



FACULTAD DE CIENCIAS

**Comportamiento electromagnético de
nanopartículas dieléctricas de alto índice de
refracción. Aplicaciones en células solares**

(Electromagnetic behavior of high refractive index dielectric
nanoparticles. Applications in solar cells)

Trabajo de Fin de Grado
para acceder al

Grado en Física

Autor: Pablo Lavín Pellón

Director: Fernando Moreno García

Co-Directora: Ángela Barreda Gómez

Junio - 2019

Agradecimientos

Me gustaría expresar mi agradecimiento a Fernando y Ángela por todo el tiempo dedicado durante estos meses. Desde el primer hasta el último momento me han tratado de la mejor manera y me han ayudado en todo lo que he necesitado.

Dedicatoria

A mi familia y mis seres queridos, sin ellos nada sería lo mismo.

Índice

| | |
|---|-----------|
| 1. Introducción | 6 |
| 1.1. Nanopartículas metálicas. Resonancias plasmónicas | 6 |
| 1.2. Nanopartículas dieléctricas de alto índice de refracción. Modos de galería su- surrante | 7 |
| 2. Objetivos y esquema de trabajo | 9 |
| 3. Teoría de Mie | 10 |
| 3.1. Resolución de las ecuaciones de onda eléctrica y magnética | 10 |
| 3.2. Secciones eficaces de absorción, dispersión y extinción | 11 |
| 3.3. Grado de polarización | 13 |
| 3.4. Aproximación de partículas pequeñas comparadas con la longitud de onda . | 15 |
| 4. Dispersión por esferas magnéticas. Condiciones de Kerker | 18 |
| 5. Métodos numéricos | 19 |
| 5.1. Método del elemento finito: COMSOL Multiphysics | 19 |
| 6. Aplicaciones | 20 |
| 6.1. Células solares | 20 |
| 6.2. Sistemas de comunicación. Nanoantenas | 21 |
| 6.3. Medicina | 21 |
| 6.4. Dispersión Raman superficialmente intensificada | 22 |
| 7. Resultados | 23 |
| 7.1. Partículas aisladas | 23 |
| 7.2. Dímeros de esferas | 28 |
| 7.3. Dímeros de cilindros | 38 |
| 8. Conclusiones y trabajo futuro | 47 |
| 8.1. Partículas aisladas | 47 |
| 8.2. Dímeros de esferas | 47 |
| 8.3. Dímeros de cilindros | 48 |
| 8.4. Trabajo futuro | 48 |

1. Introducción

La nanofotónica es el campo de la ciencia que estudia la interacción de la radiación electromagnética con la materia en la escala nanométrica. En los últimos años ha sido un campo en constante expansión y esto es debido a las propiedades que presenta tanto como a las aplicaciones, las cuales abarcan diversos sectores como la medicina, las comunicaciones o la producción de energía.

1.1. Nanopartículas metálicas. Resonancias plasmónicas

La plasmónica es una de las ramas de investigación más activas en el campo de la nanofotónica, la cual estudia la interacción entre la radiación electromagnética y estructuras metálicas. Un plasmón se define como las oscilaciones colectivas de los electrones libres de la densidad del gas de Fermi. En general, la radiación electromagnética viaja por todo el espacio y es difícil de confinar, sin embargo, bajo ciertas condiciones, cuando interacciona con materiales metálicos puede ser confinada, viajando sobre la superficie del metal, generando así lo que se conoce como un plasmón de superficie (SPs) (Fig. 1). Dependiendo de como los SPs sean excitados, existen dos tipos: los plasmones de superficie polaritones (SPPs) y los plasmones de superficie localizados (LSPs). Los primeros son excitados cuando la radiación electromagnética incide sobre una superficie plana que separa dos medios, uno dieléctrico y otro metálico. Los segundos son excitados cuando la radiación electromagnética ilumina una nanopartícula (NP) metálica más pequeña que la longitud de onda de la radiación incidente [1]. En el contexto de este trabajo los LSPs tienen un mayor interés.

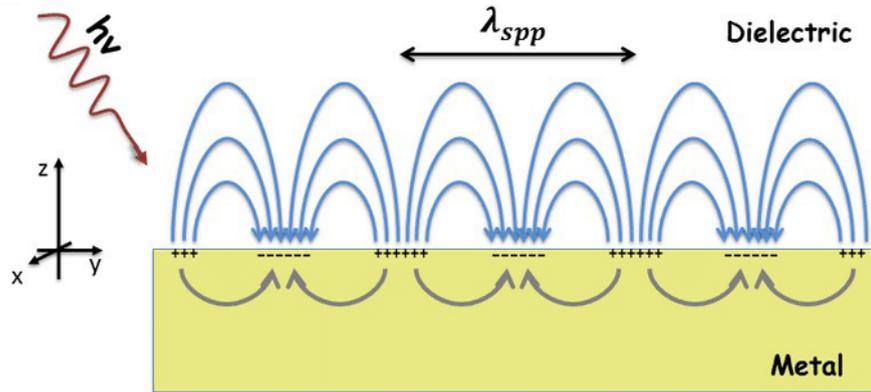


Figura 1: Plasmones de superficie [2].

Para determinadas longitudes de onda de la radiación incidente, se producen oscilaciones de los electrones libre, y cuando la oscilación es máxima se produce una resonancia. Estas oscilaciones coherentes de los electrones son los LSPs y cambian en función de la relación entre la forma y tamaño de la NP y la longitud de onda de la radiación incidente. En este caso, la energía electromagnética es transferida a los electrones libres del metal, generando una gran concentración del campo electromagnético (en inglés conocido como hot-spot) en las proximidades de la estructura metálica.

Esta transferencia de energía tiene numerosas aplicaciones en sensores (contaminación, biomedicina) [3, 4], análisis de materiales (dispersión de Raman superficialmente intensificada, abreviado en inglés como SERS) [5, 6], células solares [7] y comunicaciones (nanoantenas [8, 9]).

Cuando el tamaño de la NP es pequeña comparada con la longitud de onda de la radiación incidente, entonces la distribución de carga es de tipo dipolar (Fig. 2).

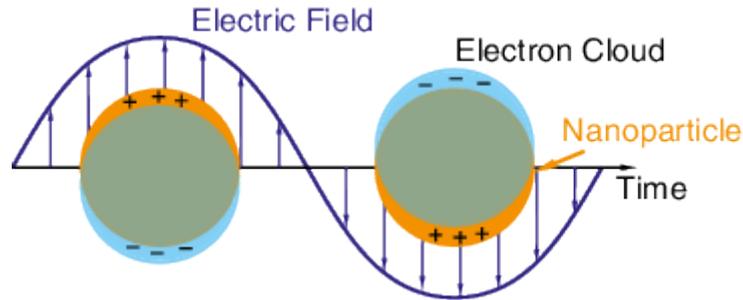


Figura 2: Esquema de un plasmón localizado en una NP metálica pequeña comparada con la longitud de onda de la radiación incidente [10].

1.2. Nanopartículas dieléctricas de alto índice de refracción. Modos de galería susurrante

Hasta ahora hemos visto el interés del uso de nanopartículas metálicas en muchas aplicaciones, pero tienen un gran inconveniente, las pérdidas en forma de calor por el efecto Joule. En el rango VIS-NIR los metales pueden absorber la radiación incidente produciendo el calentamiento de las nanopartículas y las correspondientes pérdidas óhmicas. Es por esto que nuevas estructuras han sido desarrolladas utilizando nanopartículas dieléctricas de alto índice de refracción (HRI: High Refractive Index en inglés). A diferencia de las NPs metálicas, las NPs HRI no presentan absorción en el rango VIS-NIR. Además, a los efectos eléctricos se le suman los efectos magnéticos. Esto es debido a que en las nanopartículas HRI no hay electrones libres (están hechas típicamente con materiales semiconductores) por lo que no hay resonancias plasmónicas y son ciertas distribuciones de las corrientes de desplazamiento las que producen dichos efectos eléctricos y magnéticos. Dichas corrientes son originadas por la polarización de átomos o moléculas, de manera que los modos dipolar eléctrico y magnético se asocian con un desplazamiento lineal o circular dentro de la NP, respectivamente. Estas resonancias magnéticas se observan cuando la longitud de onda de la radiación incidente es igual que el diámetro de la NP [11]. Además, la longitud de onda a la que se produce la resonancia depende del tamaño y forma de la NP y de los índices de refracción de la NP y del medio que la rodea.

Las corrientes de desplazamiento conducen a los modos de galería susurrante, que pueden ser entendidos como rayos encerrados en una cavidad esférica soportados por múltiples reflexiones internas totales (Fig. 3). Este nombre se le atribuye por la catedral de St. Paul en Londres, en donde las ondas sonoras interfieren constructivamente de manera que dos personas en puntos contrarios de la cúpula se pueden escuchar una a la otra [12].

Debido a los efectos coherentes entre los efectos eléctricos y magnéticos, las NPs HRI pueden ser usadas para controlar la direccionalidad de la radiación dispersada. Bajo ciertas condiciones, conocidas como las condiciones de Kerker [13], la radiación dispersada por una partícula esférica HRI puede ser concentrada hacia atrás (segunda condición de Kerker) o hacia adelante (primera condición de Kerker), consiguiendo en este último caso que la radiación dispersada hacia detrás sea nula [14].

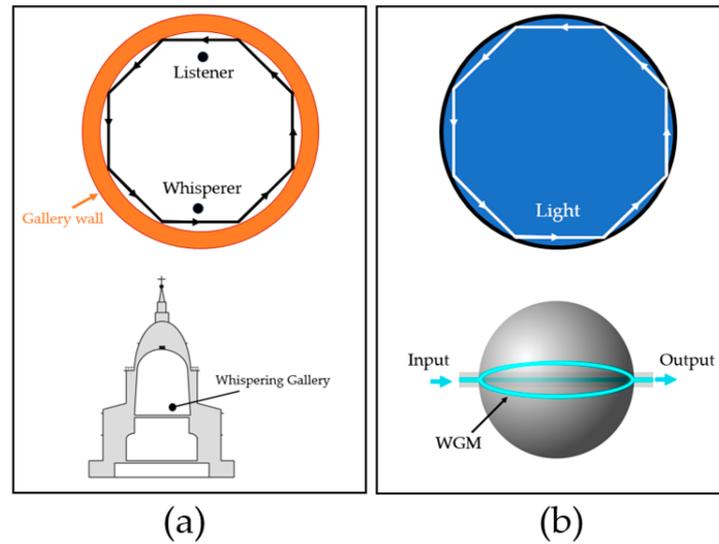


Figura 3: Ilustración de los modos de galería susurrante en (a) la catedral de St. Paul con ondas acústicas y (b) una NP esférica con ondas electromagnéticas [15].

2. Objetivos y esquema de trabajo

En este trabajo se ha estudiado la interacción electromagnética con nanopartículas dieléctricas de alto índice de refracción (en este caso de silicio), tanto en el caso aislado como cuando dos nanopartículas forman un dímero, con el objetivo de aumentar la absorción de energía en las células solares aumentando así su eficiencia. El trabajo se ha llevado a cabo para distintas geometrías con el objetivo de ver que geometría es más óptima. Para entender correctamente la interacción electromagnética se han estudiado espectros de extinción, espectros del parámetro de asimetría g , diagramas de intensidad dispersada en campo lejano y mapas de campo cercano.

A pesar de que la plasmónica sea una rama muy estudiada en la nanofotónica hoy en día, como ya se ha comentado, las partículas metálicas presentan pérdidas en forma de calor en el rango VIS-NIR y aunque esto puede no ser un inconveniente en otras aplicaciones, cuando se tiene como objetivo mejorar el aprovechamiento de energía en las células solares supone un problema, por este motivo en este trabajo no se han estudiado NPs metálicas y solo se han estudiado NPs HRI de silicio.

Antes de analizar ningún resultado es preciso entender algunos aspectos teóricos. En este trabajo se ha comenzado estudiando la teoría de Mie, que resuelve de manera analítica el campo dispersado y absorbido por una partícula esférica. Además, para poder resolver otras geometrías, se ha estudiado el caso de partículas pequeñas comparadas con la longitud de onda, puesto que este trabajo se desarrolla bajo la aproximación dipolar. Por último se han estudiado las propiedades direccionales de las nanopartículas dieléctricas HRI, especialmente las condiciones de Kerker (las cuales se han comentado brevemente en la sección anterior y se verán con más detenimiento en la sección 4). Dichas condiciones son muy interesantes puesto que existe la posibilidad de gobernar la dirección de la radiación electromagnética dispersada, lo cual es muy útil para redirigir la radiación hacia el sustrato de las células solares, mejorando así la absorción y el aprovechamiento de energía.

Para poder llevar a cabo el trabajo se ha usado el software COMSOL Multiphysics el cual implementa el método del elemento finito, un método de aproximación que permite resolver ecuaciones diferenciales muy complejas.

En cuanto a los casos estudiados se dividen en tres: partículas aisladas, dímero formado por dos esferas y dímero formado por dos cilindros. En el caso de las partículas aisladas se han estudiado distintas geometrías: esfera, cilindro, cubo y paralelepípedo. En todos los casos se han elegido geometrías con un volumen equivalente al de una esfera con un radio de 150 nm. Recordemos que la longitud de onda a la que se produce la resonancia varía con la forma y el tamaño de la NP, por eso aquí se fija el volumen de las NPs y poder así estudiar mejor la influencia de la geometría.

En cuanto al caso de los dímeros, tanto esferas como cilindros, se han utilizado cinco distancias para el gap entre las NPs: 4, 10, 50, 100 y 300 nm. Con el fin de estudiar mejor la interacción entre las NPs que forman el dímero se han estudiado dos polarizaciones, en el eje X y en el eje Y.

3. Teoría de Mie

En 1908, Gustav Mie dio una solución analítica a las ecuaciones de Maxwell para la dispersión y absorción de radiación electromagnética por partículas esféricas [16].

