon(\omega_0)] = \epsilon_{01}^{(\alpha)}$, la frecuencia de oscilación del dipolo cambia a $2\pi c/\omega_0 = 415.46$ nm, implicando que la función dieléctrica de la plata sea $\epsilon(\omega_0) = -3.9732 + 0.73i$. Con respecto al caso anterior, la frecuencia ω_0 se ha recorrido al rojo tal como lo habíamos dicho en la sección anterior. La Fig. 5.5(b) exhibe la distribución de intensidad del campo esparcido $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ debido a la presencia del dipolo en el escenario apenas mencionado. Al igual que en el caso $d = 36$ nm [Fig. 5.5(a)], la región de más alta intensidad ocupa una área de unos 6 nm² en el espacio vacío entre las nano-esferas. Sin embargo, para $d = 32$ nm, la intensidad en esta área ha aumentado casi 2.5 órdenes de magnitud con respecto al caso que tiene una separación entre esferas más grande. Este efecto se debe a que, al disminuir la separación d , la interacción coulombica se hace mas fuerte y la magnitud del campo de excitación del dipolo que interacciona con las nano-partículas crece.

A continuación haremos la comparación de las distribuciones de intensidad $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ generados por el dipolo con las de intensidad del campo eléctrico del modo ideal $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$. Para esto, hemos normalizado $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ de tal manera que $\text{Max}[|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2] = \text{Max}[|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2]$. La intensidad de $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ para $d = 36$ nm se ilustra en la Fig. 5.5(A) ($\mathbf{r} \in$ plano xz). Se distingue que el patrón de intensidad del modo plasmónico ideal es muy diferente al correspondiente que es generado por el dipolo [compárese Figs. 5.5(a) y (A)]. Lo anterior es originado por las pérdidas óhmicas del material ($\text{Im}[\epsilon(\omega_0)] \neq 0$) que ocasiona que las oscilaciones de los electrones no sean perfectamente coherentes.

Además, la intensidad del campo $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$, exceptuando la zona donde casi contactan las nano-esferas, es mucho más intenso que su contraparte $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$: por ejemplo, en el caso ideal, la primera curva de contorno que rodea completamente el dímero es $n = -5.75$, mientras que con excitación dipolar, la primera curva de contorno circundante es $n = -7.25$ (1.5 órdenes de magnitud de diferencia). Otra desemejanza radica en que el área que abarca la región de alta intensidad $n \geq -4.25$ (alrededor de los casquetes polares adyacentes) es más extensa para la Fig. 5.5(A) [ideal] que para la Fig. 5.5(a) [dipolo]. Cambiamos ahora la separación entre dos nano-esferas a $d = 32$ nm. Para esta separación, la intensidad del campo ideal $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ está dibujada en la Fig. 5.5(B). Al comparar las Figs. 5.5(b) y (B), se observa, al igual para el caso $d = 36$ nm, que en los alrededores del dímero la intensidad de campo $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ es mucho más intensa que la intensidad de esparcimiento $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ creada por el dipolo; excluyendo la región delimitada por $n = -2.75$ (situada entre las nano-esferas) donde la intensidad es máxima y de orden similar para ambos casos, pero ésta tiene más extensión para el caso ideal que para el otro. Como diferencia con respecto al caso $d = 36$ nm, la forma de los lóbulos externos de $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ es similar al de $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$. Esto implica que, para $d = 32$ nm, el campo generado por el dipolo $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ tiene más semejanza con el caso ideal. Dado que $\text{Im}[\epsilon(\omega_0)]$ es casi igual para ambos casos ($d = 36$ nm y $d = 32$ nm), este último efecto se podría atribuir a que la disminución de la separación entre las esferas, como lo vimos, produce un acoplamiento más fuerte entre los electrones de las nanopartículas y esto causaría que las oscilaciones electrónicas sufrieran menos decoherencia.

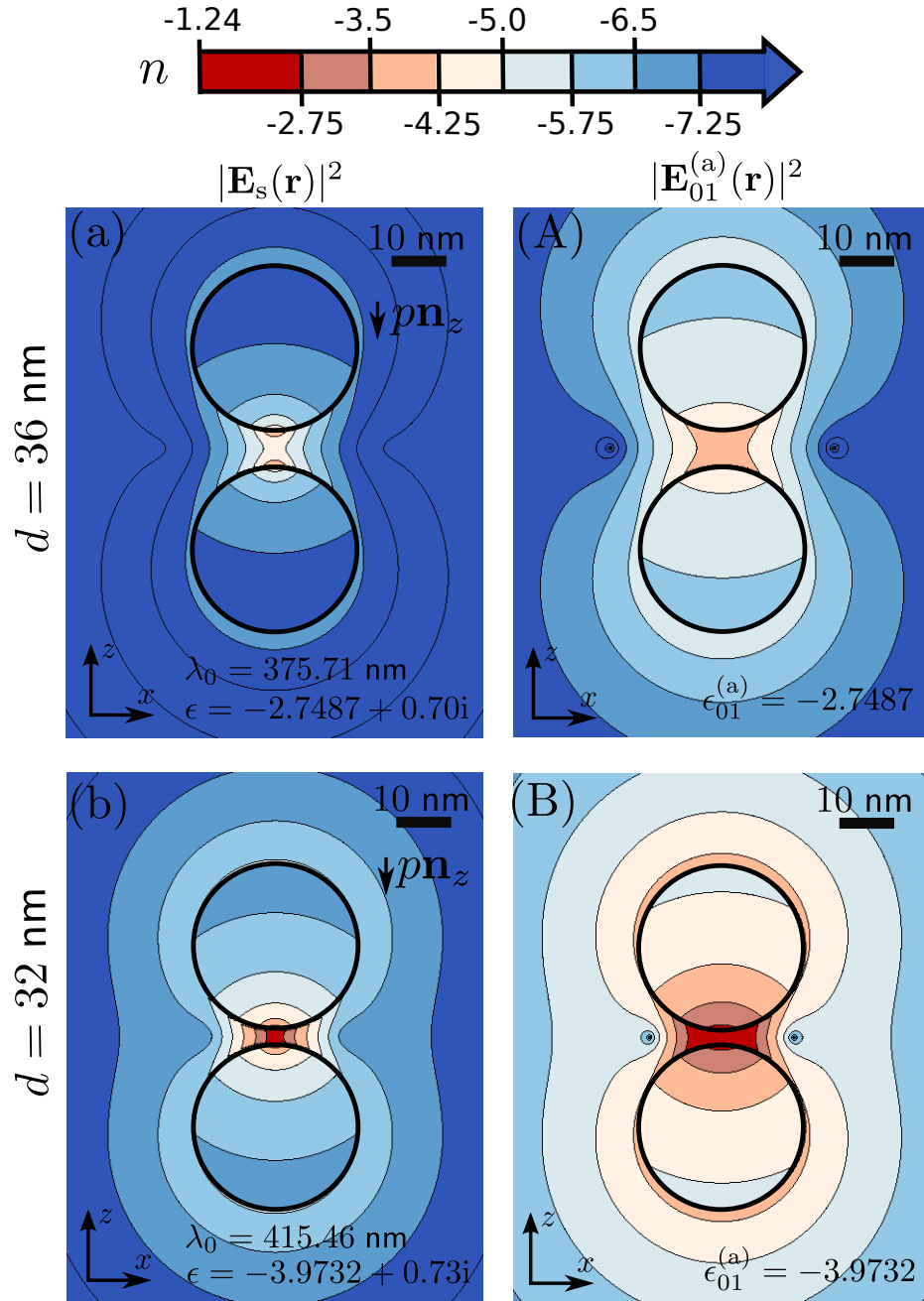


Figura 5.5: Intensidad del campo eléctrico esparcido ($|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2 = A^2 \times 10^n$) creada por un dipolo con momento dipolar $\mathbf{p} = -p\mathbf{n}_z$ localizado en $\mathbf{r}_0 = R_0\mathbf{n}_z$ (plano de simetría modal): (a) $d = 36$ nm y $R_0 = 9.95$ nm; (b) $d = 32$ nm y $R_0 = 5.57$ nm. Intensidad del campo eléctrico del modo $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$: (A) $d = 36$ nm y (B) $d = 32$ nm. Aquí, $\bar{R} = 15$ nm, $A = 1.81[p/1.6 \times 10^{-29} \text{ Cm}] \text{ V/nm}$ (hemos asumido como referencia un dipolo atómico donde la carga del electrón e está separada 1 \AA) y $\mathbf{r} \in$ plano xz .

Ahora reducimos el tamaño de ambas nano-esferas del dímero a un radio $\bar{R} = 5$ nm. Iniciamos con el caso donde la separación entre nanopartículas es $d = 12$ nm y el dipolo oscila con una frecuencia angular $2\pi c/\omega_0 = 375.76$ nm. La función dieléctrica de la plata a esa frecuencia es $\epsilon(\omega_0) = -2.7487 + 0.77i$. Nótese que $\text{Re}[\epsilon(\omega_0)] = \epsilon_{01}^{(a)}$ y esta eigen-constante es la misma del dímero con $\bar{R} = 15$ nm y $d = 36$ nm porque en ambas configuraciones la razón d/\bar{R} se mantiene inalterada. Sin embargo, notamos que, para estos casos de $\bar{R} = 15$ nm y 5 nm, las frecuencias angulares ω_0 para las cuales la parte real de la función dieléctrica es igual a $\epsilon_{01}^{(a)}$ son distintas, aunado a que $\text{Im}[\epsilon(\omega_0)]$ es ligeramente más grande para la partícula de menor tamaño. Esto se origina por la dependencia de las propiedades dieléctricas de las nano-esferas con su escalamiento [Ec. (5.5)]. Regresando al caso inicial ($\bar{R} = 5$ nm y $d = 12$ nm), la Fig. 5.6(a) ilustra la intensidad del campo esparcido $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})^2|$. Para efectos de comparación con las gráficas anteriores hemos mantenido la misma barra de intensidad. Al comparar las Fig. 5.6(a) y Fig. 5.5(a), a pesar de que ambas nano-estructuras poseen el mismo factor geométrico d/\bar{R} , la intensidad del campo esparcido $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})^2|$ en la zona que comprende los alrededores de los polos adyacentes de las nano-esferas es de al menos 1.5 órdenes de magnitud más grande para el dímero con partículas de menor tamaño, asimismo la intensidad de campo es más grande en las regiones restantes. Este aumento de la intensidad podría ser adjudicado conjuntamente al incremento de la magnitud del campo externo de excitación debido a que el dipolo está más cerca de las nano-esferas y al posible incremento de la densidad de carga superficial ρ_s inducida debido a la disminución de la curvatura de la nano-partícula (efecto de pararrayos) [57]. También notamos que en los dímeros de las Figs. 5.6(a) y 5.5(b), la separación entre las superficies de las nano-esferas es la misma ($d - 2\bar{R} = 2$ nm). A pesar de que el dímero de la Fig. 5.5(b) tiene un tamaño más grande que el