3.1. Resolución de las ecuaciones de onda eléctrica y magnética

En un medio lineal, isótropo y homogéneo, un campo electromagnético (\mathbf{E}, \mathbf{H}) debe cumplir la ecuación de onda:

$$\nabla^2 \mathbf{E} + k^2 \mathbf{E} = 0, \quad \nabla^2 \mathbf{H} + k^2 \mathbf{H} = 0, \quad (3.1)$$

donde $k^2 = \omega^2 \epsilon \mu$, siendo ϵ la permitividad eléctrica y μ la permeabilidad magnética. Además, la divergencia de dichos campos debe ser nula:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{H} = 0, \quad (3.2)$$

por lo tanto, \mathbf{E} y \mathbf{H} no son independientes:

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu\mathbf{H}, \quad \nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\epsilon\mathbf{E}. \quad (3.3)$$

Dada una función escalar ψ y un vector arbitrario constante \mathbf{c} , se puede construir una función vectorial \mathbf{M} :

$$\mathbf{M} = \nabla \times (\mathbf{c}\psi), \quad (3.4)$$

con divergencia nula.

Mediante relaciones vectoriales, se comprueba que si ψ satisface la ecuación de onda escalar, entonces \mathbf{M} satisface la ecuación de onda vectorial.

A partir de \mathbf{M} , se puede construir otra función vectorial con divergencia nula y que cumpla la ecuación de onda vectorial:

$$\mathbf{N} = \frac{\nabla \times \mathbf{M}}{k}, \quad (3.5)$$

donde \mathbf{M} y \mathbf{N} son llamados los vectores armónicos.

Las funciones \mathbf{M} y \mathbf{N} tienen las propiedades de un campo electromagnético, siendo análogas a los campos \mathbf{E} y \mathbf{H} . De esta manera, el problema inicial que implicaba resolver las ecuaciones 3.1 se ha simplificado a resolver la ecuación de onda escalar de la función ψ , la cual se conoce como la función generadora de los vectores armónicos \mathbf{M} y \mathbf{N} .

Debido a la simetría esférica, la función escalar elegida para generar los vectores armónicos es tal, que satisfaga la ecuación de ondas escalar en coordenadas esféricas:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + k^2 \psi = 0. \quad (3.6)$$

Usando el método de separación de variables se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + m^2\Phi = 0, \quad (3.7)$$

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right] \Theta = 0, \quad (3.8)$$

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + [k^2 r^2 - n(n+1)] R = 0. \quad (3.9)$$

Las funciones generadoras que satisfacen la ecuación de onda escalar en coordenadas esféricas son:

$$\psi_{emn} = \cos(m\phi) P_n^m(\cos\theta) z_n(kr), \quad (3.10)$$

$$\psi_{omn} = \sin(m\phi) P_n^m(\cos\theta) z_n(kr), \quad (3.11)$$

donde ψ_{emn} es la solución par y ψ_{omn} la solución impar, $P_n^m(\cos\theta)$ son los primeros polinomios asociados de Legendre de grado n y orden m y $z_n(kr)$ es cualquiera de las cuatro funciones esféricas de Bessel $j_n, y_n, h_n^{(1)}, h_n^{(2)}$.

Los armónicos esféricos vectoriales generados por ψ_{emn} y ψ_{omn} (sustituyendo en las expresiones 3.4-3.5 y tomando \mathbf{c} como el vector radial) son $\mathbf{M}_{emn}, \mathbf{M}_{omn}, \mathbf{N}_{emn}, \mathbf{N}_{omn}$. De esta manera, cualquier solución a las ecuaciones de campo puede ser expandida en una serie infinita de estos armónicos, conocidos también como los modos normales de una partícula esférica. Bajo ciertas condiciones un único modo puede ser excitado, pero en general, el campo dispersado es una superposición de estos modos con los correspondientes coeficientes a_n y b_n , los cuales se indican más adelante. Dichos coeficientes son el peso en el desarrollo en armónicos esféricos, y están asociados a las distribuciones multipolares, siendo a_1 y b_1 , los términos correspondientes a la distribución dipolar eléctrica y magnética, mientras que a_2 y b_2 son los términos correspondientes a la distribución cuadrupolar eléctrica y magnética, respectivamente.

3.2. Secciones eficaces de absorción, dispersión y extinción

Si suponemos una onda plana polarizada en el eje X, incidiendo en una esfera homogénea e isotrópica, podemos expandir el campo incidente en una serie infinita de armónicos, obteniendo como resultado:

$$\mathbf{E}_i = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(\mathbf{M}_{oln}^{(1)} - i \mathbf{N}_{eln}^{(1)} \right), \quad (3.12)$$

donde $E_n = i^n E_0 (2n+1)/n(n+1)$, el superíndice (1) hace referencia a la primera función esférica de Bessel. El campo \mathbf{H}_i se obtiene a partir del rotacional de \mathbf{E}_i .

A través de las condiciones de contorno, la ortogonalidad de los vectores armónicos y la forma de la expansión del campo incidente se obtienen los campos dentro de la esfera y dispersados, siendo este último:

$$\mathbf{E}_s = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left(i a_n \mathbf{N}_{eln}^{(3)} - b_n \mathbf{M}_{oln}^{(3)} \right), \quad (3.13)$$

donde el superíndice (3) hace referencia a la función $h_n^{(1)} = j_n + iy_n$. Los coeficientes de expansión en la serie vienen dados por las siguientes expresiones:

$$a_n = \frac{\mu m^2 j_n(mx) [x j_n(x)]' - \mu_1 j_n(x) [m x j_n(mx)]'}{\mu m^2 j_n(mx) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 h_n^{(1)}(x) [m x j_n(mx)]'}, \quad (3.14)$$

$$b_n = \frac{\mu_1 j_n(mx) [x j_n(x)]' - \mu j_n(x) [m x j_n(mx)]'}{\mu_1 j_n(mx) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu h_n^{(1)}(x) [m x j_n(mx)]'}, \quad (3.15)$$

donde μ y μ_1 son las permeabilidades magnéticas del medio que rodea la partícula y de la partícula, respectivamente. Al cociente $m = N_1/N$ se le denomina índice de refracción relativo, siendo N y N_1 los índices del medio que rodea la partícula y de la partícula, respectivamente.

El argumento que aparece en las funciones de Bessel es el parámetro de tamaño, x , el cual se relaciona con el índice de refracción del medio, N , con el radio de la partícula, a , y con la longitud de onda de la radiación incidente, λ , según la siguiente expresión:

$$x = \frac{2\pi N a}{\lambda}.$$

En el caso del campo absorbido los coeficientes se obtienen de una manera similar, siendo estos c_n y d_n .

Mediante los coeficientes a_n y b_n se pueden expresar las secciones eficaces de dispersión, extinción y absorción:

$$C_{sca} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (|a_n|^2 + |b_n|^2), \quad (3.16)$$

$$C_{ext} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \text{Re}(a_n + b_n), \quad (3.17)$$

$$C_{abs} = C_{ext} - C_{sca}. \quad (3.18)$$

A partir de las secciones eficaces se definen las eficiencias de dispersión, extinción y absorción:

$$Q_{sca} = \frac{C_{sca}}{G}, \quad Q_{ext} = \frac{C_{ext}}{G}, \quad Q_{abs} = \frac{C_{abs}}{G}, \quad (3.19)$$

siendo $G = \pi r^2$ el área de la partícula proyectado en un plano perpendicular al de la onda incidente.

Además de lo anterior, podemos definir el parámetro de asimetría, también conocido como parámetro g :

$$g = \langle \cos \theta \rangle = \int_{4\pi} p \cos \theta d\Omega, \quad (3.20)$$

donde p es la función de fase. Si la partícula dispersa la luz preferentemente hacia adelante g es positivo, mientras que si por el contrario dispersa más luz hacia atrás g es negativo.

3.3. Grado de polarización

El campo incidente puede ser expresado en función de las componentes paralelas y perpendicular al plano de dispersión, definido por las direcciones de la radiación incidente y dispersada (Fig. 4).

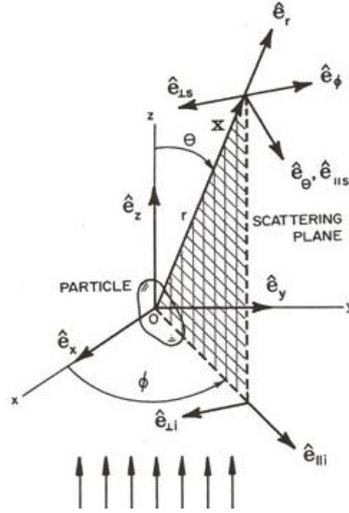


Figura 4: Rayo de luz incidente propagándose en el eje z e incidendo sobre una partícula. En la imagen se representa el plano de dispersión [16].

Para una esfera homogénea e isotrópica, la relación entre las componentes paralela y perpendicular del campo incidente y del campo dispersado es:

$$\begin{pmatrix} E_{\parallel s} \\ E_{\perp s} \end{pmatrix} = \frac{e^{ik(r-z)}}{-ikr} \begin{pmatrix} S_2 & 0 \\ 0 & S_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\parallel i} \\ E_{\perp i} \end{pmatrix}, \quad (3.21)$$

donde:

$$S_1 = \sum_n \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \pi_n + b_n \tau_n), \quad (3.22)$$

$$S_2 = \sum_n \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \tau_n + b_n \pi_n). \quad (3.23)$$

Las funciones π_n y τ_n se relacionan con los polinomios de Legendre de grado n y orden 1 mediante las siguientes expresiones:

$$\pi_n = \frac{P_n^1}{\sin \theta}, \quad \tau_n = \frac{dP_n^1}{d\theta}. \quad (3.24)$$

Estas funciones se obtienen mediante las siguientes relaciones de recurrencia:

$$\pi_n = \frac{2n-1}{n-1} \mu \pi_{n-1} - \frac{n}{n-1} \pi_{n-2}, \quad (3.25)$$

$$\tau_n = n\mu \pi_n - (n+1)\pi_{n-1}, \quad (3.26)$$

donde $\mu = \cos \theta$, $\pi_0 = 0$ y $\pi_1 = 1$.

La intensidad dispersada paralela al plano de dispersión es:

$$i_{\parallel} = |S_2|^2. \quad (3.27)$$

La intensidad dispersada perpendicular al plano de dispersión es:

$$i_{\perp} = |S_1|^2. \quad (3.28)$$

El grado de polarización se define según la siguiente expresión:

$$P = \frac{i_{\perp} - i_{\parallel}}{i_{\perp} + i_{\parallel}}. \quad (3.29)$$

Si P es positivo, entonces la luz dispersada está parcialmente (o total si $P = 1$) polarizada perpendicular al plano de dispersión. Si por el contrario es negativo, entonces la luz dispersada está parcialmente (o total si $P = -1$) polarizada paralela al plano de dispersión.

Este parámetro contiene mucha información sobre el sistema estudiado. Se puede conocer la distribución de carga que está originando la resonancia, el tamaño de la partícula o en el caso de dímeros, la mayor y menor interacción entre las partícula que lo constituyen.

Una de las medidas más importantes que se lleva a cabo frecuentemente es el grado de polarización a 90° , lo que implica medir la intensidad dispersada perpendicular a la dirección de la radiación incidente.

Tomando únicamente los términos correspondientes al desarrollo dipolar y cuadrupolar del campo dispersado, lo cual es una buena aproximación en muchos casos, se puede obtener la siguiente expresión:

$$P(90^\circ) = \frac{(9a_1 - 15b_2)^2 - (9b_1 - 15a_2)^2}{(9a_1 - 15b_2)^2 + (9b_1 - 15a_2)^2}, \quad (3.30)$$

donde se ha considerado que la permeabilidad magnética del medio y de la partícula es $\mu = \mu_1 = 1$.

Si los términos de la distribución cuadrupolar son despreciables, la ecuación 3.30 se simplifica según la siguiente expresión:

$$P(90^\circ) = \frac{|a_1|^2 - |b_1|^2}{|a_1|^2 + |b_1|^2}, \quad (3.31)$$

donde se puede comprobar que si el valor de P es positivo predomina el dipolo eléctrico, mientras que si es negativo los del dipolo magnético.

Si los efectos magnéticos son despreciables, los coeficientes b_n son despreciables, y la ecuación 3.30 se simplifica según la siguiente expresión:

$$P(90^\circ) = \frac{9|a_1|^2 - 25|a_2|^2}{9|a_1|^2 + 25|a_2|^2}, \quad (3.32)$$

donde se puede comprobar que si P tiene un valor positivo la distribución de carga será dipolar, mientras que si es negativo la distribución de carga será cuadrupolar.

3.4. Aproximación de partículas pequeñas comparadas con la longitud de onda

A partir de la expansión en serie de potencias de las funciones esféricas de Bessel, $j_n(\rho)$ e $y_n(\rho)$ se pueden expandir las funciones $\psi_1(\rho) = \rho j_1(\rho)$ y $\xi_1(\rho) = \rho h_1^{(1)}(\rho)$ que aparecen en las expresiones de los coeficientes de dispersión a_n y b_n . Teniendo en cuenta los primeros términos se obtienen las siguientes expresiones:

$$\psi_1(\rho) \simeq \frac{\rho^2}{3} - \frac{\rho^4}{30}, \quad \psi_1'(\rho) \simeq \frac{2\rho}{3} - \frac{2\rho^3}{15}, \quad (3.33)$$

$$\xi_1(\rho) \simeq -\frac{i}{\rho} - \frac{i\rho}{2} + \frac{\rho^2}{3}, \quad \xi_1'(\rho) \simeq \frac{i}{\rho^2} - \frac{i}{2} + \frac{2\rho}{3}, \quad (3.34)$$

$$\psi_2(\rho) \simeq \frac{\rho^3}{15}, \quad \psi_2'(\rho) \simeq \frac{\rho^2}{5}, \quad (3.35)$$

$$\xi_2(\rho) \simeq -\frac{3i}{\rho^2}, \quad \xi_2'(\rho) \simeq \frac{6i}{\rho^3}. \quad (3.36)$$

A partir de las expresiones anteriores obtenemos la expansión en serie de potencias de los coeficientes de dispersión a_1 , b_1 , a_2 y b_2 hasta términos de orden 6:

$$a_1 = -\frac{2ix^3}{3} \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} - \frac{2ix^5}{5} \frac{(m^2 - 2)(m^2 - 1)}{(m^2 + 2)^2} + \frac{4x^6}{9} \left(\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right)^2 + O(x^7), \quad (3.37)$$

$$b_1 = -\frac{ix^5}{45} (m^2 - 1) + O(x^7), \quad (3.38)$$

$$a_2 = -\frac{ix^5}{15} \frac{m^2 - 1}{2m^2 + 3} + O(x^7), \quad (3.39)$$

$$b_2 = O(x^7), \quad (3.40)$$

donde se ha tomado la permeabilidad magnética de la partícula igual que la del medio ($\mu_1 = \mu = 1$). Si $|m|x \ll 1$ (donde recordemos m es el índice de refracción relativo y x el parámetro de tamaño), entonces $|b_1| \ll |a_1|$ y se tiene que:

$$a_1 = -\frac{2ix^3}{3} \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2}, \quad (3.41)$$

siendo el resto de términos a_n y b_n de orden x^5 y superiores y por lo tanto despreciables.