de la Fig. 5.6(a), la intensidad máxima de $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ es ligeramente superior para el dímero que tiene partículas de menor tamaño. La causa de esto lo podríamos atribuir al mencionado efecto pararrayos. Como siguiente caso, la separación entre las esferas aumenta a $d = 18$ nm; la frecuencia de oscilación del dipolo es $2\pi c/\omega_0 = 356.44$ nm donde la función dieléctrica evaluada en esa frecuencia es $\epsilon(\omega_0) = -2.1404 + 0.69i$ (nuevamente $\text{Re}[\epsilon(\omega_0)] = \epsilon_{01}^{(a)}$). La intensidad del campo esparcido $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ se muestra en la Fig. 5.6(b). Se aprecia, con respecto al dímero con $d = 12$ nm [Fig. 5.6(a)], que la intensidad máxima del campo esparcido $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ del dímero con $d = 18$ nm [Fig. 5.6(b)] ha disminuido casi 3 órdenes de magnitud. La excitación con el campo dipolar directo es menos fuerte, igualmente la interacción coulombica entre los electrones de las nano-partículas.

Ahora las Figs. 5.6(A) y (B) ilustran la distribución de intensidad modal $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ ideal para los dímeros con $d = 12$ nm y $d = 18$ nm, respectivamente ($\bar{R} = 5$ nm, $\mathbf{r} \in$ plano xz). También se ha normalizado $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ para que $\text{Max}[|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2] = \text{Max}[|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2]$. La comparación de las Figs. 5.6(a) y (A) exhibe que los patrones de intensidad $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ y $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ para $d = 12$ nm son diferentes; las curvas de nivel de n encierran una área mayor para el caso ideal que para el caso de excitación dipolar. Este comportamiento sucede también cuando $d = 18$ nm [compárese Figs. 5.6(b) y (B)]. En la Fig. 5.6(B) ($\bar{R} = 5$ nm y $d = 18$ nm), observamos que la intensidad modal $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ es casi uniforme dentro de las partículas. Esto es característico del modo dipolar de una nano-esfera aislada. Como mencionamos cuando $d = 18$ nm, la interacción coulombica entre los electrones de las nano-partículas es ya débil y la contribución de intensidad de $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ es ya casi similar a la correspondiente de dos nano-esferas aisladas. Al igual que los casos de los dímeros con partículas de $\bar{R} = 15$ nm, la modificación de las líneas de contorno de la intensidad de campo esparcido

$|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ con respecto a las del campo ideal ($|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$) es originado por las pérdidas del material.

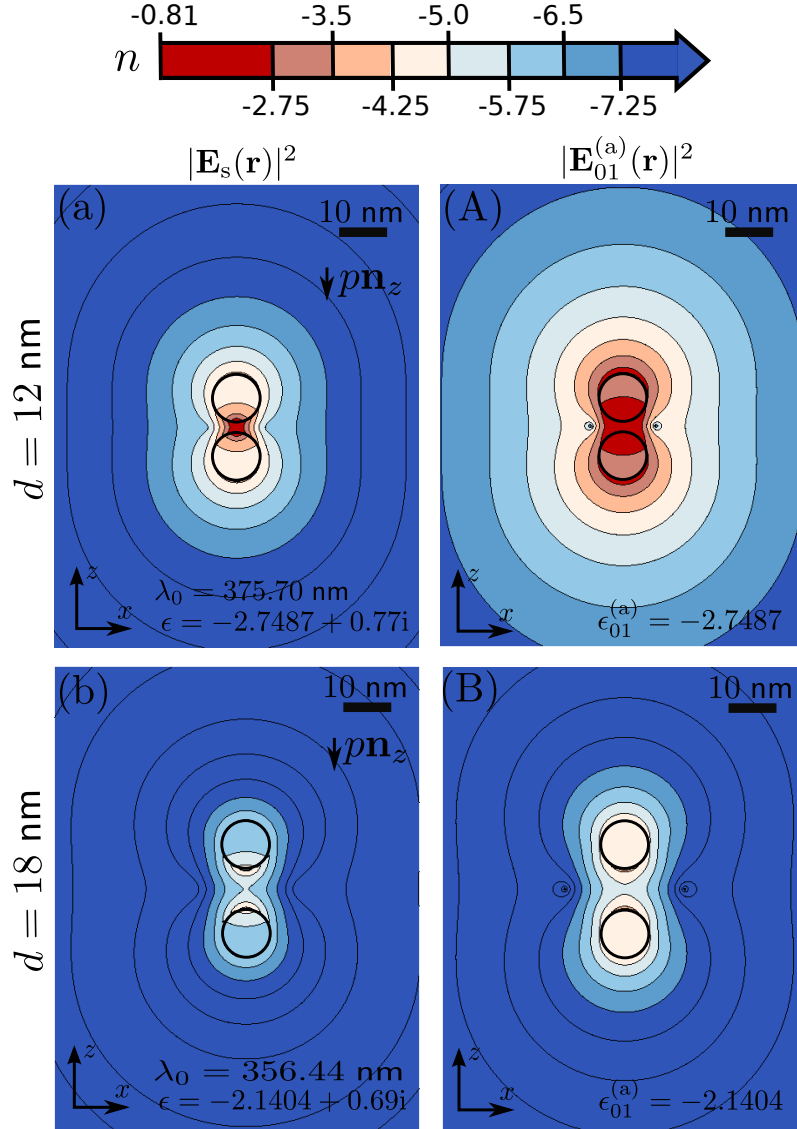


Figura 5.6: Intensidad del campo eléctrico esparcido ($|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2 = A^2 \times 10^n$) creada por un dipolo con momento dipolar $\mathbf{p} = -p\mathbf{n}_z$ localizado en $\mathbf{r}_0 = R_0\mathbf{n}_z$ (plano de simetría modal): (a) $d = 12$ nm y $R_0 = 3.31$ nm; (b) $d = 18$ nm y $R_0 = 7.48$ nm. Intensidad del campo eléctrico del modo $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$: (A) $d = 12$ nm y (B) $d = 18$ nm. Aquí, $\bar{R} = 5$ nm, $A = 1.81[p/1.6 \times 10^{-29} \text{ Cm}] \text{ V/nm}$ (hemos asumido como referencia un dipolo atómico donde la carga del electrón e está separada 1 \AA) y $\mathbf{r} \in$ plano xz .

5.3.2. Dipolo en la parte superior del dímero

Aquí el dipolo es colocado sobre el eje z a 1 nm sobre la superficie de la nano-esfera superior, es decir, la coordenada axial respecto al centro de inversión es $z_d = R_0 + d/2 + \bar{R} + \Delta$ ($\Delta = 1$ nm).

Primero consideramos el dímero con nano-esferas de radio $\bar{R} = 15$ nm y separación $d = 32$ nm. Obviamente, asumimos la misma frecuencia de oscilación del dipolo y por ende la misma función dieléctrica $\epsilon(\omega_0)$ que usamos en la sección 5.3.1 para el dímero con igual configuración geométrica ($2\pi c/\omega_0 = 415.46$ nm, $\epsilon(\omega_0) = -3.9732 + 0.73i$). La Fig. 5.7(a) ilustra la intensidad del campo esparcido $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ ($\mathbf{r} \in$ plano xz) para esta configuración. De la misma manera que en las Figs. 5.5 y 5.6, para efectos de comparación, la misma escala de intensidades que aparece en las Figs. 5.5 y 5.6 es usada en la Fig. 5.7. De la Fig. 5.7(a) se distingue que la región de alta intensidad está concentrada alrededor del polo superior de la nano-esfera de arriba, es decir, en la vecindad donde se ubica el dipolo. La zona entre las nano-esferas sólo abarca dominios delimitados por $n = -7.25, -6.50$ que son al menos 3.75 órdenes de magnitud que la curva $n = -2.75$ que circunscribe la región de alta intensidad. La intensidad $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ en la mayor parte de las regiones dentro de las nano-esferas es de baja intensidad ($n < -7.25$), mientras que en el exterior de las nano-esferas, dicha zona de baja intensidad ($n < -7.25$) sucede cuando el punto campo \mathbf{r} se encuentra a una distancia del dipolo superior a aproximadamente 10 nm ($|\mathbf{r} - z_d \mathbf{n}_z| \gtrsim 10$ nm).

Ahora analizamos el dímero con nano-partículas de radio $\bar{R} = 5$ nm y separación $d = 12$ nm. El dipolo oscila con la frecuencia $2\pi c/\omega_0 = 375.76$ nm, la función dieléctrica es $\epsilon(\omega_0) = -2.7487 + 0.77i$ que son los mismos parámetros de la Fig. 5.6(a). La intensidad de campo esparcido $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ que genera el dipolo situado en la parte

superior de este dímero se ilustra en la Fig. 5.7(b). Similarmente al caso del dímero $\bar{R} = 15$ nm y $d = 32$ nm [Fig. 5.7(a)], la región de alta intensidad se localiza en el casquete polar adyacente al dipolo como en sus alrededores. Comparando las Figs. 5.7(a) y (b), se observa que la intensidad máxima en ambas configuraciones es de nivel similar, pero la diferencia notoria es que la intensidad $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ en el interior de las nano-esferas y en la parte externa que rodea a las superficies del dímero (excluyendo la zona alrededor del dipolo) es más grande para el dímero de menor tamaño. Esto también podría ser explicado por el efecto pararrayos mencionado en la sección 5.3.1 donde la densidad de carga superficial se acumula más en superficies que tienen menor curvatura.

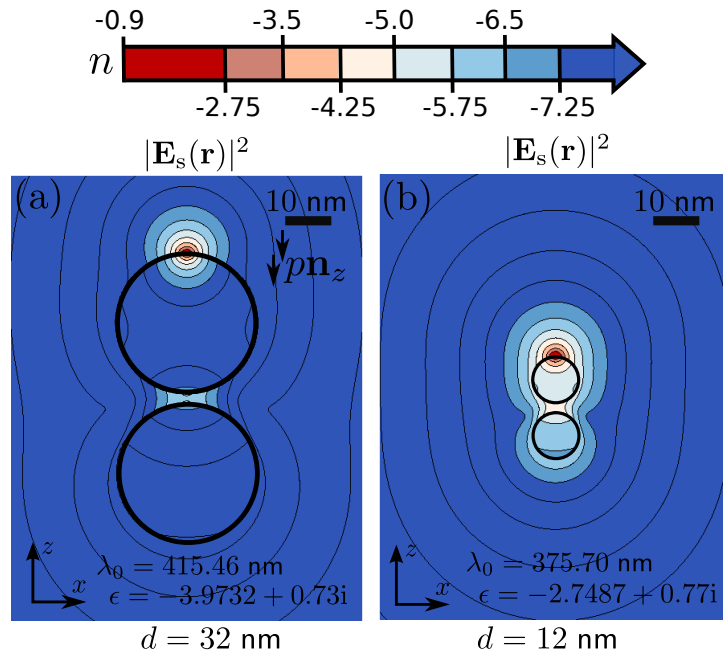


Figura 5.7: Intensidad del campo eléctrico esparcido ($|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2 = A^2 \times 10^n$) creada por un dipolo con momento dipolar $\mathbf{p} = -p\mathbf{n}_z$ localizado en $\mathbf{r}_0 = (R_0 + d/2 + \bar{R} + \Delta)\mathbf{n}_z$, ($\Delta = 1$ nm). (a) $d = 32$ nm, $\bar{R} = 15$ nm y $R_0 = 37.56$ nm. (b) $d = 12$ nm, $\bar{R} = 5$ nm y $R_0 = 15.31$ nm. Aquí, $A = 1.81[p/1.6 \times 10^{-29}$ Cm] V/nm (hemos asumido como referencia un dipolo atómico donde la carga del electrón e está separada 1 Å) y $\mathbf{r} \in$ plano xz .

Los patrones de intensidad del campo esparcido $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ generados por el dipolo situado en la parte superior del dímero son totalmente diferentes a las distribuciones modales de intensidad $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$, tal como se observa al comparar las Figs. 5.7(a) y 5.5(B), y las Figs. 5.7(b) y 5.6(A). Por consiguiente, un dipolo localizado en la parte de arriba del dímero no puede excitar la resonancia plasmónica asociada a $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$; las pérdidas del material son responsables de esto.

5.3.3. Disminución de pérdidas

En las secciones 5.3.1 y 5.3.2 hemos considerado dímeros de plata cuya respuesta dieléctrica ha sido modelada realísticamente. Ahora consideramos un material que hipotéticamente tiene una función dieléctrica ϵ cuya parte imaginaria es menor a la de la plata. De esta manera, analizaremos el impacto de las pérdidas del material sobre la excitación de las resonancias plasmónicas.

Ahora consideraremos un dímero con partículas de radio $\bar{R} = 5$ nm y separación $d = 12$ nm. La función dieléctrica de las nano-partículas es $\epsilon = -2.7487 + 0.00073i$. Nótese que $\text{Re}[\epsilon] = \epsilon_{01}^{(a)}$ y, en relación a la función dieléctrica del dímero de plata de la Fig. 5.6(a), el valor de $\text{Im}[\epsilon]$ se redujo 3 órdenes de magnitud. La frecuencia de oscilación del dipolo es irrelevante siempre y cuando se cumpla $2\pi c/\omega_0 \gg 2\bar{R}$ (aproximación cuasi-estática).

Como primer caso, se asume que el dipolo se ubica en el punto axial sobre el plano de simetría modal ($z_d = R_0$, respecto al centro de inversión). La intensidad del campo esparcido $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ que el dipolo genera está dibujada en la Fig. 5.8(a) ($\mathbf{r} \in$ plano xz). Nótese que la intensidad máxima de $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ para esta figura es de poco más de 3 órdenes de magnitud más fuerte que la del dímero de plata [Fig. 5.6(a)] y la forma de las curvas de contorno de ambas figuras es parecida.

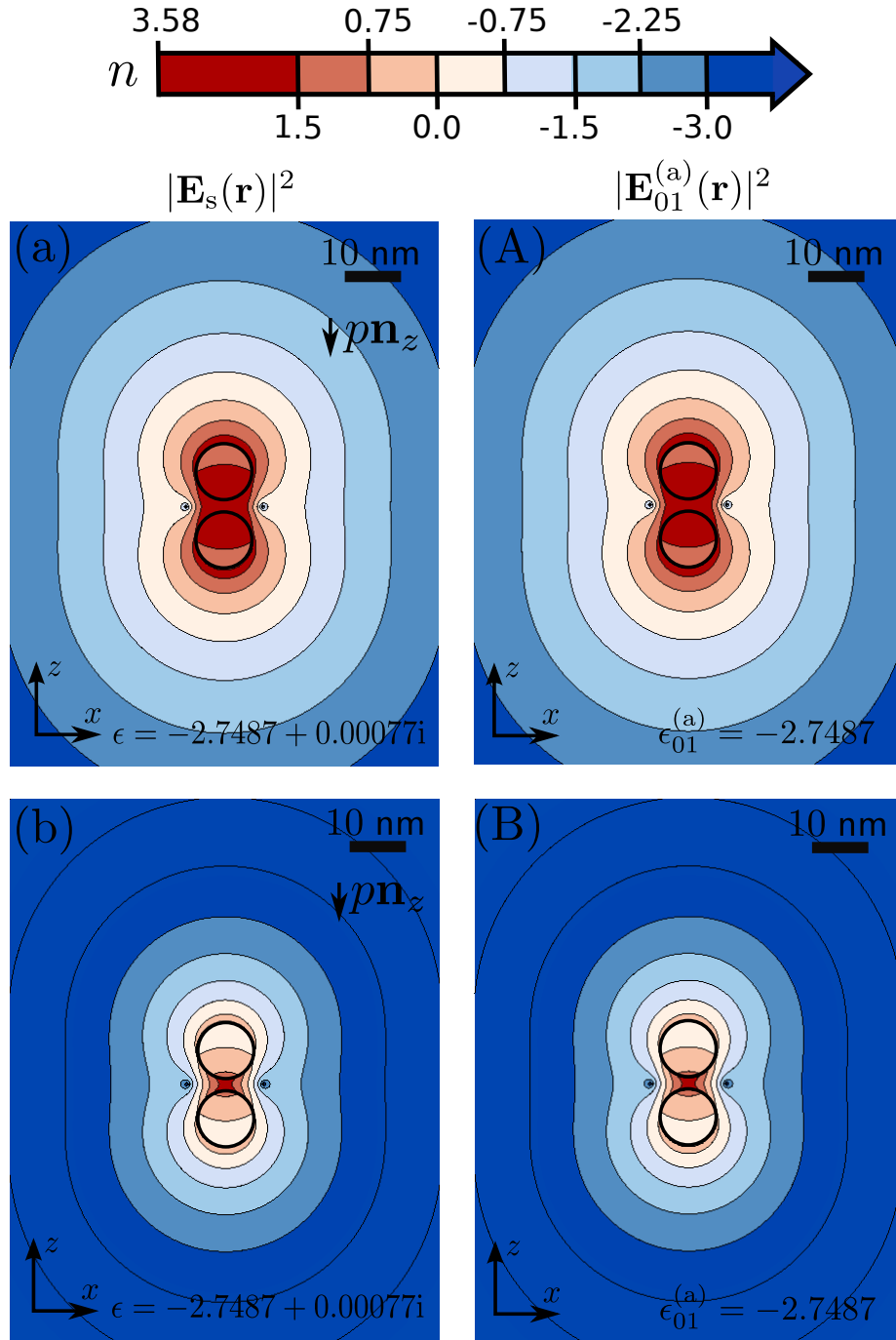


Figura 5.8: Intensidad del campo eléctrico esparcido ($|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2 = A^2 \times 10^n$) creada por un dipolo con momento dipolar $\mathbf{p} = -p\mathbf{n}_z$ localizado en $\mathbf{r}_0 = z_d\mathbf{n}_z$: (a) $d = 12$ nm y $z_d = R_0 = 3.31$ nm; (b) $d = 12$ nm y $z_d = R_0 + d/2 + \bar{R} + \Delta = 15.31$ nm ($\Delta = 1$ nm). Intensidad del campo eléctrico del modo $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$: (A) $d = 12$ nm y (B) $d = 12$ nm. Aquí, $\bar{R} = 5$ nm, $A = 1.81[p/1.6 \times 10^{-29} \text{ Cm}] \text{ V/nm}$ (hemos asumido como referencia un dipolo atómico donde la carga del electrón e está separada 1 \AA) y $\mathbf{r} \in \text{plano } xz$.

La Fig. 5.8(A) ilustra la intensidad de campo modal $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ cuya normalización satisface $\text{Max}[|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2] = \text{Max}[|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2]$. La comparación de las Figs. 5.8(a) y (A) nos conduce a determinar que son exactamente iguales.

Como segundo caso, el dipolo lo desplazamos axialmente a la parte superior del dímero, específicamente a 1 nm de la superficie de la nano-esfera de arriba [$z_d = R_0 + d/2 + \bar{R} + \Delta$, ($\Delta = 1$ nm), respecto al centro de inversión]. La intensidad de campo esparcido $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ que produce este dipolo se encuentra graficada en la Fig. 5.8(b). Con respecto al dímero de plata [Fig. 5.7(b)], la intensidad máxima de $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ ha aumentado poco más de 3 órdenes de magnitud. Además, la reducción de $\text{Im}[\epsilon]$, causa un patrón de intensidad de $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ totalmente diferente al patrón originado por el dímero de plata [compárese Fig. 5.8(b) y Fig. 5.7(b)]. La Fig. 5.8(B) exhibe la intensidad del campo modal $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$, también aquí $\text{Max}[|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2] = \text{Max}[|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2]$. Al igual que el dipolo ubicado en la posición central del dímero no se aprecia ninguna diferencia entre la distribución de intensidad $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ generada por el dipolo [Fig. 5.8(b)] y la intensidad modal $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ [Fig. 5.8(B)]. Hemos corroborado que en el límite cuando $\text{Im}[\epsilon] \ll 1$, un dipolo orientado a lo largo del eje longitudinal del dímero y ubicado sobre ese eje en la cercanía de las nanopartículas puede excitar el modo $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$. Cuando el límite anterior no se cumple, como vimos en la sección 5.3.2, la resonancia plasmónica que hemos estudiado no puede ser excitada si el dipolo es colocado en la parte superior del dímero. Por lo tanto, las pérdidas óhmicas [$\text{Im}[\epsilon(\omega_0)] \neq 0$] tienen una gran influencia sobre la factibilidad de excitar plasmones mediante un dipolo.