Si por el contrario, la permeabilidad magnética de la partícula (μ) es distinta que la del medio que la rodea ($\mu_1 = 1$), el coeficiente b_1 toma la siguiente expresión [1]:

$$b_1 = -\frac{2ix^3}{3} \frac{\mu - 1}{\mu + 2}. \quad (3.42)$$

Si la luz incidente, I_i , no está polarizada, la intensidad dispersada I_S es:

$$I_S = \frac{8\pi^4 N a^6}{\lambda^4 r^2} \left| \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right|^2 (1 + \cos^2 \theta) I_i. \quad (3.43)$$

En la Ec. 3.43 no se tiene en cuenta la polarización de la radiación incidente, pero es importante recordar que la distribución angular de radiación dispersada depende de la polarización de la radiación incidente.

En el caso de que la radiación incidente esté polarizada paralela al plano de dispersión, la intensidad dispersada, bajo esta aproximación, es:

$$i_{\parallel} = \frac{9|a_1|^2}{4k^2 r^2} \cos^2 \theta. \quad (3.44)$$

En el caso de que la radiación incidente esté polarizada perpendicular al plano de dispersión, la intensidad dispersada, bajo esta aproximación, es:

$$i_{\perp} = \frac{9|a_1|^2}{4k^2 r^2}. \quad (3.45)$$

Si la radiación incidente no está polarizada, entonces se tiene que:

$$i = \frac{1}{2}(i_{\parallel} + i_{\perp}). \quad (3.46)$$

Puesto que cada polarización es dispersada de distinta manera, si la luz incidente no está polarizada, la radiación dispersada estará parcialmente polarizada. Sustituyendo las ecuaciones 3.44 y 3.45 en la Ec. 3.29 se obtiene:

$$P = \frac{1 - \cos^2 \theta}{1 + \cos^2 \theta}. \quad (3.47)$$

Puesto que P es siempre positivo, la luz dispersada está polarizada parcialmente perpendicular al plano de dispersión.

A continuación, en la Fig. 5 se muestra la intensidad dispersada por una esfera pequeña comparada con la longitud de onda cuando la radiación incidente está polarizada paralela o perpendicular al plano de dispersión y cuando no está polarizada, de acuerdo con lo visto bajo esta aproximación. Además, en la Fig. 6 se muestra el grado de polarización de acuerdo con la ecuación 3.47.

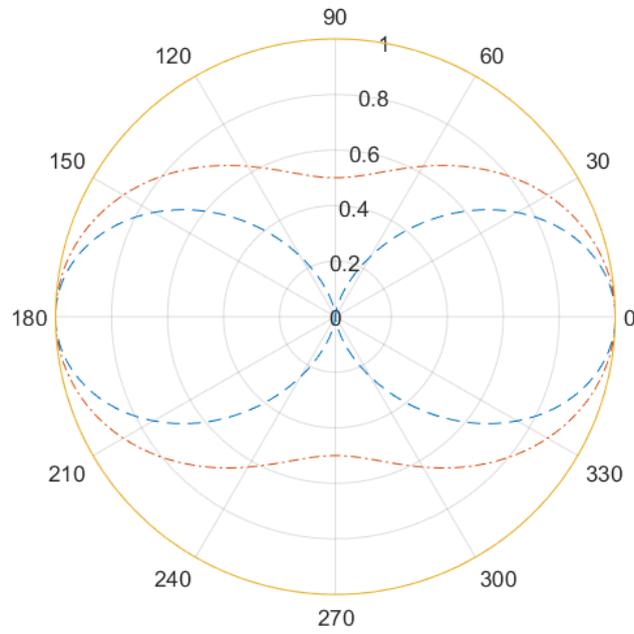


Figura 5: Distribución angular normalizada de la luz dispersada por una esfera pequeña comparada con la longitud de onda. Se muestran tres casos: luz incidente polarizada paralela al plano de dispersión (en azul, - - -), luz incidente polarizada perpendicular al plano de dispersión (en amarillo, línea continua), luz incidente no polarizada (en rojo, - · -).

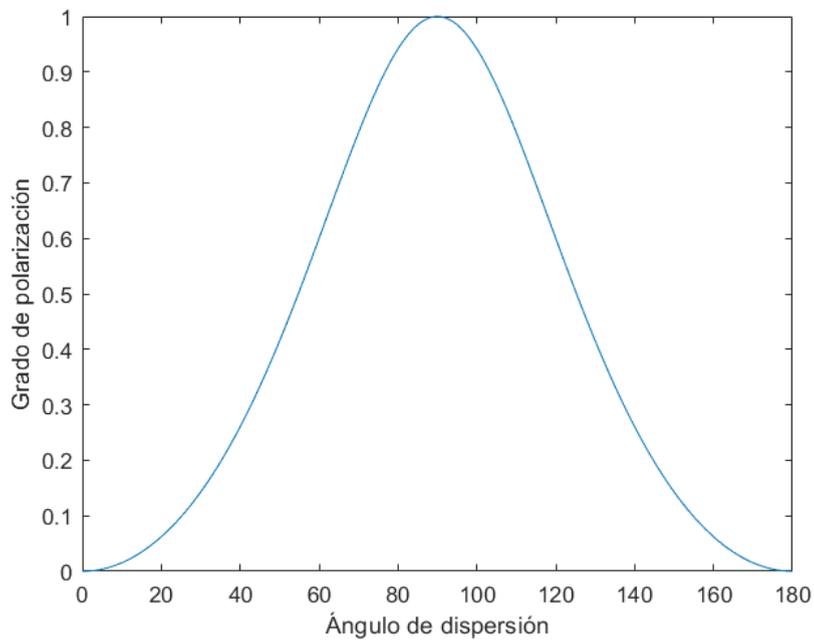


Figura 6: Grado de polarización para una esfera pequeña comparada con la longitud de onda para luz incidente no polarizada.

4. Dispersión por esferas magnéticas. Condiciones de Kerker

Kerker *et al.* [13] estudiaron en 1982 efectos inusuales en la dispersión producida por esferas magnéticas pequeñas comparadas con la longitud de onda de la radiación incidente.

Sustituyendo los coeficientes a_1 y b_1 obtenidos bajo la aproximación de partícula pequeña comparada con la longitud de onda (ecuaciones 3.41 y 3.42) en las expresiones 3.22 y 3.23 (tomando $n = 1$), se obtienen las intensidades dispersadas paralela y perpendicular al plano de dispersión (ecuaciones 3.27 y 3.28), respectivamente:

$$I_{\parallel} = \left| ix^3 \left[\left(\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} \right) \cos \theta + \left(\frac{\mu - 1}{\mu + 2} \right) \right] \right|^2, \quad (4.1)$$

$$I_{\perp} = \left| ix^3 \left[\left(\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} \right) + \left(\frac{\mu - 1}{\mu + 2} \right) \cos \theta \right] \right|^2. \quad (4.2)$$

Cuando $\epsilon = \mu$ ambos dipolos (eléctrico y magnético) oscilan en fase, (se verifica que $a_1 = b_1$) y la intensidad dispersada hacia atrás ($\theta = 180^\circ$) es nula, de manera que toda la intensidad es dispersada hacia adelante ($\theta = 0^\circ$). Esta condición es conocida como primera condición de Kerker (o Zero-Backward en inglés, abreviado como ZB).

La segunda condición de Kerker se da cuando:

$$\epsilon = \frac{4 - \mu}{2\mu + 1}, \quad (4.3)$$

de manera que toda la radiación es dispersada hacia detrás ($\theta = 180^\circ$) y la radiación dispersada hacia adelante ($\theta = 0^\circ$) es casi nula. En [17] se comprueba que si $\epsilon = -2$ y $\mu = -2$, se verifican ambas condiciones de Kerker de manera simultánea, sin embargo, los efectos magnéticos y eléctricos no se compensan y como resultado la intensidad dispersada hacia adelante ($\theta = 0^\circ$) no es nula.

5. Métodos numéricos

5.1. Método del elemento finito: COMSOL Multiphysics

COMSOL Multiphysics [18] es un software comercial que permite analizar, simular y resolver muchos problemas de física o de ingeniería, entre otros. En este caso se ha usado el módulo de radio frecuencia, el cual resuelve las ecuaciones diferenciales de Maxwell (en el dominio de la frecuencia) con unas condiciones de contorno. Este software se basa en el método de los elementos finitos, para aproximar la solución de ecuaciones diferenciales parciales que puedan resultar muy complejas.

Este software permite reproducir cualquier configuración deseada, eligiendo tanto la geometría como la onda incidente y su polarización.

En este caso, la geometría a estudiar está en el centro de una esfera homogénea de aire de radio $\lambda/2$. Además, se coloca una capa perfectamente absorbente de grosor $\lambda/4$ que absorba el campo dispersado en los contornos, de manera que el campo no se vaya al infinito. Para poder resolver cualquier problema, este debe ser discretizado. En la Fig. 7 se muestra la discretización elegida en este trabajo, basada en tetraedros. Además, la malla se ha elegido suficientemente fina para que el problema converja.

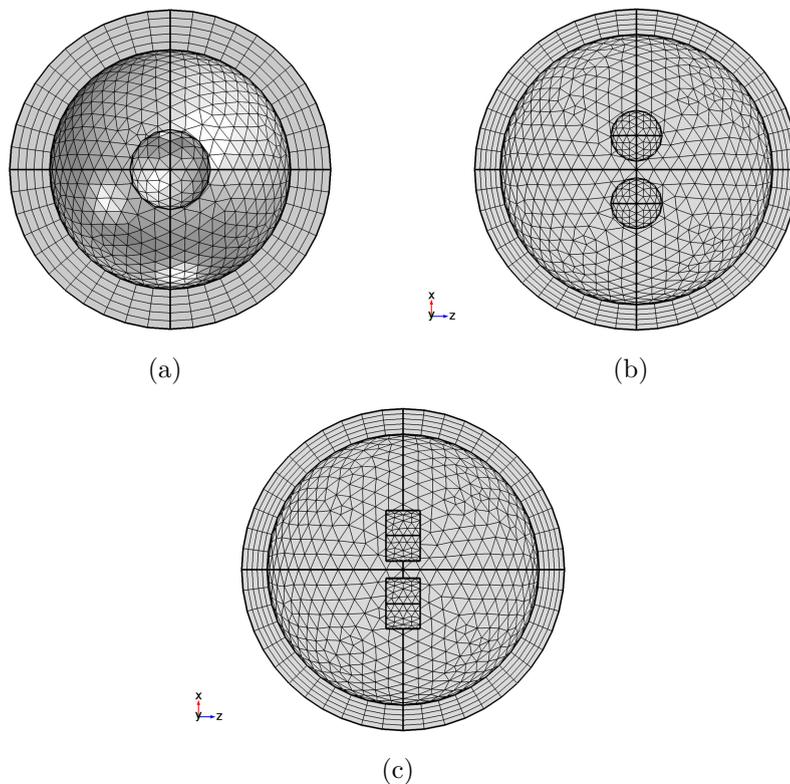


Figura 7: Malla elegida en los cálculos realizados. Se muestran tres casos: (a) partícula aislada, (b) dímero de esferas y (c) dímero de cilindros. Como se puede observar la malla usa tetraedros para discretizar el problema.

6. Aplicaciones

En las últimas décadas la nanotecnología ha revolucionado la ciencia. La posibilidad de manipular materiales a escala nanométrica ha generado grandes avances en distintos campos de la ciencia como por ejemplo en la medicina o en las comunicaciones.

La nanofotónica ha supuesto un campo de estudio muy importante en los últimos años. Estudiar la interacción de la radiación electromagnética con partículas en la escala nanométrica ha mostrado grandes propiedades y aplicaciones, gracias a las grandes concentraciones de energía que se generan en las resonancias plasmónicas o a los efectos direccionales que presentan las NPs HRI.

6.1. Células solares

En el mercado actual las células solares están basadas en superficies de silicio con espesores entre 180-300 μm , y la mayor parte del precio de las células proviene de los costes de los materiales y el procesado. Por eso, desde hace años, hay un interés en conseguir superficies con mucho menos espesor, entre 1-2 μm , de manera que permita reducir los costes.

Puesto que todas las células solares usan semiconductores, una limitación en la tecnología existente es que la absorbancia cerca del gap es menor, sobretodo en semiconductores con un gap indirecto, como el caso del silicio. Además, esta absorbancia se vería aún más disminuida si se utilizan películas muy delgadas. Por esto, es muy importante estructurar las películas delgadas en las células solares para que la luz quede confinada en el interior y aumentar así la absorbancia. Una manera de conseguir atrapar la radiación electromagnética en estas películas delgadas en las células solares es mediante el uso de nanoestructuras metálicas y los plasmones de superficie. En [7] se explican tres maneras en las que los plasmones pueden ayudar a reducir el espesor de las capas fotovoltaicas (Fig. 8). En primer lugar, las nanopartículas metálicas pueden ser usadas como elementos de dispersión para acoplar y confinar las ondas electromagnéticas provenientes del sol en una capa absorbente. En segundo lugar, las nanopartículas metálicas pueden ser utilizadas como pequeñas antenas en donde los plasmones son acoplados al material semiconductor, aumentando la sección eficaz de absorción. Por último, una película metálica ondulada detrás de la capa absorbente de la célula fotovoltaica puede acoplar la radiación electromagnética emitida por el sol en SPPs (plasmones de superficie polaritones) atrapándola y guiándola.