5.3.4. Excitación de modos superiores

Aquí, exploraremos si es posible excitar un modo de orden superior en un dímero de plata mediante un dipolo.

Nuevamente consideramos el dímero de plata con nano-esferas de radio $\bar{R} = 5$ nm y separación $d = 12$ nm. El dipolo está localizado en el punto axial que intersecta al plano de simetría modal, esto es, $z_d = R_0$ (respecto al centro de inversión) y éste oscila con una frecuencia ω_0 asociada a $\lambda_0 = 348.23$ nm. La función dieléctrica a esta frecuencia es $\epsilon(\omega_0) = -1.6935 + 0.68i$. Aquí, $\text{Re}[\epsilon(\omega_0)] = \epsilon_{02}^{(a)}$ (eigen-constante del segundo modo antisimétrico "a" de la familia $m = 0$). Las Figs. 5.9(a) y (b) muestran las intensidades de las componentes cartesianas del campo esparcido en las direcciones x y z ($|E_{s_x}(\mathbf{r})|^2$ y $|E_{s_z}(\mathbf{r})|^2$, respectivamente y $\mathbf{r} \in$ plano xz); la componente del campo esparcido en la dirección- y es nula. Por otro lado, las intensidades del campo modal de las componentes cartesianas en las direcciones x y z , esto es, $|E_{02_x}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ y $|E_{02_z}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$, respectivamente, se exhiben en la Figs. 5.9(A) y (B); otra vez las intensidades modales están normalizadas de modo que $\text{Max}[|E_{02_j}^{(a)}(\mathbf{r})|^2] = \text{Max}[|E_{s_j}(\mathbf{r})|^2]$ ($j = x, z$).

Haciendo la comparación de las Figs. 5.9(a) y (A), notamos que los patrones de intensidad modal $|E_{02_x}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ y de intensidad de campo esparcido $|E_{s_x}(\mathbf{r})|^2$ son disímiles. Las líneas de contorno $n \leq -3.50$ de $|E_{02_x}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$, externas a las nano-partículas, poseen 8 lóbulos, mientras que, para $|E_{s_x}(\mathbf{r})|^2$, las líneas de contorno $n \leq -4.25$ (exteriores al dímero) son más simples ya que poseen 4 lóbulos. Por lo tanto, la estructura espacial del patrón de intensidad $|E_{02_x}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ es mucho más compleja que el correspondiente a $|E_{s_x}(\mathbf{r})|^2$. Otra diferencia entre estos casos es que la zona de alta intensidad de $|E_{s_x}(\mathbf{r})|^2$ se localiza únicamente en los alrededores de los polos adyacentes de las nano-esferas, en cambio, para $|E_{02_x}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ existen múltiples regiones de alta intensidad que se distribuyen a lo largo de las superficies de las nano-esferas.

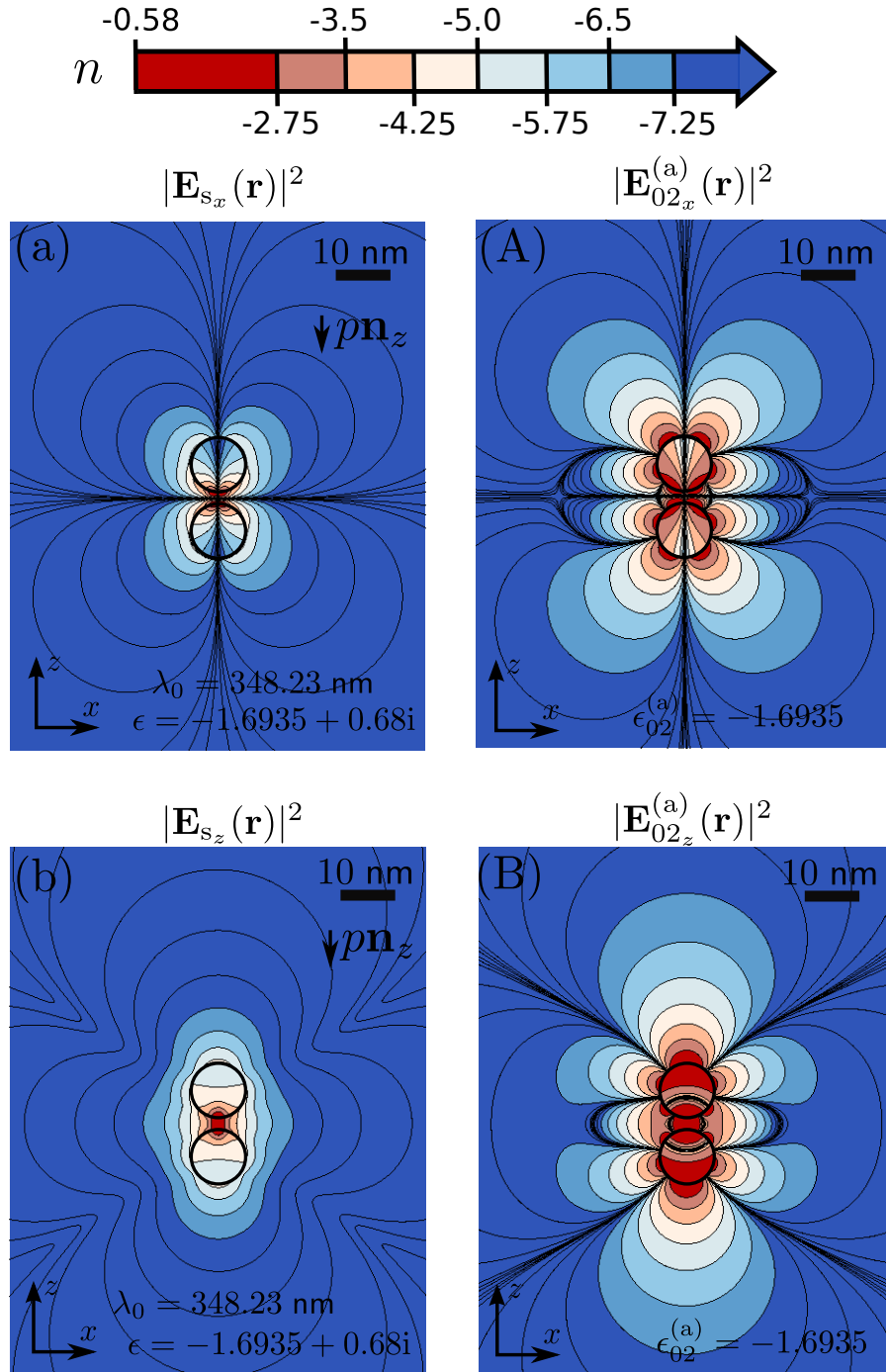


Figura 5.9: Intensidad del campo eléctrico esparcido $|E_{s_j}(\mathbf{r})|^2 = A^2 \times 10^n$ ($j = x, z$) creada por un dipolo con momento dipolar $\mathbf{p} = -p\mathbf{n}_z$ localizado en $\mathbf{r}_0 = R_0\mathbf{n}_z$: (a) $|E_{s_x}(\mathbf{r})|^2$; (b) $|E_{s_z}(\mathbf{r})|^2$. Intensidad del campo eléctrico del modo $|E_{02_j}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ ($j = x, z$): (A) $|E_{02_x}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ y (B) $|E_{02_z}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$. Aquí, $d = 12 \text{ nm}$, $\bar{R} = 5 \text{ nm}$, $R_0 = 3.31 \text{ nm}$, $A = 1.81[p/1.6 \times 10^{-29} \text{ Cm}] \text{ V/nm}$ (hemos asumido como referencia un dipolo atómico donde la carga del electrón e está separada 1 \AA) y $\mathbf{r} \in \text{plano } xz$.

De la misma manera que en los casos anteriores, las pérdidas del material originan el desfase de las oscilaciones de electrones que causan un campo esparcido $E_{s_x}(\mathbf{r})$ muy deteriorado con respecto al campo del modo ideal $E_{02_x}^{(a)}(\mathbf{r})$. Y este deterioro es más grande para el modo superior que para el modo de orden más bajo [véase Figs. 5.6(a) y (A)].

Si ahora se hace un reconocimiento de las Figs. 5.9(b) y (B), se observa que las diferencias entre $|E_{02_z}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ y $|E_{s_z}(\mathbf{r})|^2$ son esencialmente las mismas que las semejanzas que ocurren entre $|E_{02_x}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ y $|E_{s_x}(\mathbf{r})|^2$, es decir, el patrón de intensidad de $|E_{02_z}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ tiene un relieve espacial más sofisticado que la distribución de intensidad de $|E_{s_z}(\mathbf{r})|^2$, y $|E_{02_z}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ posee diversas zonas de alta intensidad repartidas en la vecindad de las superficies de la nano-estructura, mientras que $|E_{s_z}(\mathbf{r})|^2$ tiene una sola región de alta intensidad ubicada entre las nano-esferas. La disimilitud particular entre $|E_{02_z}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ y $|E_{02_x}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ es la forma de las líneas de contorno: por ejemplo, para $|E_{02_x}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ la línea de contorno $n = -5.75$ está conformada por 8 lóbulos laterales y esa misma línea de contorno para $|E_{02_z}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ está caracterizada por 6 lóbulos laterales más uno superior y otro inferior. La semejanza de la forma de las curvas de contorno también aplica para las distribuciones $|E_{s_x}(\mathbf{r})|^2$ y $|E_{s_z}(\mathbf{r})|^2$.

Capítulo 6

Conclusiones

Desarrollamos un método teórico basado en la transformación de inversión para hallar el potencial eléctrico Φ cuasi-estático generado por un dipolo oscilante ubicado en la cercanía de dos nano-partículas esféricas (dímero). Mediante esta transformación, la geometría del dímero se convierte en otra conformada por dos esferas concéntricas. Para determinar el potencial Φ creado por el dipolo puntual, se demostró que es necesario resolver, en el espacio de inversión, otra ecuación de Poisson para el potencial Ψ (relacionado con Φ) donde la fuente de excitación consiste de un dipolo puntual efectivo más una carga puntual efectiva (esta carga es proporcional a la componente radial del dipolo con respecto al centro de inversión). Particularmente, hemos hallado el potencial Φ cuando el dipolo es colocado en el eje longitudinal del dímero y orientado a lo largo de ese eje. El potencial Ψ es expresado en una serie de multipolos esféricos convencionales con respecto al centro común de las esferas concéntricas. Para encontrar los coeficientes de cada multipolo, es necesario resolver un sistema lineal de ecuaciones sobredeterminado que surge de aplicar las condiciones de fronteras que Ψ satisface en la superficie de las esferas concéntricas en el espacio de inversión. Dichas condiciones de frontera también han sido derivadas.