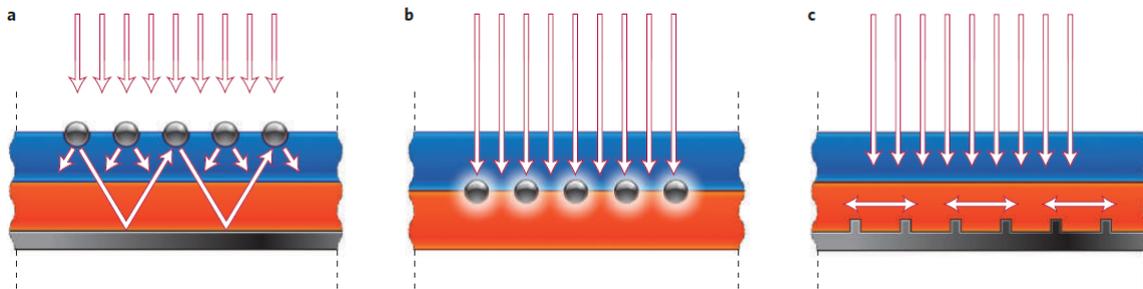


Figura 8: Plasmones en células solares: (a) la luz es confinada por la dispersión de las nanopartículas metálicas en la superficie de la célula solares, (b) la excitación de plasmones de superficie localizados aumenta el campo en los alrededores de las NPs lo que aumenta la absorción de luz y (c) la luz es atrapada por la excitación de SPPs [7].

6.2. Sistemas de comunicación. Nanoantenas

Poder gobernar las propiedades direccionales de la luz gracias a las nanopartículas dieléctricas de alto índice de refracción está haciendo de los sistemas de comunicación óptica ultra rápida una realidad cada día más cercana [8].

Las partículas de alto índice de refracción se diferencian de las metálicas por las resonancias magnéticas que presentan. Este hecho añadido a la direccionalidad que proporcionan ha permitido la creación de nanoantenas (Fig. 9) que permiten redirigir la energía electromagnética que se propaga en el espacio en modos localizados de dimensiones inferiores a la longitud de onda de la radiación. Además, estas nanoantenas muestran una mayor eficiencia energética que las metálicas [19].

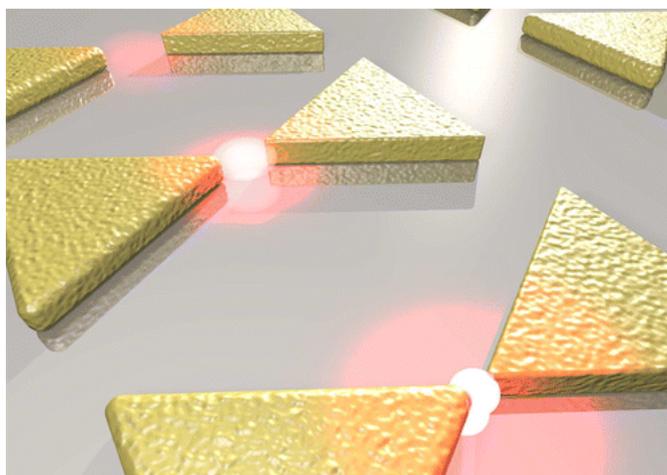


Figura 9: Nanoantenas. En el gap entre los componentes del dímero se forman grandes concentraciones de campo electromagnético. [20].

6.3. Medicina

En el campo de la medicina ha sido posible mejorar la detección de partículas virales, estudiando las resonancias plasmónicas en diferentes nanopartículas metálicas. Además, se han realizado pruebas con nanopartículas de oro combatiendo la gripe [21].

En el caso de las nanopartículas de plata, debido a su actividad antibacterial, son usadas como recubrimientos en algunos implantes o para curar quemaduras. En general, numerosas prótesis son cubiertas con esta clase de nanopartículas [22].

Otra aplicación en el campo de la medicina, es el tratamiento del cáncer (Fig. 10). Existen terapias que usan nanopartículas con un núcleo dieléctrico y una cubierta de oro, ya que estas presentan resonancias en el infrarrojo cercano. Cuando las partículas son introducidas en el cuerpo, se adhieren preferentemente a las células cancerígenas, de manera que cuando se incide con radiación de la frecuencia de resonancia las partículas absorben y por el efecto Joule aumentan su temperatura destruyendo las células cancerígenas y dejando las células sanas intactas [21] [23].

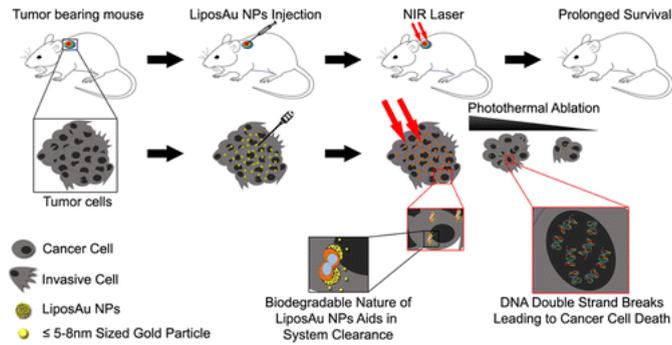


Figura 10: Esquema del tratamiento de cáncer mediante el uso de NPs [24].

6.4. Dispersión Raman superficialmente intensificada

El SERS [25] (Surface Enhanced Raman Scattering) es una técnica espectroscópica basada en el efecto Raman de caracterización de moléculas no destructiva y de gran precisión basada en el uso de nanopartículas (Fig. 11). Las moléculas a analizar se colocan sobre un sustrato de nanopartículas que intensifican la radiación incidente a causa de las resonancias plasmónicas. Esta técnica es usada para detecta materiales biológicos, que presentan una fuerte absorción en un determinado rango del espectro, en bajas concentraciones [5] [23].

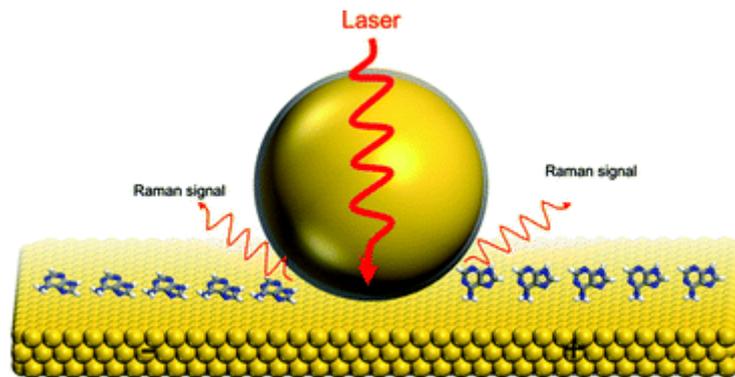


Figura 11: Esquema de medida mediante la técnica SERS de una superficie cristalina de oro [26].

7. Resultados

En esta sección se van a analizar los espectros de extinción y del parámetro de asimetría g , los diagramas de intensidad dispersada en campo lejano y los mapas de campo cercano para los tres casos considerados: partículas aisladas (esfera, cilindro, cubo y paralelepípedo), dímeros formados por dos esferas y dímeros formados por dos cilindros. En todos los casos se han estudiado NPs de silicio en el rango infrarrojo cercano (800-1300 nm), debido a que el silicio no tiene pérdidas por absorción en ese rango. Además, por esta razón, la eficiencia de dispersión es equivalente a la eficiencia de extinción, Q_{ext} , (ver ecuación 3.18) siendo un parámetro de interés para determinar la geometría más óptima para redirigir la radiación en las células solares, favoreciendo el aprovechamiento de energía. Por esta razón, se ha estudiado la Primera Condición de Kerker (zero-backward) en el espectro de extinción y del parámetro de asimetría g (línea vertical punteada), con el objetivo de redirigir toda la radiación hacia la región posterior de las NPs ($\theta = 180^\circ$).

7.1. Partículas aisladas

En la Fig. 12 se muestran los espectros de extinción y del parámetro g (donde la línea vertical punteada indica la longitud de onda correspondiente a la primera condición de Kerker), el diagrama de intensidad en campo lejano y el mapa de campo cercano, para una esfera de $R = 150$ nm, siendo la radiación incidente una onda plana polarizada en el eje X y propagándose en el sentido positivo del eje Z.

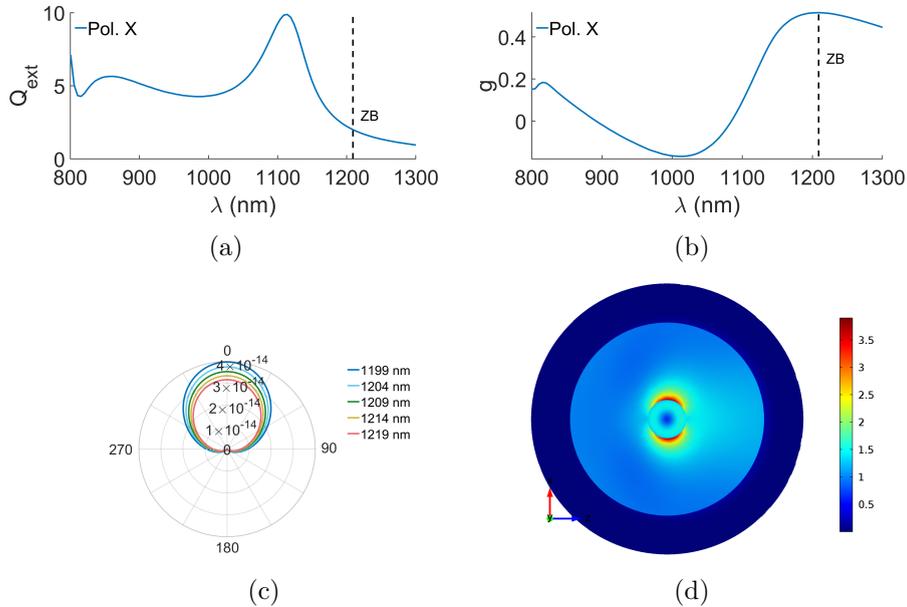


Figura 12: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) mapa de campo cercano para la longitud de onda zero-backward ($\lambda_{ZB} = 1209$ nm) para una esfera de $R = 150$ nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

El espectro de extinción muestra la resonancia dipolar eléctrica ($\simeq 855$ nm) y magnética ($\simeq 1114$ nm) del silicio. Se puede comprobar como la longitud de onda correspondiente a la primera condición de Kerker (λ_{ZB}) sucede en las colas de las resonancias (menor valor de Q_{ext}) lo que a su vez, indica una intensidad dispersada hacia adelante menor.

A partir del espectro del parámetro g y del diagrama de intensidad de campo lejano se puede comprobar como a la longitud de onda ZB la mayor parte de la radiación se emite hacia adelante.

En la Fig. 13 se muestran los espectros de extinción y del parámetro g , el diagrama de intensidad en campo lejano y el mapa de campo cercano, para un cilindro de $R = 150$ nm, $h = 200$ nm, siendo la radiación incidente una onda plana polarizada en el eje X y propagándose en el sentido positivo del eje Z. El cilindro está situado de manera que su eje de revolución se sitúa paralelamente a la dirección de propagación de la radiación incidente. La geometría se ha elegido de manera que el volumen sea el mismo que el de una esfera de $R = 150$ nm.

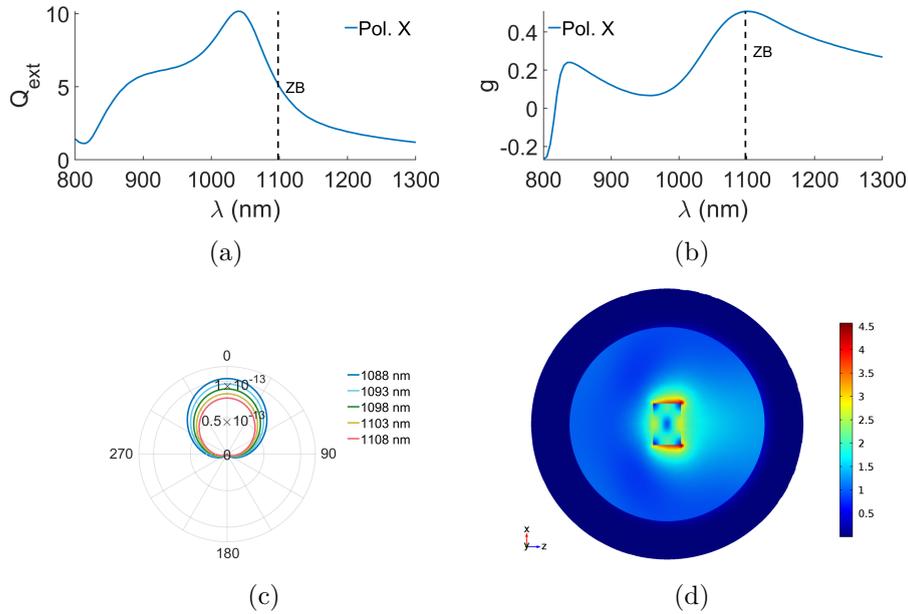


Figura 13: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g (donde la línea vertical punteada indica la longitud de onda correspondiente a la primera condición de Kerker), (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) mapa de campo cercano para la longitud de onda zero-backward ($\lambda_{ZB} = 1098$ nm) para un cilindro de $R = 150$ nm, $h = 200$ nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

En el caso del cilindro se observa una intensidad dispersada hacia adelante 2.5 veces mayor que para la esfera. Esto se puede entender en base a la eficiencia de extinción, Q_{ext} . En el cilindro, las resonancias dipolar eléctrica y magnética están desplazadas con respecto al caso de la esfera, y por lo tanto la condición de ZB se da para una longitud de onda más cercana a los picos de las resonancias (mayor valor de Q_{ext}), a diferencia de la esfera donde la longitud de onda ZB se observa en las colas de las resonancias (menor valor de Q_{ext}). Como se había comentado, la eficiencia de extinción, Q_{ext} , es un parámetro de interés para determinar que geometría es más eficiente para redirigir la radiación electromagnética en las células solares. Además, desde un punto de vista experimental, las NPs cilíndricas son más fáciles de manufacturar que las esferas [27] [28].

En la Fig. 14 se muestran los espectros de extinción y del parámetro g (donde la línea vertical punteada indica la longitud de onda correspondiente a la primera condición de Kerker), el diagrama de intensidad en campo lejano y el mapa de campo cercano, para un cubo de $l = 242$ nm, siendo la radiación incidente una onda plana polarizada en el eje X y propagándose en el sentido positivo del eje Z. La geometría se ha elegido de manera que el volumen sea el mismo que el de una esfera de $R = 150$ nm.

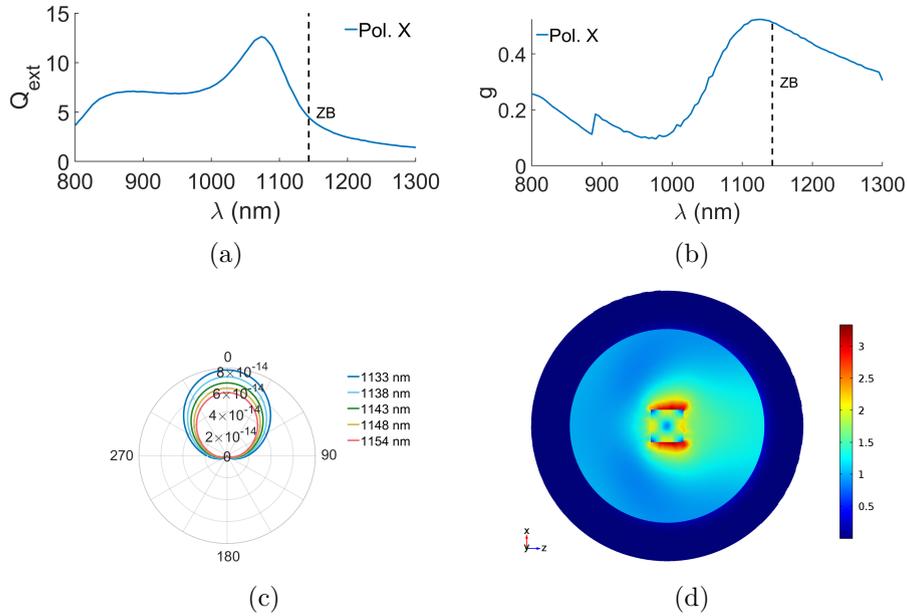


Figura 14: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) mapa de campo cercano para la longitud de onda zero-backward ($\lambda_{ZB} = 1143$ nm) para un cubo de $l = 242$ nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

El caso del cubo es similar a la esfera, la longitud de onda correspondiente a la primera condición de Kerker se encuentra en la cola de las resonancias (menor valor de Q_{ext}) y por lo tanto la intensidad dispersada hacia adelante es menor, haciendo esta geometría menos eficiente comparada con otras, por ejemplo el cilindro con su eje paralelo a la dirección de propagación.

En la Fig. 15 se muestran los espectros de extinción y del parámetro g (donde la línea vertical punteada indica la longitud de onda correspondiente a la primera condición de Kerker), el diagrama de intensidad en campo lejano y el mapa de campo cercano, para un paralelepípedo de base cuadrada $l = w = 300$ nm, altura $h = 157$ nm, siendo la radiación incidente una onda plana polarizada en el eje X y propagándose en el sentido positivo del eje Z. La geometría se ha elegido de manera que el volumen sea el mismo que el de una esfera de $R = 150$ nm.

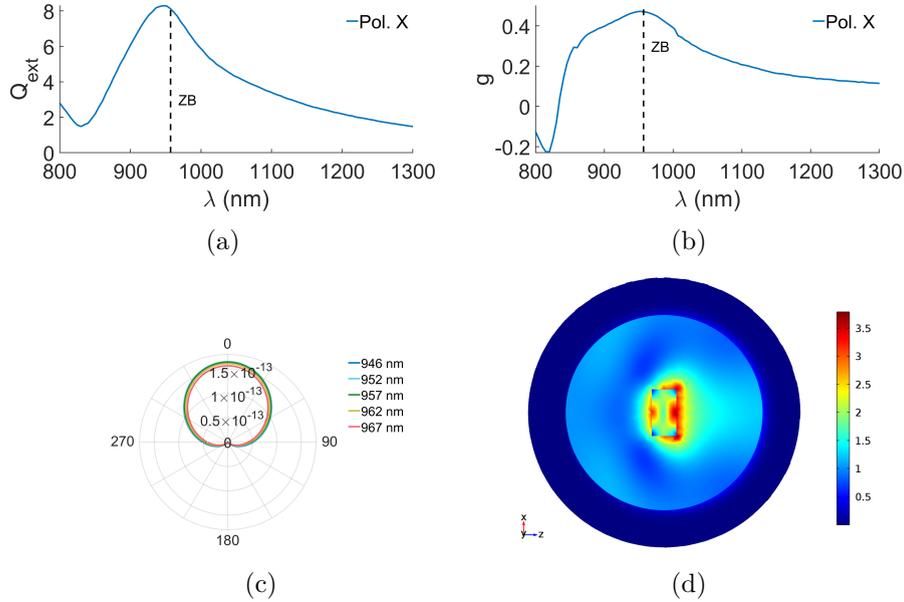


Figura 15: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) mapa de campo cercano para la longitud de onda zero-backward ($\lambda_{ZB} = 957$ nm) para un paralelepípedo de $l = w = 300$ nm, $h = 157$ nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

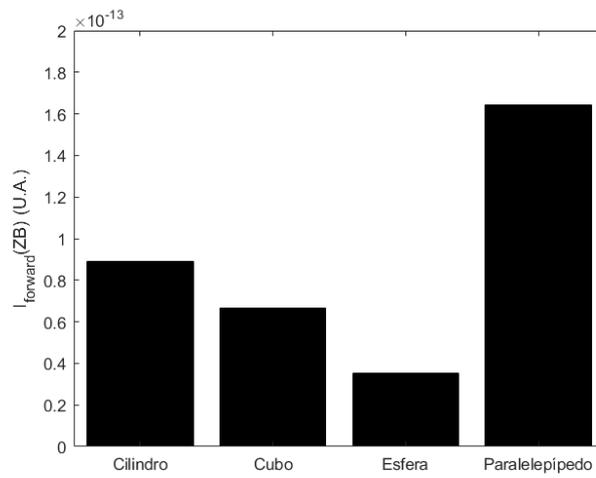
En el caso del paralelepípedo solo se observa una única resonancia, además la longitud de onda correspondiente a la primera condición de Kerker se encuentra en el pico de la resonancia (valor más alto de Q_{ext}). Por este motivo, esta geometría es la que presenta un mayor valor para la intensidad dispersada hacia adelante, siendo la geometría más prometedora para redirigir la radiación electromagnética en las células solares.

En la Fig. 16 se muestran dos gráficas comparativas para las geometrías analizadas en el caso de partículas aisladas, donde se muestran los valores de la intensidad dispersada hacia adelante y la eficiencia de extinción correspondientes a la longitud de onda ZB. Se puede observar como para el caso del paralelepípedo se ha obtenido el mayor valor de la eficiencia de extinción, Q_{ext} , seguido del cilindro con su eje de revolución paralelo a la dirección de propagación. Sin embargo, para este último caso el valor de Q_{ext} es 0.6 veces menor que para el caso del paralelepípedo. Por otro lado, se ha comprobado como la esfera es la geometría menos prometedora, con un valor de la eficiencia de extinción 4 veces menor que el caso del paralelepípedo. Esta diferencia es debida a que en los dos primeros casos la longitud de onda correspondiente a la primera condición de Kerker ocurre cerca de los picos de las resonancias,

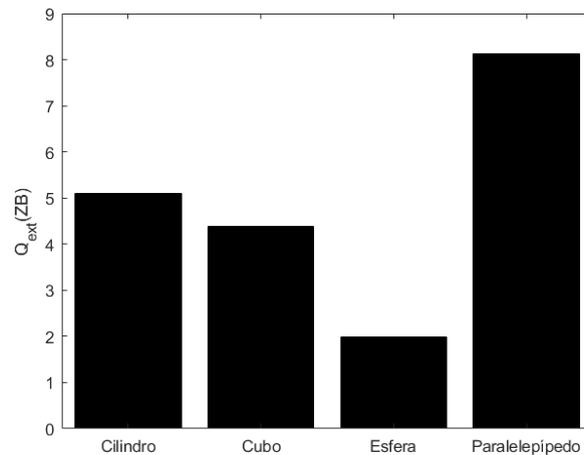
a diferencia de la esfera donde ocurre en las colas de las resonancias.

Además, de acuerdo con lo visto, el paralelepípedo tiene el mayor valor de intensidad dispersada hacia adelante, lo que convierte esta geometría en la geometría más eficiente para redirigir la radiación electromagnética en las células solares, seguida de cilindro con su eje de revolución paralelo a la dirección de propagación.

Por otra parte se han estudiado los efectos de direccionalidad de las NPs HRI mediante la primera condición de Kerker. Poder gobernar la dirección de la radiación dispersada de manera que toda la radiación se disperse hacia adelante, siendo la radiación dispersada hacia atrás nula, es fundamental para redirigir la radiación en las células solares, favoreciendo la absorción de energía.



(a)



(b)

Figura 16: Gráficas comparativas para las cuatro geometrías analizadas en el caso de partículas aisladas para (a) la intensidad dispersada hacia adelante para la longitud de onda ZB, $I_{forward}(ZB)$ y (b) la eficiencia de extinción, $Q_{ext}(ZB)$, para la longitud de onda ZB.

En la próxima sección, 7.2, se va a estudiar un dímero formado por dos esferas con el objetivo de estudiar la interacción entre las NPs y como cambian la eficiencia de extinción, Q_{ext} , y la intensidad dispersada hacia delante, $I_{forward}$, a medida que el gap entre las partículas que forman el dímero aumenta y la interacción es menor. Además se estudiará el efecto de la polarización de la radiación incidente, estudiando la polarización en el eje X y en el eje Y.

7.2. Dímeros de esferas

A continuación, en las Figs. 17-21, se muestran los espectros de la eficiencia de extinción y del parámetro g (donde la línea vertical punteada indica la longitud de onda correspondiente a la primera condición de Kerker), los diagramas de intensidad de campo lejano y los mapas de campo cercano, para dos esferas de $R = 150$ nm cada una formando un dímero con un gap entre ellas de 4, 10, 50, 100 y 300 nm, respectivamente. La radiación incidente se propaga en el sentido positivo del eje Z y está polarizada en el eje X.

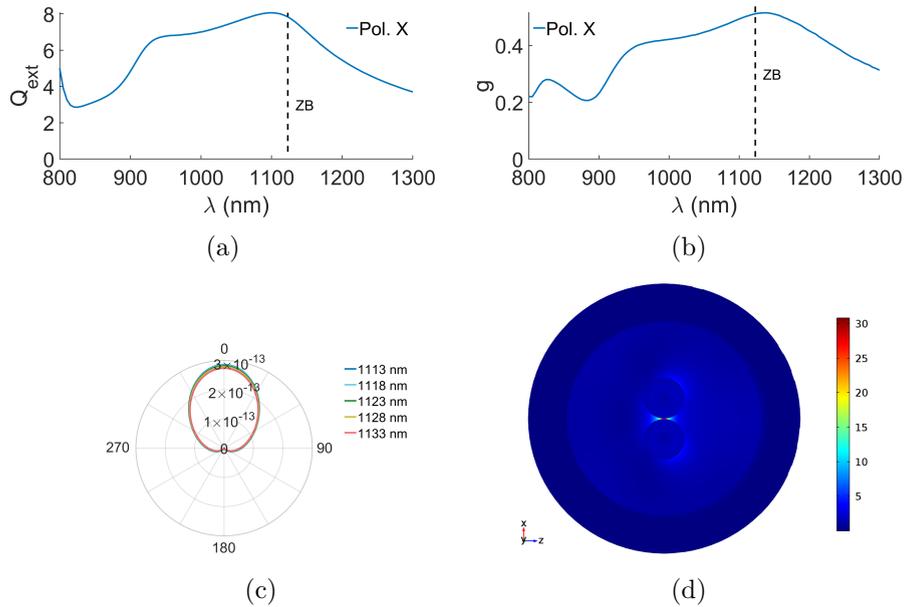


Figura 17: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) mapa de campo cercano para la longitud de onda, $\lambda_{ZB} = 1123$ nm, para un dímero de dos esferas de $R = 150$ nm cada una con un gap de 4 nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

En la Fig. 17 se observa una intensidad dispersada hacia adelante 7.5 veces mayor que en el caso de una NP esférica aislada. En el espectro de Q_{ext} se puede comprobar como se ha producido un ligero corrimiento al azul del máximo de la resonancia y la longitud de onda correspondiente a la primera condición de Kerker está en el pico de la resonancia (mayor valor de Q_{ext}), con un valor 4 veces mayor que en el caso de una NP esférica aislada. Estos valores no solo aumentan por el hecho de añadir una segunda NP (en ese caso solo serían el doble) sino que la interacción entre ambas NPs intensifica el campo electromagnético. De hecho en la Fig. 17 (d), se puede observar una zona de alto campo entre las dos NPs que forman el dímero.