Nuestro formalismo teórico para encontrar el campo producido por un dipolo

podría proveer un nuevo enfoque para analizar la influencia del dímero sobre las propiedades radiativas de emisores atómicos o moleculares (fluorescencia, decaimiento espontáneo), asimismo para estudiar interacciones moleculares mediadas por campos electromagnéticos (transferencia de energía Förster, fuerzas de van der Waals y térmicas). Dado que los coeficientes de las expansiones multipolares se obtienen de resolver un sistema lineal de ecuaciones simple, la implementación de nuestro método reduciría los recursos computacionales para calcular el campo eléctrico que genera dicho un dipolo.

Por otro lado, hemos determinado la factibilidad de excitar modos plasmónicos en un dímero hecho de un metal real por medio de un dipolo. Para lograr lo anterior, hemos comparado las distribuciones de intensidad del campo eléctrico esparcido generadas por el dipolo con las intensidades del campo que corresponden al modo ideal. El campo generado por el dipolo situado en la vecindad del dímero ha sido obtenido usando el método basado en la transformación de inversión que se ha desarrollado en la presente tesis.

Inicialmente, se mostró que, idealmente, un dipolo ubicado a lo largo del eje longitudinal y ubicado sobre ese eje excitaría el modo plasmónico antisimétrico “a” de orden más bajo ($s = 1$) de la familia $m = 0$. Particularmente, se ha considerado un dímero constituido por nano-esferas (embebidas en el vacío) de igual tamaño y hechas de plata. Cuatro configuraciones geométricas del dímero fueron estudiadas: (I) $\bar{R} = 15$ nm y $d = 36$ nm, (II) $\bar{R} = 15$ nm y $d = 32$ nm, (III) $\bar{R} = 5$ nm y $d = 12$ nm y (IV) $\bar{R} = 5$ nm y $d = 18$ nm. Las frecuencias de oscilación del dipolo se seleccionaron de tal manera que $\text{Re}[\epsilon(\omega_0)] = \epsilon_{01}^{(a)}$, esto con la finalidad de excitar el modo plasmónico correspondiente.

Primero se consideraron las cuatro configuraciones anteriores en las cuales el dipolo se ubicaba en el punto medio de la distancia entre las superficies adyacentes de las nano-esferas. Independiente de la configuración, la zona de máxima intensidad de campo esparcido $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ se ubicó alrededor de los polos adyacentes de la nanopartículas. Notamos que, a pesar de que la distancia $d - 2\bar{R}$ (separación entre las superficies de las nano-esferas) es la misma para las configuraciones II y III, el dímero con nano-esferas de menor tamaño exhibió una intensidad máxima de campo esparcido ligeramente más grande. Este efecto se atribuye presumiblemente al hecho de que la densidad de carga superficial es más grande para partículas con menor curvatura (efecto pararrayos). Las configuraciones I y III tienen el mismo factor geométrico d/\bar{R} y por ende ambas poseen la misma eigen-constante dieléctrica $\epsilon_{01}^{(a)}$; comparando la intensidad de campo esparcido $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ para estos casos, resultó que esta intensidad es más fuerte para el dímero de menor tamaño (en las regiones polares adyacentes de las nano-esferas, la diferencia es de al menos 1.5 órdenes de magnitud). Este efecto es probablemente originado conjuntamente por: el aumento de la magnitud del campo de excitación del dipolo que interacciona con las nano-partículas dado que la distancia $d - 2\bar{R}$ es menor para la configuración III que para la I y el efecto pararrayos ya que III tiene una curvatura menor que I. Al comparar cada distribución de intensidad de campo esparcido $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ con su correspondiente intensidad modal $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$, se observó que el área encerrada por las curvas de contorno es menor para $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ (implicando reducción de intensidad) y la forma de dichas curvas de contorno de $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ sufren distorsión, aunque las curvas externas al dímero se parecen a las del caso ideal. Lo anterior es debido a que las pérdidas óhmicas ($\text{Im}[\epsilon(\omega_0)] \neq 0$) del metal real ocasionan que las oscilaciones de los electrones no sean perfectamente coherentes. Notamos que el patrón de intensidad $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ es más parecido al correspondiente

patrón ideal $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ para los dímeros con una distancia $d - 2\bar{R}$ menor (configuraciones II y III). Esto es atribuido, en consideración a que estas configuraciones (II y III) tienen un valor similar de $\text{Im}[\epsilon(\omega_0)]$, al acoplamiento de interacción entre los electrones de las nano-partículas que es más fuerte conforme la separación $d - 2\bar{R}$ decrece, causando que las oscilaciones electrónicas sufran menos decoherencia. En la configuración IV, se observó que las nano-partículas están lo suficientemente alejadas de modo que el patrón de intensidad modal $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$ es casi igual al asociado a dos nano-esferas aisladas, la interacción coulombica inter-partícula es ya débil.

Como se segundo escenario, el dipolo se desplazó a la parte superior del dímero, a 1 nm de la superficie, donde únicamente se examinaron las configuraciones II y III. Para ambas configuraciones, resultó que la región de alta intensidad de campo esparcido $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ está en los alrededores del casquete polar adyacente al dipolo y el nivel de intensidad máxima es de orden similar. La diferencia entre las distribuciones de intensidad de campo esparcido $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ de II y III estriba en que la intensidad en el interior y en parte externa que rodea la superficie del dímero es más fuerte para el dímero que tiene nano-esferas de menor tamaño (configuración III). Esto también podría ser consecuencia del mencionado efecto pararrayos. Por otro lado, para ambos casos, el patrón de intensidad de campo esparcido $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ fue totalmente disímil a la distribución de intensidad ideal $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$. Consiguientemente, en comparación al caso ideal $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$, las pérdidas óhmicas del metal real deterioraron significamente la distribución $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$. Por lo tanto, un dipolo situado en la parte superior de un dímero real no es propicio para excitar el modo plasmónico estudiado.

Se corroboró que efectivamente un dipolo localizado en el eje longitudinal puede excitar el modo plámonico (“a”, $m = 0$, $s = 1$). Para ello se realizó lo siguiente. Primero se consideró la configuración III en la cual se asumió que las nano-partícu-

las estuviesen hechas de un metal hipotético cuya parte imaginaria de la constante dieléctrica fuese 3 órdenes menor que la de la plata, es decir, un metal que presentara menos pérdidas óhmicas. Luego las posiciones del dipolo fueron: el punto que está situado a la mitad de la distancia entre las superficies adyacentes de la nano-esferas y el punto ubicado a 1 nm de la superficie superior del dímero. Para estos casos, independientemente de la localización del dipolo, la intensidad del campo esparcido $|\mathbf{E}_s(\mathbf{r})|^2$ coincidió prácticamente con la intensidad modal $|\mathbf{E}_{01}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$.

La última situación estudiada fue la posibilidad de la excitación de un modo superior de resonancia (en particular el modo: “a”, $m = 0$, $s = 2$) de un dímero real por medio del dipolo. Se examinó la configuración III en la cual el dipolo fue colocado en el punto central de la distancia entre las superficies adyacentes de la nano-esferas. Se mostró que la distribución del patrón de intensidad ideal de las componentes cartesianas ($|E_{02j}^{(a)}(\mathbf{r})|^2$, $j = x, z$) exhibe una estructura espacial compleja: líneas de contorno con 8 lóbulos y múltiples zonas de alta intensidad distribuidas a lo largo de las superficies de las nano-esferas. En cambio, para un dímero real, la distribución de la intensidad de campo esparcido $|E_{sj}(\mathbf{r})|^2$ (originada por la excitación dipolar, $j = x, z$) es mucho más simple: las líneas exhibe 4 lóbulos y sólo hay una región de alta intensidad ubicada en el espacio vacío de las nano-esferas. Por lo tanto, la pérdidas óhmicas del metal limitan la excitación dipolar de modos plasmónicos de orden superior.

En resumen, se ha mostrado que las pérdidas óhmicas de un metal real como la plata influyen significativamente en la factibilidad de la excitación de las resonancias plasmónicas de un dímero mediante un dipolo. Encontramos que la situación más favorable para poder excitar el modo plasmónico fue cuando el dipolo estuvo ubicado en el punto central de la distancia entre las superficies adyacentes de la nano-esferas

y la separación entre las nano-esferas $d - 2\bar{R}$ del dímero fue menor (un par de nanómetros). Lo anterior pudiera deberse a que conforme $d - 2\bar{R}$ decrece la interacción coulombica entre los electrones de las nanopartículas se hace más fuerte, asimismo el campo externo de excitación que crea el dipolo, y por consiguiente esto implicaría que las oscilaciones de electrones sufrirían menos decoherencia. Por lo contrario, el dipolo colocado en la parte superior del dímero generó una distribución campo totalmente diferente al caso ideal. También, se observó que, si se mantiene la separación $d - 2\bar{R}$ fija, la intensidad del campo esparcido es más grande en los dímeros con nanopartículas de menor tamaño. Esto se atribuye presumiblemente al efecto pararrayos. La estructura espacial compleja de los campos de los modos plasmónicos de orden superior es complementamente destruida por las pérdidas óhmicas del metal real.

Apéndice A

Derivación a_1 y z_{c1}

Aquí se derivarán las expresiones para obtener el radio a_1 de la esfera S'_1 [Ec. (2.7)] y la coordenada axial z_{c1} donde se localiza el centro de dicha esfera [Ec. (2.8)]. Hemos omitido la derivación explícita para obtener a_2 , ya que ésta es análoga a la derivación para encontrar a_1 .