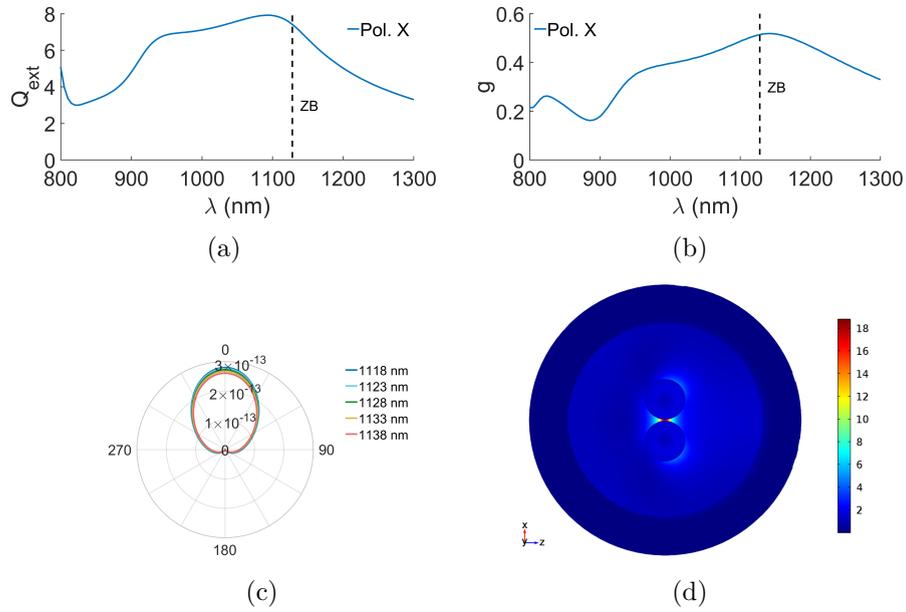


Figura 18: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) mapa de campo cercano para la longitud de onda, $\lambda_{ZB} = 1128$ nm, para un dímero de dos esferas de $R = 150$ nm cada una con un gap de 10 nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

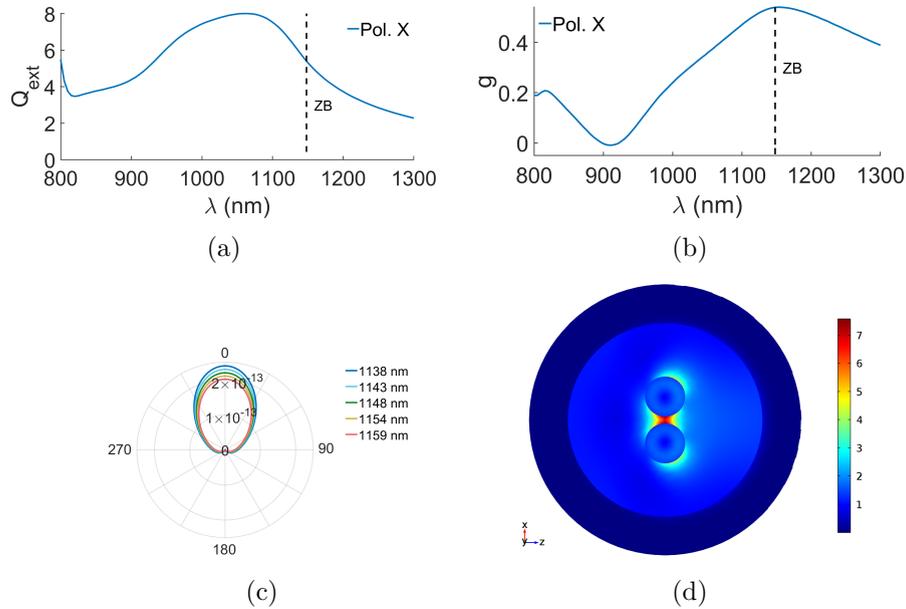


Figura 19: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) mapa de campo cercano para la longitud de onda, $\lambda_{ZB} = 1148$ nm, para un dímero de dos esferas de $R = 150$ nm cada una con un gap de 50 nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

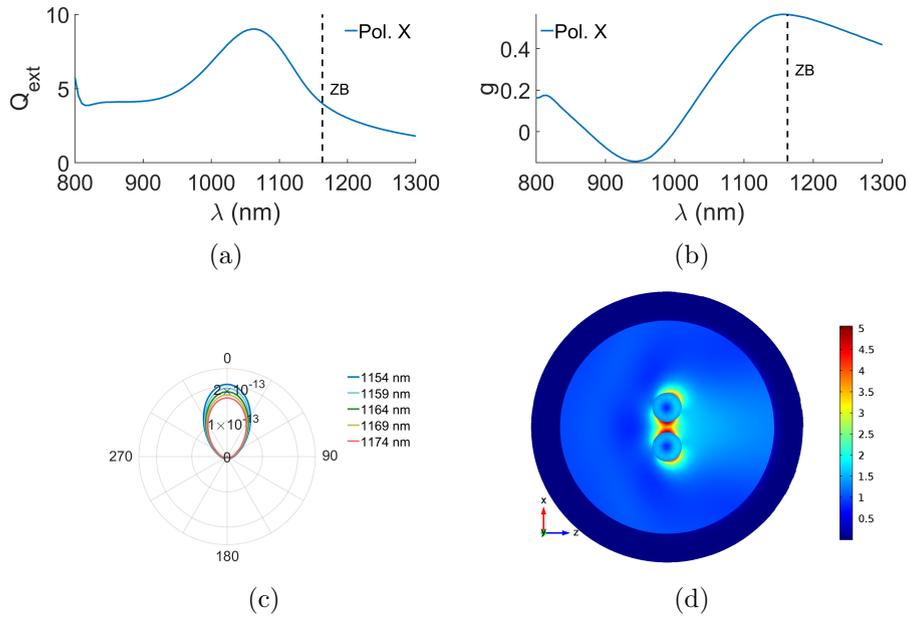


Figura 20: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) mapa de campo cercano para la longitud de onda, $\lambda_{ZB} = 1164$ nm, para un dímero de dos esferas de $R = 150$ nm cada una con un gap de 100 nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

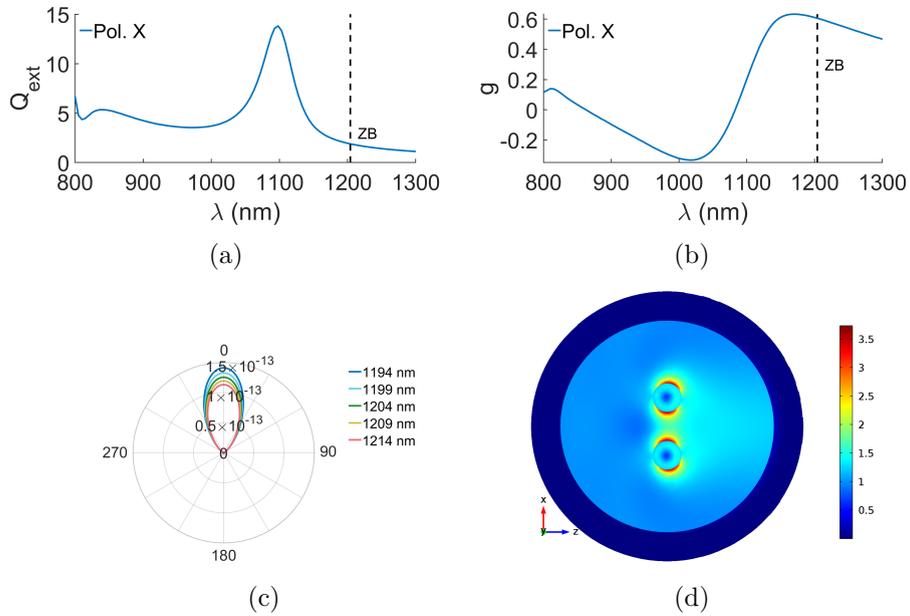


Figura 21: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) mapa de campo cercano para la longitud de onda, $\lambda_{ZB} = 1204$ nm, para un dímero de dos esferas de $R = 150$ nm cada una con un gap de 300 nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

En las Figs. 18 y 19 se puede observar como cambian los espectros y los diagramas a medida que aumenta el gap y por lo tanto la interacción es menor.

En el caso de un gap de 10 nm la longitud de onda ZB se encuentra ligeramente desplazada del máximo de la resonancia, de manera que el valor de Q_{ext} es ligeramente menor, al igual que el valor de la intensidad dispersada hacia delante. Sin embargo, las esferas que forman el dímero tienen aún una fuerte interacción y las diferencias no son significativas.

Este hecho se aprecia con más claridad para un gap de 50 nm, en donde los dos picos de la resonancia se han ensanchado más y prácticamente están solapados. Además, la longitud de onda correspondiente a la primera condición de Kerker está desplazada hacia las colas de la resonancia, lo que produce una disminución significativa en $Q_{ext}(ZB)$ (aproximadamente del 25 %) y en la intensidad dispersada hacia delante.

A medida que el gap sigue aumentando la interacción es menor, de manera que para un gap de 300 nm la interacción es muy débil y en la Fig. 21 (a) se puede observar como el espectro de Q_{ext} es muy similar al del caso de una NP esférica aislada.

De manera global, se puede comprobar como la interacción entre los componentes del dímero modifica la posición espectral de los máximos de las resonancias de manera que cuando la interacción es mayor la longitud de onda ZB está en el pico de la resonancia (mayor valor de Q_{ext}), mientras que cuando la interacción es menor la longitud de onda ZB está en la cola de las resonancias (menor valor de Q_{ext}).

Para el caso de un gap de 4 nm, existe una fuerte interacción entre las esferas que forman el dímero, de manera que la longitud de onda ZB tiene lugar en el pico de la resonancia, Fig. 17, y se alcanza el mayor valor para la eficiencia de extinción, $Q_{ext}(ZB) = 7,8$, a su vez la intensidad dispersada hacia adelante es $I_{forward}(ZB) = 2,82 \cdot 10^{-13}$. En comparación con el caso de un gap de 300 nm, Fig. 21, donde la interacción es muy débil y la longitud de onda ZB tiene lugar en la cola de las resonancias, se comprueba como en este último caso los valores alcanzados son mucho menores, siendo la eficiencia de extinción $Q_{ext}(ZB) = 1,9$ y la intensidad dispersada hacia delante $I_{forward}(ZB) = 1,25 \cdot 10^{-13}$.

Se puede comprobar, teniendo en cuenta la Fig. 16, como los casos de un dímero formado por dos esferas con la radiación incidente polarizada en el eje X, especialmente para un gap de 4 nm, presentan valores de Q_{ext} e $I_{forward}$ mayores que en los casos estudiados referentes a partículas aisladas. Este aumento no solo se debe al hecho de añadir una segunda partícula (lo que aumenta la dispersión), sino que se debe a la fuerte interacción entre las esferas que forman el dímero, creando una zona de alto campo electromagnético entre ambas.

Por otra parte, al igual que en el caso de partículas aisladas, se puede comprobar en los espectros del parámetro g , en los diagramas de intensidad de campo lejano y en los mapas de campo cercano de las Figs. 17-21 como la mayor parte de la radiación es dirigida hacia delante. Además, los diagramas de intensidad dispersada en campo lejano son más estrechos, lo que indica una mayor direccionalidad de la intensidad dispersada hacia adelante.

A continuación, en las Figs. 22, 24-27, se muestran los espectros de la eficiencia de extinción y del parámetro g (donde la línea vertical punteada indica la longitud de onda correspondiente a la primera condición de Kerker), los diagramas de intensidad de campo lejano y los mapas de campo cercano, para dos esferas de $R = 150$ nm cada una formando un dímero con un gap entre ellas de 4, 10, 50, 100 y 300 nm, respectivamente. La radiación incidente se propaga en el sentido positivo del eje Z y está polarizada en el eje Y.

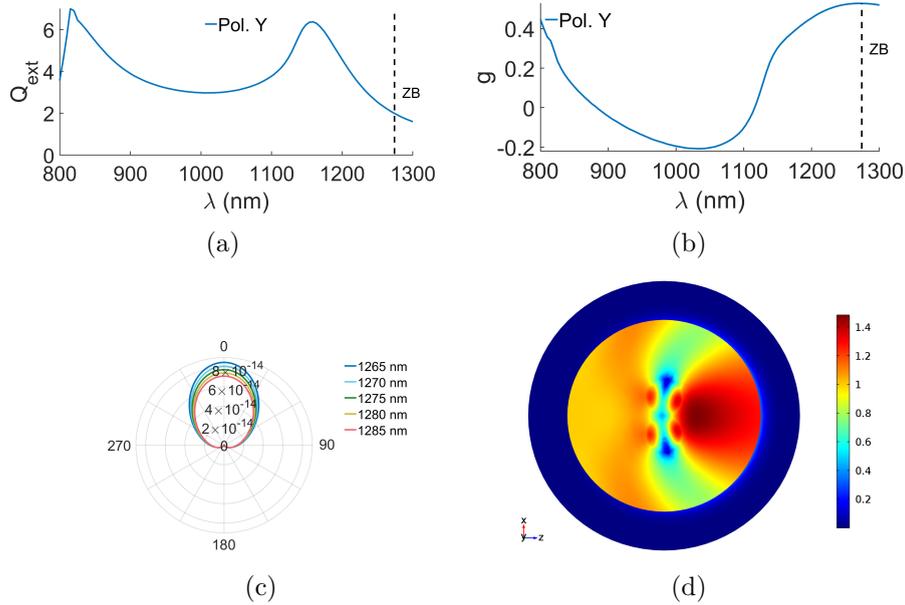


Figura 22: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) mapa de campo cercano para la longitud de onda, $\lambda_{ZB} = 1275$ nm, para un dímero de dos esferas de $R = 150$ nm cada una con un gap de 4 nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

En la Fig. 22 se puede observar una intensidad dispersada hacia adelante mucho menor que en la situación anterior (radiación incidente polarizada en el eje X). En el diagrama de extinción se puede observar como los máximos de las resonancias están desplazados respecto al caso de una esfera aislada, de manera que la longitud de onda correspondiente a la primera condición de Kerker está en las colas de las resonancias (menor valor de Q_{ext}).

En la Fig. 23 se muestra un esquema de los campos originados por ambas partículas, en la configuración longitudinal y transversal debido a la interacción entre ambos dipolos.

En la configuración longitudinal, Fig. 23 (a), la polarización de ambas partículas es paralela a la línea que une sus centros. Además, el campo creado en la partícula 1 por la partícula 2 tiene el mismo módulo y sentido que el creado en la partícula 2 por la partícula 1, y a su vez, ambos campos tienen la misma dirección y sentido que la polarización provocada por el campo incidente, de manera que la polarización inicial se ve intensificada. Se puede comprobar que en aproximación de campo cercano, los campos \vec{E}_{12} y \vec{E}_{21} siguen la siguiente expresión [29]:

$$\vec{E}_{12} = \vec{E}_{21} = \frac{\vec{p}}{2\pi\epsilon_m\epsilon_0 r^3},$$

donde ϵ_m es la permitividad eléctrica relativa del material, ϵ_0 es la permitividad eléctrica del vacío y r es la distancia a un punto del espacio donde se calcula el campo.

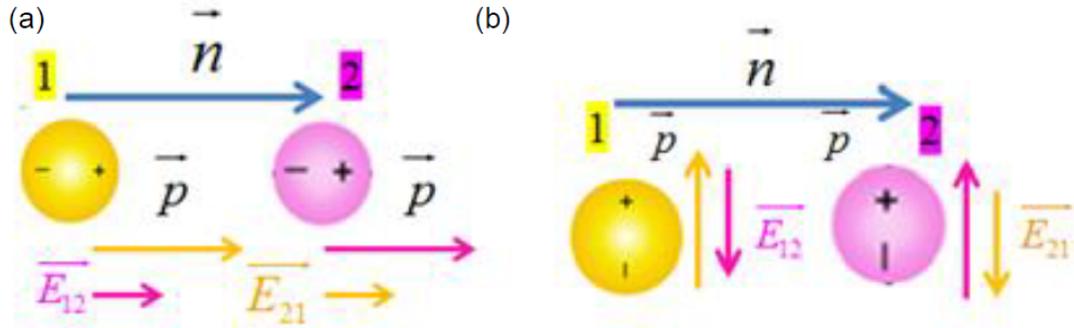


Figura 23: Interacción entre dos dipolos eléctricos en (a) la configuración longitudinal y (b) la configuración transversal. \vec{n} es el vector unitario que une a ambas partículas, \vec{p} es la polarización originada por el campo incidente y \vec{E}_{12} y \vec{E}_{21} son los campos creados en la partícula 1 por la partícula 2 y en la partícula 2 por la partícula 1, respectivamente [29].

En la configuración transversal, Fig. 23 (b), la polarización de ambas partículas es perpendicular a la línea que une sus centros. Además, el campo creado en la partícula 1 por la partícula 2 tiene el mismo módulo y sentido que el creado en la partícula 2 por la partícula 1, y a su vez, ambos campos tienen la misma dirección pero sentido opuesto que la polarización provocada por el campo incidente, de manera que la polarización inicial se ve debilitada. Se puede comprobar que en aproximación de campo cercano, los campos \vec{E}_{12} y \vec{E}_{21} siguen la siguiente expresión [29]:

$$\vec{E}_{12} = \vec{E}_{21} = -\frac{\vec{p}}{4\pi\epsilon_m\epsilon_0r^3},$$

donde ϵ_m es la permitividad eléctrica relativa del material, ϵ_0 es la permitividad eléctrica del vacío y r es la distancia a un punto del espacio donde se calcula el campo.

De esta manera, es fácil comprobar que en módulo, el campo que una esfera produce en la otra es el doble en la configuración longitudinal que en la transversal. A través de estos resultados se puede comprender la disminución de la intensidad dispersada hacia adelante para un dímero formado por dos esferas con radiación incidente polarizada en el eje Y, respecto a cuando la radiación incidente está polarizada en el eje X.

En primera aproximación, el campo total en una partícula del dímero es la suma del campo incidente y el campo producido por la otra partícula debido a la distribución de carga dipolar. A su vez, el campo total generado en las partículas creará un campo en el otro componente del dímero, repitiendo este proceso hasta que se alcance una situación estacionaria. Puesto que en el caso transversal (radiación incidente polarizada en el eje Y) el campo oscila perpendicular a la línea que une los centros de ambas esferas, no se produce una zona de alta concentración de campo electromagnético, a diferencia del caso longitudinal (radiación incidente polarizada en el eje X). Por estos motivos, los valores observados de la intensidad dispersada hacia adelante y de la Q_{ext} en las Figs. 22, 24-27 son muchos menores en la configuración transversal que en la longitudinal.

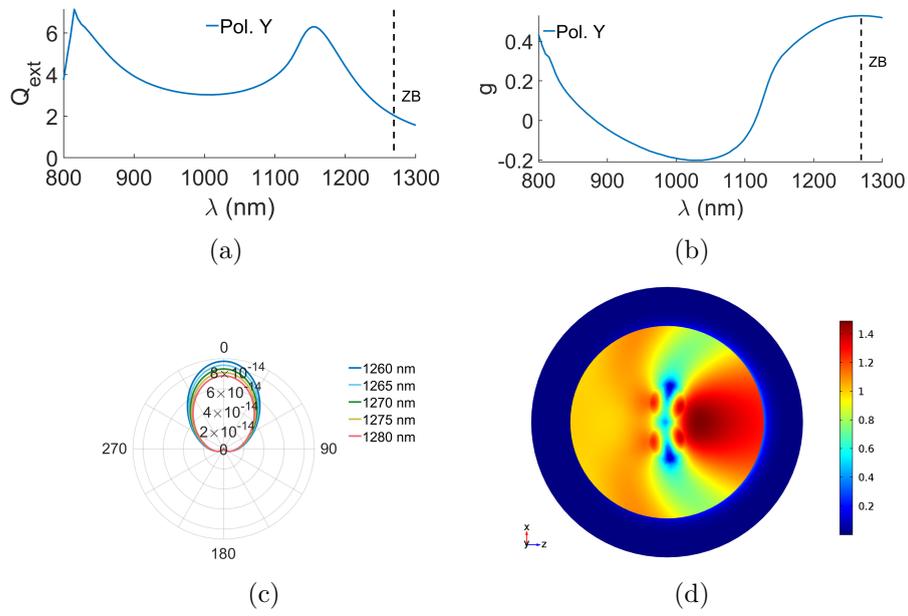


Figura 24: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) mapa de campo cercano para la longitud de onda, $\lambda_{ZB} = 1270$ nm, para un dímero de dos esferas de $R = 150$ nm cada una con un gap de 10 nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

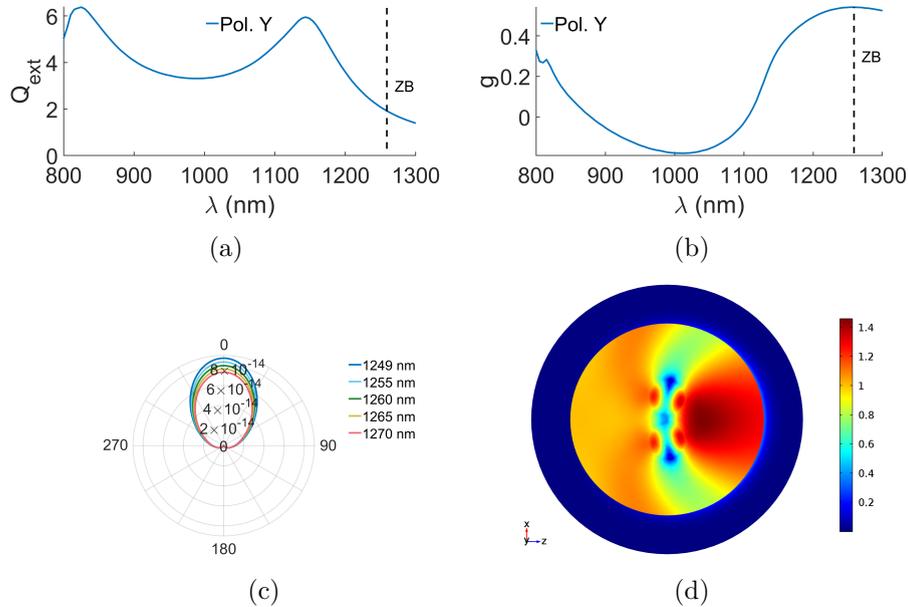


Figura 25: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) mapa de campo cercano para la longitud de onda, $\lambda_{ZB} = 1260$ nm, para un dímero de dos esferas de $R = 150$ nm cada una con un gap de 50 nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

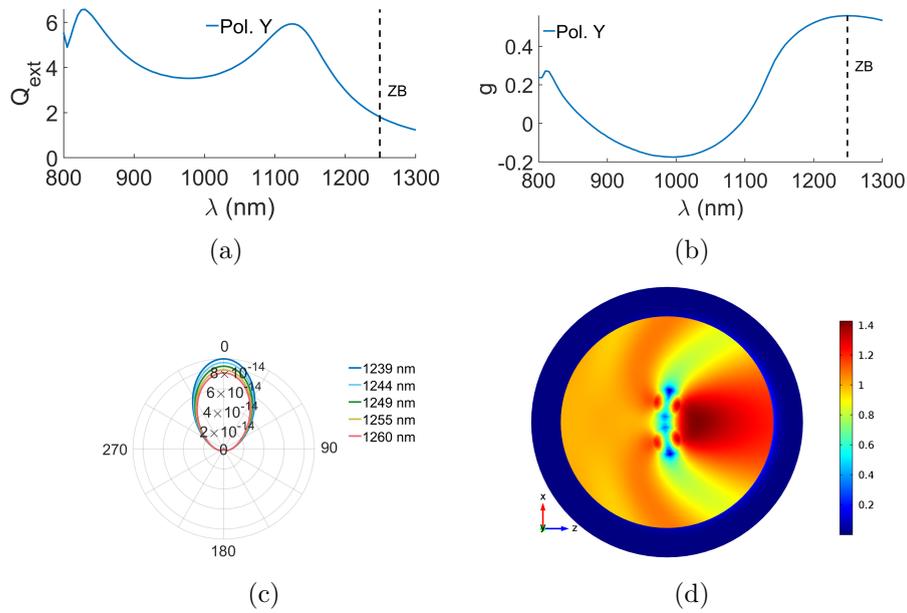


Figura 26: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) mapa de campo cercano para la longitud de onda, $\lambda_{ZB} = 1249$ nm, para un dímero de dos esferas de $R = 150$ nm cada una con un gap de 100 nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

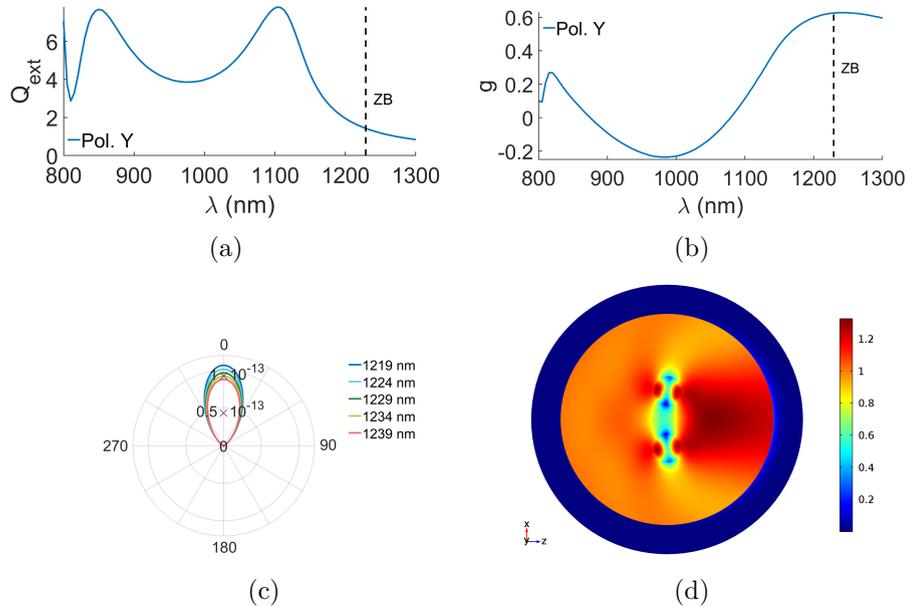
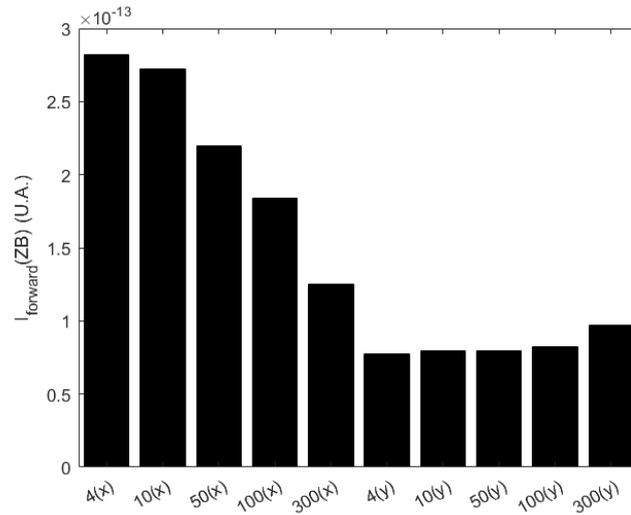
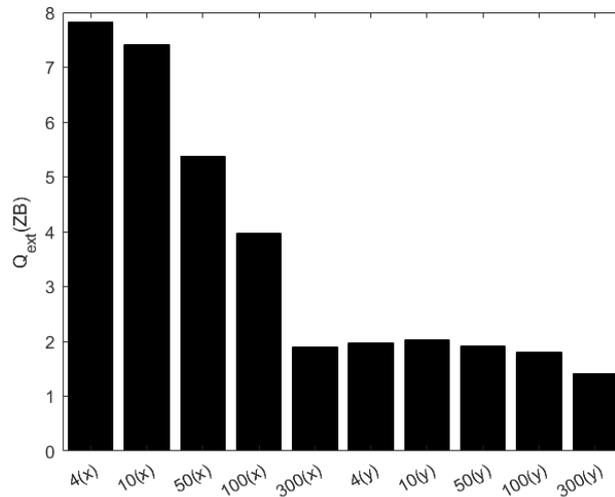


Figura 27: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) mapa de campo cercano para la longitud de onda, $\lambda_{ZB} = 1229$ nm, para un dímero de dos esferas de $R = 150$ nm cada una con un gap de 300 nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

A continuación, en la Fig. 28 se muestran dos gráficas con los valores de la intensidad dispersada hacia delante y la eficiencia extinción, correspondientes a la longitud de onda ZB , para los dímeros formados por dos esferas, para las dos polarizaciones estudiadas y las cinco distancias de gap consideradas en cada caso.