La ecuación de la esfera S_1 [radio R_1 y centro sobre el eje z en z_a] en coordenadas esféricas es

$$r^2 - 2rz_a \cos \theta + z_a^2 = R_1^2. \quad (\text{A.1})$$

Aplicando las relaciones de inversión (2.3), se obtiene:

$$r_1^2 - \left(\frac{2z_a R^2}{z_a^2 - R_1^2}\right)r_1 \cos \theta_1 + \frac{R^4}{z_a^2 - R_1^2} = 0. \quad (\text{A.2})$$

Manipulando algebraicamente la Ec. (A.2), resulta

$$r_1^2 - \left(\frac{2z_a R^2}{z_a^2 - R_1^2}\right)r_1 \cos \theta_1 + \frac{z_a^2 R^4}{(z_a^2 - R_1^2)^2} = \frac{R_1^2 R^4}{(z_a^2 - R_1^2)^2}. \quad (\text{A.3})$$

Es evidente que la Ec. (A.3) representa la esfera S'_1 en el espacio de inversión cuyo radio a_1 y localización axial z_{c1} son

$$a_1 = \frac{R_1 R^2}{z_a^2 - R_1^2}. \quad (\text{A.4})$$

$$z_{c1} = \frac{z_a R^2}{z_a^2 - R_1^2}. \quad (\text{A.5})$$

respectivamente. Dado que $z_a = R_0 + h_1$, a_1 se puede expresar como

$$a_1 = \frac{R^2}{2R_0} \frac{2R_1 R_0}{(R_0 + h_1)^2 - R_1^2} = \frac{R^2}{2R_0} \frac{R_0^2 + R_1^2 - (R_0^2 - R_1^2)^2}{(R_0 + h_1)^2 - R_1^2}. \quad (\text{A.6})$$

Sustituyendo la Ec. (2.6) en la Ec. (A.6) tenemos

$$a_1 = \frac{R^2}{2R_0} \frac{h_1^2 - (R_0 - R_1)^2}{(R_0 + h_1)^2 - R_1^2} = \frac{R^2}{2R_0} \frac{h_1 - R_0 + R_1}{h_1 + R_0 + R_1}. \quad (\text{A.7})$$

El último término de la Ec. (A.7) es precisamente la expresión dada en la Ec. (2.7) ($j = 1$). De la misma manera usando $z_a = R_0 + h_1$, z_{c1} se puede reescribir como:

$$z_{c1} = \frac{(R_0 + h_1)R^2}{(R_0 + h_1)^2 - R_1^2} = \frac{(R_0 + h_1)R^2}{R_0^2 + h_1^2 + 2R_0 h_1 - R_1^2}. \quad (\text{A.8})$$

Nuevamente usando la Ec. (2.6), pero ahora en la Ec. (A.8), se obtiene directamente

$$z_{c1} = \frac{R^2}{2R_0}. \quad (\text{A.9})$$

Este es el resultado que se establece en la Ec. (2.8).

Apéndice B

Derivación de expresiones involucradas en las condiciones de frontera

B.1. $\partial r_3/\partial r$, $\partial r_3/\partial \theta$, $\partial \theta_3/\partial r$ y $\partial \theta_3/\partial \theta$

De la Ec. (4.36) resulta que

$$\frac{1}{\Omega} \frac{\partial r_3}{\partial r} = \frac{r - 2R_0 \cos \theta}{r \sqrt{4R_0^2 + r^2 - 4R_0 r \cos \theta}} - \frac{1}{r^2} \sqrt{4R_0^2 + r^2 - 4R_0 r \cos \theta}. \quad (\text{B.1})$$

El primer término del lado derecho de la Ec. (B.1) se puede relacionar de manera directa con el ángulo $\cos \theta_3$ [Ec. (4.37)], mientras el segundo término se relaciona con r_3/Ω [Ec. (4.36)]. Con esto la Ec. (B.1) se reduce a

$$\frac{1}{\Omega} \frac{\partial r_3}{\partial r} = -\frac{1}{r} \left(\cos \gamma \cos \theta_3 + \frac{r_3}{\Omega} \right). \quad (\text{B.2})$$

Por otro lado, usando la Ec. (4.37) y el hecho que $\sin \theta_3 = \sqrt{1 - \cos^2 \theta_3}$ se obtiene que

$$\sin \theta_3 = \frac{2R_0 \sin \theta}{\sqrt{4R_0^2 + r^2 - 4R_0 r \cos \theta}}. \quad (\text{B.3})$$

Ahora si calculamos la derivada parcial de r_3 [Ec. 4.36] con respecto a θ , sale de manera directa, usando la Ec. (B.3),

$$\frac{1}{\Omega} \frac{\partial r_3}{\partial \theta} = \sin \theta_3. \quad (\text{B.4})$$

Otra vez usando la Ec. (4.37), pero derivando con respecto a r , se obtiene

$$\sin \theta_3 \frac{\partial \theta_3}{\partial r} = \cos \gamma \frac{(2R_0 \sin \theta)^2}{(4R_0^2 + r^2 - 4R_0 r \cos \theta)^{3/2}}; \quad (\text{B.5})$$

empleando las Ecs. (B.3) y (4.36), el término anterior se simplifica a

$$\frac{\partial \theta_3}{\partial r} = \frac{\cos \gamma}{r} \frac{\sin \theta_3}{(r_3/\Omega)}. \quad (\text{B.6})$$

Finalmente la derivada parcial de θ_3 con respecto a θ da

$$\sin \theta_3 \frac{\partial \theta_3}{\partial \theta} = \cos \gamma \frac{2R_0 \sin \theta}{\sqrt{4R_0^2 + r^2 - 4R_0 r \cos \theta}} \left[\frac{r(2R_0 \cos \theta - r)}{4R_0^2 + r^2 - 4R_0 r \cos \theta} + 1 \right] \quad (\text{B.7})$$

y con la utilización de las Ecs. (B.3), (4.36) y (4.37) podemos reducir la Ec. (B.7) a

$$\frac{\partial \theta_3}{\partial \theta} = \cos \gamma + \frac{\cos \theta_3}{(r_3/\Omega)}. \quad (\text{B.8})$$

B.2. Transformación de $z_j \sin \theta$ y $r - z_j \cos \theta$

Para la derivación de la expresión $z_j \sin \theta$, primeramente encontraremos $\sin \theta$ en función de r_3 y θ_3 . Despejaremos $\sin \theta$ y $\cos \theta$ de las Ecs. (4.37) y (B.3), respectivamente y obtenemos la siguiente relación

$$\tan \theta = \frac{\sin \theta}{\cos \theta} = \frac{(r_3/\Omega) \sin \theta_3}{1 + \cos \gamma \cos \theta_3 (r_3/\Omega)} = \frac{a}{b}. \quad (\text{B.9})$$

Aquí a y b hacen referencia a el cateto opuesto y cateto adyacente, respectivamente, de un triángulo rectángulo cuya hipotenusa está dada por

$$c = \sqrt{a^2 + b^2} = [(r_3/\Omega)^2 + 1 + 2(r_3/\Omega) \cos \gamma \cos \theta_3]^{1/2}. \quad (\text{B.10})$$

Considerando que $\sin \theta = a/c$, se obtiene que

$$\sin \theta = \frac{(r_3/\Omega) \sin \theta_3}{[(r_3/\Omega)^2 + 1 + 2(r_3/\Omega) \cos \gamma \cos \theta_3]^{1/2}}. \quad (\text{B.11})$$

Haciendo alusión a la Fig. (1.3), z_j puede ser expresado en función de R_0 y h_j , esto es, (véase capítulo 2)

$$z_j = [R_0 + (-1)^{j-1}h_j], \quad (j = 1, 2). \quad (\text{B.12})$$

Finalmente la expresión para $z_j \sin \theta$ está dada por

$$f_j(r_3, \theta_3) \equiv z_j \sin \theta = \frac{(r_3/\Omega) \sin \theta_3 [R_0 + (-1)^{j-1}h_j]}{[(r_3/\Omega)^2 + 1 + 2(r_3/\Omega) \cos \gamma \cos \theta_3]^{1/2}}. \quad (\text{B.13})$$

Para hallar la expresión $r - z_j \cos \theta$ en términos de r_3 y θ_3 , partimos de la Ec. (4.34) en la cual se le suma a ambos lados el factor $z_j^2 \cos^2 \theta$ y resulta que

$$r - z_j \cos \theta = \pm \sqrt{R_j^2 - (z_j \sin \theta)^2}, \quad j = 1, 2. \quad (\text{B.14})$$

Tenemos que tener cuidado con la elección del signo del radical del lado derecho de la Ec. (B.14). Primero para la esfera S_1 notamos que la coordenada polar de un punto en S_1 está dentro del rango $0 \leq \theta \leq \theta_c$ donde

$$\sin \theta_c = \frac{R_1}{z_1} = \frac{R_1}{h_1 + R_0} \quad (\text{B.15})$$

tal como se ilustra en la Fig. B.1(a). Cuando $\theta = \theta_c$, la coordenada radial es $r_c = \sqrt{z_1^2 - R_1^2}$, entonces el punto (r_c, θ_c, ϕ) divide S_1 en dos arcos: (1) el arco superior de S_1 cuyos puntos (r, θ, ϕ) satisfacen $r - z_1 \cos \theta > 0$ y (2) el arco inferior de S_1 donde se cumple lo opuesto, es decir, $r - z_1 \cos \theta < 0$ [véase Fig. B.1(a)]. Por ende, en el primer (segundo) caso es necesario usar el signo positivo (negativo) del radical en la Ec. (B.14). Por otro lado, para la esfera S_2 , el centro de inversión siempre estará dentro de esta esfera, y z_2 siempre será menor que cero. Por consiguiente $r - z_2 \cos \theta > 0$ para todo punto (r, θ, ϕ) de S_2 y como consecuencia sólo el signo positivo del radical de la Ec. (B.14) debe emplearse.

En la Fig. B.1(b) se muestra el mapeo de los arcos de la esfera S_1 al espacio de inversión. Nótese que en el espacio de inversión el ángulo θ_c está dado por

$$\sin \theta_c = \frac{a_1}{R^2/2R_0} = \tilde{a}_1 \quad (\text{B.16})$$

y este ángulo también delimita la separación entre los arcos. Mediante propiedades geométricas simples, se obtiene de manera directa la correspondencia del signo positivo o negativo en los intervalos de θ_3 que expanden los arcos de S'_1 para los casos sin rotación ($\gamma = 0$) y con rotación ($\gamma = \pi$). Finalmente, con la Ec. (B.13), la Ec. (B.14) se convierte a

$$g_j(\tilde{r}_3, \theta_3) \equiv r - z_j \cos \theta = \tau_j \sqrt{R_j^2 - [f_j(\tilde{r}_3, \theta_3)]^2} \quad (\text{B.17})$$

donde τ_j ($j = 1, 2$) está definido como

$$\tau_1 = \begin{cases} -\cos(\gamma) & \text{si } 0 < \theta_3 < \frac{\pi}{2} + \cos(\gamma)\theta_c \\ \cos(\gamma) & \text{si } \frac{\pi}{2} + \cos(\gamma)\theta_c < \theta_3 < \pi \end{cases}, \quad (\text{B.18})$$

$$\tau_2 = 1 \quad (\text{B.19})$$

Demostrando así la Ec. (4.48).

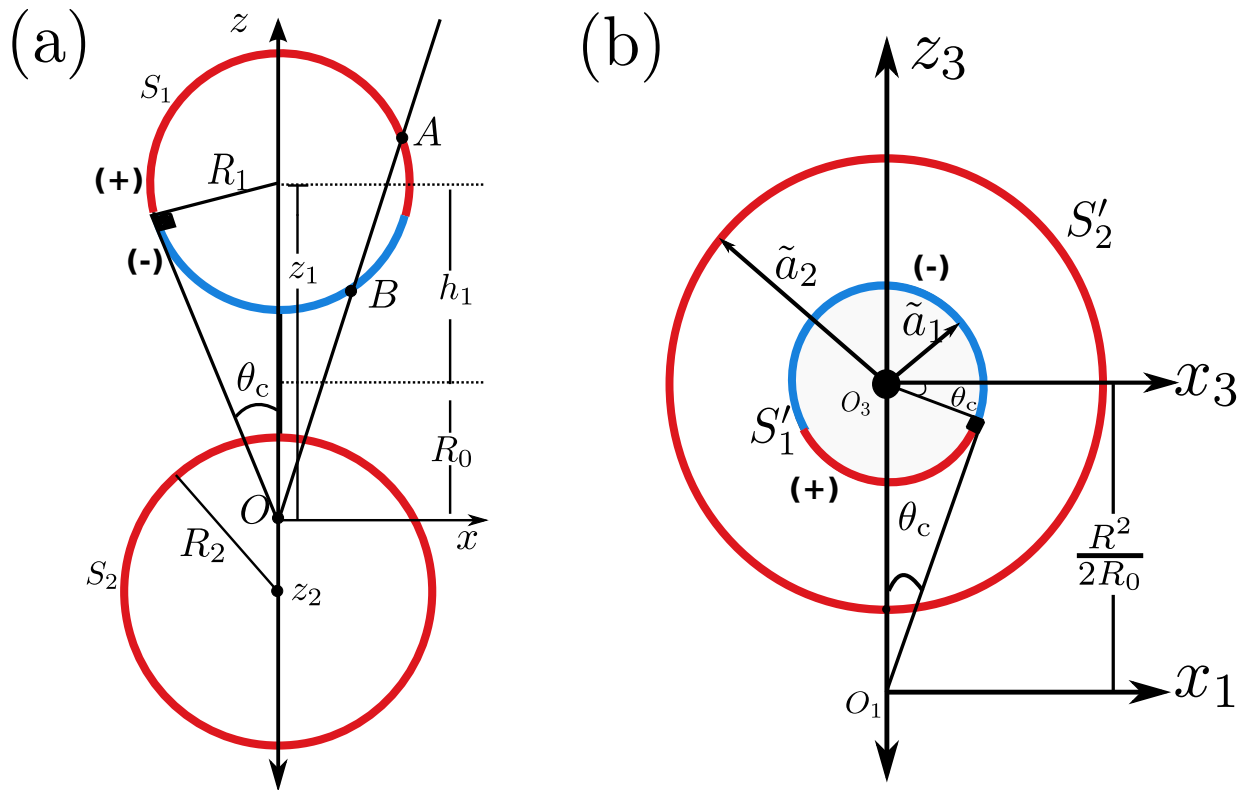


Figura B.1: Elección de los signos positivo (línea roja) y negativo (línea azul) de la Ec. (B.14). (a) Sistema original. (b) Espacio de inversión.

Apéndice C

Expresiones explícitas de $\mathcal{L}_1\Psi_\beta^{(\alpha)}$ y $\mathcal{L}_2\Psi_\beta^{(\alpha)}$.

A continuación se encuentran las expresiones resultantes de $\mathcal{L}_1\Psi_{0s}^{(\alpha)}$, $\mathcal{L}_1\Psi_1^{(\alpha)}$ y $\mathcal{L}_1\Psi_2^{(\alpha)}$.

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_1\Psi_{0s}^{(\alpha)}(\tilde{r}_3, \theta_3) &= \frac{\bar{\sigma}_\alpha}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \frac{2R_0(r \cos \theta - 2R_0)}{r^3\tilde{r}_3} \sum_{n=0}^{\infty} \left[n\tilde{A}_n^{(\alpha)}\tilde{r}_3^{n-1} - (n+1)\frac{\tilde{B}_n^{(\alpha)}}{\tilde{r}_3^{n+2}} \right] P_n(\cos \theta_3) \\ &\quad - \cos \gamma \frac{\bar{\sigma}_\alpha}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \frac{\sin \theta_3}{r\tilde{r}_3} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\tilde{A}_n^{(\alpha)}\tilde{r}_3^n + \frac{\tilde{B}_n^{(\alpha)}}{\tilde{r}_3^{n+1}} \right] P_n^1(\cos \theta_3), \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_1\Psi_1^{(\alpha)}(\tilde{r}_3, \theta_3) &= \frac{\bar{\sigma}_\alpha}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \frac{2R_0(r \cos \theta - 2R_0)}{r^3\tilde{r}_3} \sum_{n=0}^{\infty} n\tilde{C}_n^{(\alpha)}\tilde{r}_3^{n-1} P_n(\cos \theta_3) \\ &\quad - \cos \gamma \frac{\bar{\sigma}_\alpha}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \frac{\sin \theta_3}{r\tilde{r}_3} \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{C}_n^{(\alpha)}\tilde{r}_3^n P_n^1(\cos \theta_3), \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_2\Psi_2^{(\alpha)}(\tilde{r}_3, \theta_3) &= -\frac{\bar{\sigma}_\alpha}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \frac{2R_0(r \cos \theta - 2R_0)}{r^3\tilde{r}_3} \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)\frac{\tilde{D}_n^{(\alpha)}}{\tilde{r}_3^{n+2}} P_n(\cos \theta_3) \\ &\quad - \cos \gamma \frac{\bar{\sigma}_\alpha}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \frac{\sin \theta_3}{r\tilde{r}_3} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tilde{D}_n^{(\alpha)}}{\tilde{r}_3^{n+1}} P_n^1(\cos \theta_3). \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

Las expresiones explícitas de $\mathcal{L}_2\Psi_{0s}^{(\alpha)}$, $\mathcal{L}_2\Psi_1^{(\alpha)}$ y $\mathcal{L}_2\Psi_2^{(\alpha)}$ son las siguientes:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_2\Psi_{0s}^{(\alpha)}(\tilde{r}_3, \theta_3) &= \frac{\bar{\sigma}_\alpha}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \sin\theta_3 \sum_{n=0}^{\infty} \left[n\tilde{A}_n^{(\alpha)}\tilde{r}_3^{n-1} - (n+1)\frac{\tilde{B}_n^{(\alpha)}}{\tilde{r}_3^{n+2}} \right] P_n(\cos\theta_3) \\ &\quad - \cos\gamma \frac{\bar{\sigma}_\alpha}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \frac{2R_0(2R_0 - r\cos\theta)}{r^2\tilde{r}_3^2} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\tilde{A}_n^{(\alpha)}\tilde{r}_3^n + \frac{\tilde{B}_n^{(\alpha)}}{\tilde{r}_3^{n+1}} \right] P_n^1(\cos\theta_3), \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_2\Psi_1^{(\alpha)}(\tilde{r}_3, \theta_3) &= \frac{\bar{\sigma}_\alpha}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \sin\theta_3 \sum_{n=0}^{\infty} n\tilde{C}_n^{(\alpha)}\tilde{r}_3^{n-1} P_n(\cos\theta_3) \\ &\quad - \cos\gamma \frac{\bar{\sigma}_\alpha}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \frac{2R_0(2R_0 - r\cos\theta)}{r^2\tilde{r}_3^2} \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{C}_n^{(\alpha)}\tilde{r}_3^n P_n^1(\cos\theta_3), \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_2\Psi_2^{(\alpha)}(\tilde{r}_3, \theta_3) &= -\frac{\bar{\sigma}_\alpha}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \sin\theta_3 \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)\frac{\tilde{D}_n^{(\alpha)}}{\tilde{r}_3^{n+2}} P_n(\cos\theta_3) \\ &\quad - \cos\gamma \frac{\bar{\sigma}_\alpha}{4\pi\epsilon_0\epsilon_m} \frac{2R_0(2R_0 - r\cos\theta)}{r^2\tilde{r}_3^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tilde{D}_n^{(\alpha)}}{\tilde{r}_3^{n+1}} P_n^1(\cos\theta_3). \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

Nótese que hemos omitido $\mathcal{L}_1\Psi_{0d}^{(\alpha)}$ debido a que la parte asociada a este potencial en el espacio original ya es conocida.

Referencias

- [1] M. Stockman, “Nanoplasmonics: past, present, and glimpse into future,” *Opt. Express* **19**, 22029–22106 (2011).
- [2] P. Bharadwaj, B. Deutsch y L. Novotny, “Optical Antennas,” *Adv. Opt. Photon.* **1**, 438–483 (2009).
- [3] P. Biagioni, J. Huang y B. Hecht, “ Nanoantennas for visible and infrared radiation ,” *Rep. Prog. Phys.* **75**, 024402 (2012).
- [4] H. Wang, C. Levin y N. Halas, “Nanosphere Arrays with Controlled Sub-10-nm Gaps as Surface-Enhanced Raman Spectroscopy Substrates,” *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 14992–14993 (2005).
- [5] C. Langhammer, I. Zoric, B. Kasemo y B. Clemens, “Hydrogen Storage in Pd Nanodisks Characterized with a Novel Nanoplasmonic Sensing Scheme,” *Nano Lett.* **73**, 3122–3127 (2007).
- [6] R. Kumar, H. Zhou y S. Cronin, “Surface-enhanced Raman spectroscopy and correlated scanning electron microscopy of individual carbon nanotubes,” *Appl. Phys. Lett.* **91**, 223105 (2007).

- [7] C. Loo, L. Hirsch, M. Lee, E. Chang, J. West, N. Halas y R. Drezek, “Gold nanoshell bioconjugates for molecular imaging in living cells,” *Opt. Lett.* **302**, 1012–1014 (2005).
- [8] X. Huang, P. Jain, I. El-Sayed y M. El-Sayed, “Gold nanoparticles: interesting optical properties and recent applications in cancer diagnostics and therapy,” *Nanomedicine-UK* **220**, 681–693 (2007).
- [9] N. Kundtz, D. R. Smith y J. B. Pendry, “Electromagnetic Design with Transformation Optics,” *Proc. IEEE* **99**, 1622–1633 (2011).
- [10] A. Aubry, D. Lei, S. Maier y J. B. Pendry, “Interaction between plasmonic nanoparticles revisited with transformation optics,” *Phys. Rev. Lett.* **105**, 233901 (2010).
- [11] A. I. Fernández-Domínguez, A. Wiener, F. García-Vidal, S. Maier y J. B. Pendry, “Transformation-Optics Description of Nonlocal Effects in Plasmonic Nanostructures,” *Phys. Rev. Lett.* **108**, 106802 (2012).
- [12] A. I. Fernández-Domínguez, P. Zhang, Y. Luo, S. Maier, F. García-Vidal y J. B. Pendry, “Transformation-optics insight into nonlocal effects in separated nanowires,” *Phys. Rev. B* **86**, 241110R (2012).
- [13] R. McPhedran y W. Perrins, “Electrostatic and optical resonances of cylinder pairs,” *Appl. Phys.* **24**, 311–318 (1981).
- [14] A. Aubry, D. Y. Lei, A. I. Fernández-Domínguez, Y. Sonnefraud, S. A. Maier y J. B. Pendry, “Plasmonic Light-Harvesting Devices over the Whole Visible Spectrum,” *Nano Lett.* **10**, 2574–2579 (2010).

- [15] A. I. Fernández-Domínguez, S. A. Maier y J. B. Pendry, “Collection and Concentration of Light by Touching Spheres: A Transformation Optics Approach,” *Phys. Rev. Lett.* **105**, 266807 (2010).
- [16] Y. Luo, D. Y. Lei, S. A. Maier y J. Pendry, “Broadband Light Harvesting Nanostructures Robust to Edge Bluntness,” *Phys. Rev. Lett.* **108**, 023901 (2012).
- [17] Y. Luo, D. Y. Lei, S. Maier y J. B. Pendry, “Transformation-Optics Description of Plasmonic Nanostructures Containing Blunt Edges/Corners: From Symmetric to Asymmetric Edge Rounding,” *ACS Nano* **67**, 6492–6506 (2012).
- [18] A. I. Fernández-Domínguez, Y. Luo, A. Wiener, J. B. Pendry y S. A. Maier, “Theory of Three-Dimensional Nanocrescent Light Harvesters,” *Nano Lett.* **120**, 5946–5953 (2012).
- [19] Y. Liu y X. Zhang, “Recent advances in transformation optics,” *Nanoscale* **4**, 5277–5292 (2012).
- [20] F. J. García de Abajo, “Nonlocal Effects in the Plasmons of Strongly Interacting Nanoparticles, Dimers, and Waveguides,” *J. Phys. Chem. C* **112**, 17983–17987 (2008).
- [21] R. Esteban, A. G. Borisov, P. Nordlander y J. Aizpurua, “Bridging quantum and classical plasmonics with a quantum-corrected model,” *Nat. Commun.* **302**, 825 (2012).
- [22] C. Ciraci, R. T. Hill, J. J. Mock, Y. Urzhumov, A. I. Fernández-Domínguez, S. Maier, J. B. Pendry, A. Chilkoti y D. R. Smith, “Probing the Ultimate Limits of Plasmonic Enhancement,” *Science* **337**, 1072–1074 (2012).

- [23] A. Bloch, “Inversion Applied to the Solution of 3Dimensional Electromagnetic Problems,” *J. Appl. Phys.* **18**, 1064–1071 (1947).
- [24] W. Lin y H. Jin, “Analytic solutions to the electrostatic problems of two dielectric spheres,” *J. Appl. Phys.* **67**, 624–630 (1990).
- [25] J. B. Pendry, A. I. Fernández-Domínguez, Y. Luo y R. Zhao, “Capturing photons with transformations optics,” *Nat. Phys.* **9**, 518–522 (2013).
- [26] R. L. Zhao, Y. Luo, A. I. Fernández-Domínguez y J. B. Pendry, “Description of van der Waals Interactions using Transformation Optics,” *Phys. Rev. Lett.* **111**, 033602 (2013).
- [27] P. Anger, P. Bharadwaj y L. Novotny, “Enhancement and quenching of single-molecule fluorescence,” *Phys. Rev. Lett.* **96**, 113002 (2006).
- [28] J. A. Gonzaga-Galeana y J. R. Zurita-Sánchez, “A revisitacion of the Förster energy transfer near a metallic spherical nanoparticle: (1) Efficiency enhancement or reduction? (2) The control of the Förster radius of the unbounded medium. (3) The impact of the local density of states,” *J. Chem. Phys.* **139**, 244302 (2013).
- [29] C. Henkel, J. Joulain, J.-P. Mulet y J.-J. Greffet, “Radiation forces on small particles in thermal near fields,” *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* **4**, s109–14 (2002).
- [30] V. V. Klimov y D. V. Guzatov, “Optical properties of an atom in the presence of a two-nanosphere cluster,” *Quantum Electron.* **37**, 209–230 (2007).
- [31] D. V. Guzatov y V. V. Klimov, “Optical properties of a plasmonic nano-antenna: an analytical approach,” *New J. Phys.* **13**, 053054 (2011).

- [32] M. Liu, T.-W. Lee, S. K. Gray, P. Guyot-Sionnest y M. Pelton, “Excitation of dark plasmons in metal nanoparticles by a localized emitter,” *Phys. Rev. Lett.* **102**, 107401 (2009).
- [33] A. Mohammadi, V. Sandoghdar y M. Agio, “Gold nanorods and nanospheroids for enhancing spontaneous emission,” *New J. Phys.* **10**, 105015 (2008).
- [34] V. Giannini, J. A. Sánchez-Gil, O. L. Muskens y J. G. Rivas, “Electrodynamic calculations of spontaneous emission coupled to metal nanostructures of arbitrary shape: nanoantenna-enhanced fluorescence,” *J. Opt. Soc. Am. B* **26**, 1569–1577 (2009).
- [35] J.-W. Liaw, J.-H. Chen, C.-S. Chen y M.-K. Kuo, “Purcell effect of nanoshell dimer on single molecule’s fluorescence,” *Opt. Express* **17**, 13532–13540 (2009).
- [36] S. D’Agostino, F. Della Sala y L. C. Andreani, “Dipole-excited surface plasmons in metallic nanoparticles: Engineering decay dynamics within the discrete-dipole approximation,” *Phys. Rev. B* **87**, 205413 (2013).
- [37] V. Rovinski, *Modeling of Curves and Surfaces with MATLAB* (Springer, New York, 2010), 2nd ed.
- [38] J. A. Stratton, *Electromagnetic Theory* (McGraw-Hill, New York, 1941).
- [39] N. Kuster, “Multiple Multipole Methods for Simulating EM Problems Involving Biological Bodies,” *IEEE T. Bio-Med. Eng.* **40**, 611–620 (1993).
- [40] C. Hafner, “The Multiple Multipole Method In Electro- and Magnetostatic Problems,” *IEEE T. Magn.* **19**, 2367–2370 (1983).

- [41] N. Kuster y H. Bomholt, “A Block Iterative Technique to Expand MMP’s Applicability to EM Problems of Higher Complexity,” *IEEE T. Microw. Theory* **42**, 875–883 (1994).
- [42] U. Kreibig, *Optical Properties of Metal Clusters* (Springer, New York, 1995), 1st ed.
- [43] U. Kreibig, “Electronic properties of small silver particles: the optical constants and their temperature dependence,” *J. Phys. F:Met. Phys.* **4**, 999–1014 (1974).
- [44] B. Persson, “Polarizability of small spherical metal particles: Influence of the matrix environment,” *Surf. Sci.* **281**, 153–162 (1993).
- [45] H. Hövel, S. Fritz, A. Hilger, U. Kreibig y M. Vollmer, “Width of cluster plasmon resonances: Bulk dielectric functions and chemical interface damping,” *Phys. Rev. B* **48**, 18178–18188 (1993).
- [46] A. Hilger, M. Tenfelde y U. Kreibig, “Silver nanoparticles deposited on dielectric surfaces,” *Appl. Phys. B* **73**, 361–372 (2011).
- [47] E. D. Palik, *Handbook of Optical Constants of Solids*, vol. 1 (Academic Press, San Diego, 1985).
- [48] E. Prodan y P. Nordlander, “Plasmon Hybridization in Spherical Nanoparticles,” *J. Chem. Phys.* **120**, 5444–5454 (2004).
- [49] E. Prodan, P. Nordlander, C. Ralloff y N. Halas, “A hybridization model for the plasmon resonance of complex nanostructures,” *Science* **302**, 419 (2003).
- [50] P. Nordlander, C. Oubre, E. Prodan, K. Li y M. Stockman, “Plasmon hybridization in nanoparticle dimers,” *Nano Lett.* **4**, 899–903 (2004).

- [51] R. Ruppin, “Surface modes of two spheres,” *Phys. Rev. B* **26**, 3440–3444 (1982).
- [52] V. V. Klimov y D. V. Guzatov, “Strongly localized plasmon oscillations in a cluster of two metallic nanospheres and their influence on spontaneous emission of an atom,” *Phys. Rev. B* **75**, 024303 (2007).
- [53] R. Zhao, Y. Luo, A. I. Fernández-Domínguez y J. B. Pendry, “Description of van der Waals Interactions using Transformation Optics,” *Phys. Rev. Lett.* **111**, 033602 (2013).
- [54] J. R. Zurita-Sánchez y A. I. Tec-Chim, “Quasi-static potential created by an oscillating dipole in the vicinity of two nanospheres (dimer): inversion transformation method,” *J. Opt.* **16**, 065002 (2014).
- [55] V. V. Klimov y D. V. Guzatov, “Plasmonic atoms and plasmonic molecules,” *Appl. Phys. A* **89**, 303–314 (2007).
- [56] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (John Wiley & Sons., Nueva York, 1986), 6th ed.
- [57] A. Bouhelier y L. Novotny, “Near-Field Optical Excitation and Detection of Surface Plasmons”, en *Springer Series in Optical Sciences*, vol. 131, M. Brongersma y PieterG. K. Eds., (Springer Holanda, 2007) Cap. 10.