(a)



(b)

Figura 28: Gráficas comparativas para el dímero formado por dos esferas de (a) la intensidad emitida hacia delante, $I_{forward}(ZB)$, para la longitud de onda ZB y (b) la eficiencia de extinción, $Q_{ext}(ZB)$, para la longitud de onda ZB .

En la Fig. 28 se puede apreciar claramente el resultado de la diferencia entre la configuración longitudinal (polarización en el eje X) y la transversal (polarización en el eje Y). En el primer caso los valores obtenidos tanto para la eficiencia de extinción como para la intensidad dispersada son mucho mayores (entre 2 y 3 veces dependiendo del gap) que los valores obtenidos para el segundo caso.

Además, en la Fig. 28 se puede observar como los valores en el caso trasversal (polarización en el eje Y) son muy similares entre sí, como ya se había comentado, debido a la poca interacción a pesar de que las esferas estén más cerca o más separadas. Sin embargo, en el caso longitudinal (polarización en el eje X) si que se aprecia una disminución significativa a medida que la distancia del gap aumenta, ya que se pierde la zona de alta concentración de campo electromagnético.

En esta sección se ha estudiado la interacción electromagnética entre dos esferas que forman un dímero, estudiando los efectos de la polarización y la influencia del gap. Comparando los resultados de la Fig. 28 con una NP esférica aislada, Fig. 16, se puede comprobar que la interacción entre ambas esferas que conforman el dímero, cuando la radiación incidente está polarizada en el eje X y la distancia del gap es pequeña (4 o 10 nm), aumenta la sección eficaz de extinción (aproximadamente cuadruplica su valor). A su vez, la intensidad dispersada hacia delante aumenta su valor en un factor 8. Estos resultados no se deben únicamente al hecho de tener dos partículas (ya que intrínsecamente dispersan el doble de radiación que una) sino que la interacción entre ambas partículas crea una zona de alto campo electromagnético entre ellas que aumenta los efectos comentados.

A pesar de que los resultados obtenidos para el dímero formado por dos esferas mejore el caso de una NP esférica aislada, el paralelepípedo (considerando los resultados de partículas aisladas, Fig. 16) tiene el mismo valor de Q_{ext} y un valor de la intensidad dispersada hacia delante del 60%, comparado con el caso más óptimo visto para el dímero de esferas.

En la sección 7.1 se habían estudiado distintas geometrías, viendo que la más eficaz era el paralelepípedo seguida del cilindro orientado con su eje de revolución paralelo a la dirección de propagación. En la sección 7.2 se han estudiado dímeros formados por dos esferas, debido a su alta simetría y en el caso de la partícula aislada es la única geometría resoluble analíticamente. Sin embargo, a pesar de que presenta valores y características interesantes, sobre todo en el caso de que la polarización incidente esté en el plano X y el gap no sea demasiado grande, no es la geometría más óptima que podemos encontrar para redirigir la radiación en las células solares. Debido a los altos costes y a la dificultad de fabricar nanopartículas esféricas se ha decidido estudiar otro tipo de dímeros. Tanto la opción de un dímero formado por dos paralelepípedos como por dos cilindros son válidas. En este caso se ha elegido solo una geometría (por razones de brevedad), siendo esta un dímero formado por dos cilindros. La orientación elegida para los cilindros ha sido como en el caso aislado, con su eje de revolución paralelo a la dirección de propagación.

7.3. Dímeros de cilindros

A continuación, en las Figs. 29-33, se muestran los espectros de la eficiencia de extinción y del parámetro g (donde la línea vertical punteada indica la longitud de onda correspondiente a la primera condición de Kerker), los diagramas de intensidad de campo lejano y los mapas de campo cercano, para dos cilindros de $R = 150$ nm, $h = 200$ nm cada uno, formando un dímero con un gap entre ellos de 4, 10, 50, 100 y 300 nm, respectivamente. La orientación de los cilindros es tal que su eje de revolución está paralelo a la dirección de propagación. La radiación incidente se propaga en el sentido positivo del eje Z y está polarizada en el eje X.

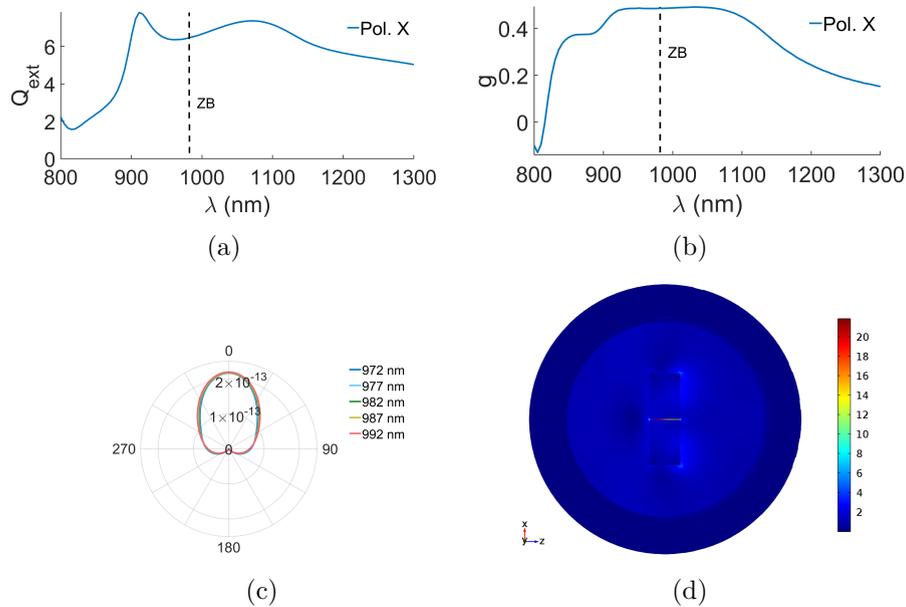


Figura 29: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) campo cercano para la longitud de onda, $\lambda_{ZB} = 982$ nm, para un dímero de dos cilindros de $R = 150$ nm, $h = 200$ nm cada uno con un gap de 4 nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

En la Fig. 29 podemos analizar algunas diferencias con respecto al dímero estudiado anteriormente. Puesto que la radiación incidente está polarizada en el eje X, se produce una zona de alto campo electromagnético entre los dos componentes del dímero. Sin embargo, las resonancias dipolar eléctrica y magnética están desplazadas con respecto al caso de un cilindro aislado, de manera que en el espectro de extinción se observa que la longitud de onda correspondiente a la primera condición de Kerker está entre los dos máximos de las resonancias (valor intermedio de Q_{ext}) y como resultado el valor de la intensidad dispersada hacia adelante no alcanza valores demasiados altos.

En la Fig. 30 se observa un mayor valor de la intensidad dispersada hacia adelante. En este caso, el gap aún es pequeño comparado con el tamaño de las NPs y se mantiene la zona de alto campo electromagnético entre ambos cilindros, además, el espectro de extinción muestra valores ligeramente más altos respecto al caso anterior (gap de 4 nm) y respecto al cilindro aislado.

En la Fig. 31 las dos resonancias están solapadas y la longitud de onda correspondiente a la primera condición de Kerker está cerca del máximo de ambas (valor significativamente más alto de Q_{ext}), de manera que se alcanzan los valores más altos de la intensidad dispersada hacia adelante (4.5 veces mayor respecto al caso de un cilindro aislado). Además, en la Fig. 31 (c) se observa un diagrama de intensidad dispersada en campo lejano más estrecho que en otros casos, lo que indica una mayor direccionalidad de la intensidad dispersada. Estos factores hacen de esta geometría un gran interés para redirigir la radiación electromagnética en las células solares.

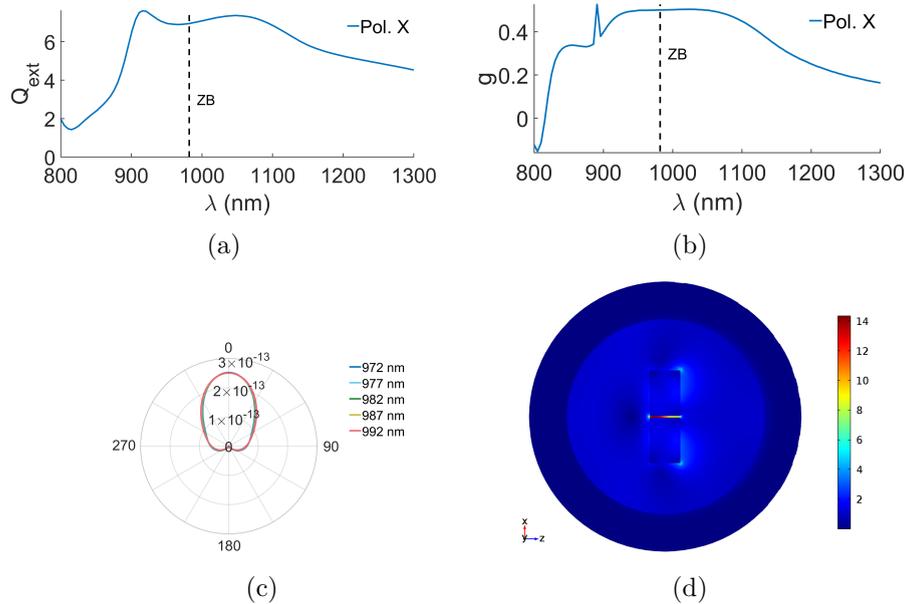


Figura 30: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) campo cercano para la longitud de onda, $\lambda_{ZB} = 982$ nm, para un dímero de dos cilindros de $R = 150$ nm, $h = 200$ nm cada uno con un gap de 10 nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

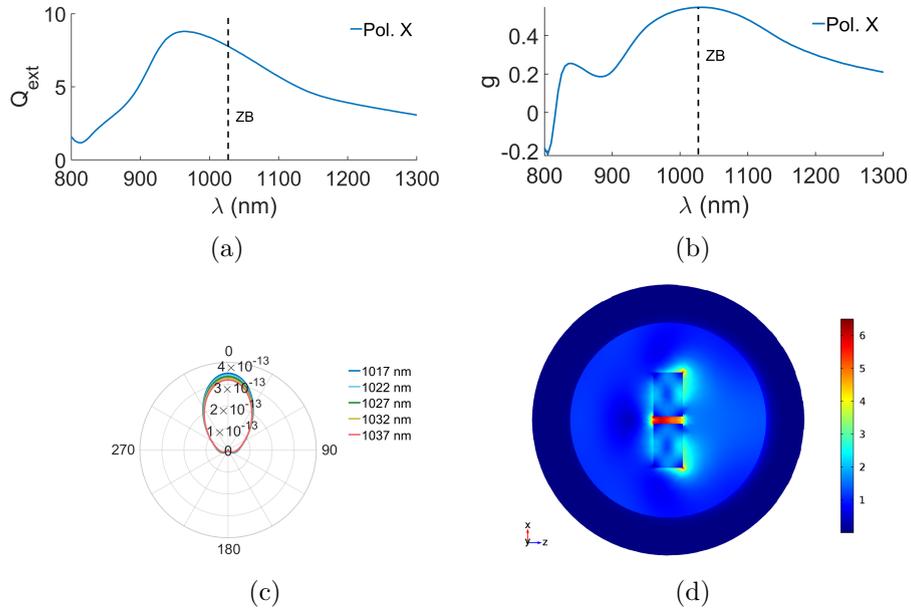


Figura 31: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) campo cercano para la longitud de onda, $\lambda_{ZB} = 1027$ nm, para un dímero de dos cilindros de $R = 150$ nm, $h = 200$ nm cada uno con un gap de 50 nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

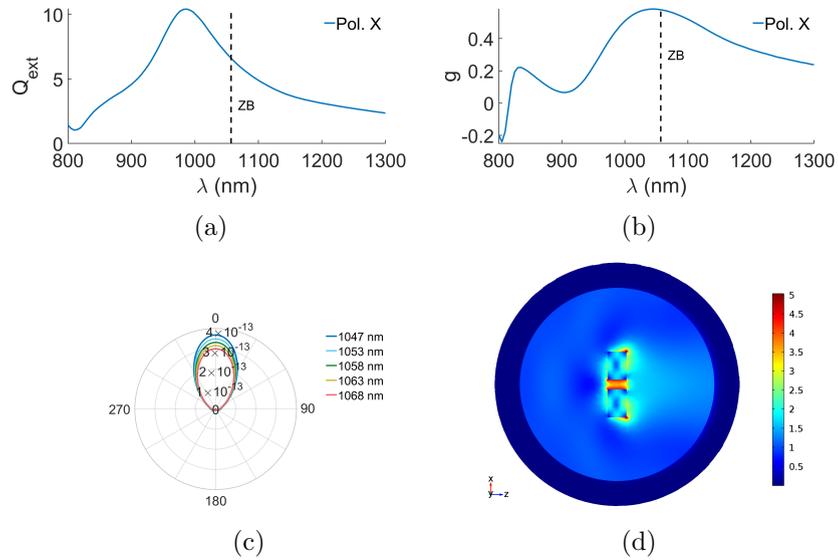


Figura 32: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) campo cercano para la longitud de onda, $\lambda_{ZB} = 1058$ nm, para un dímero de dos cilindros de $R = 150$ nm, $h = 200$ nm cada uno con un gap de 100 nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

En la Fig. 32 se observa como a pesar de que el gap haya aumentado considerablemente (es del orden de la mitad de tamaño que los cilindros) la longitud de onda correspondiente a la primera condición de Kerker está cerca de los máximos de las resonancias y presenta un valor de la intensidad dispersada hacia adelante significativamente alto (prácticamente el mismo que en la situación anterior con un gap de 50 nm).

Cuando el gap es mayor que el tamaño de las NPs, Fig. 33, la interacción entre los componentes del dímero es muy débil y la longitud de onda ZB tiene lugar en la cola de las resonancias (menor valor de Q_{ext}).

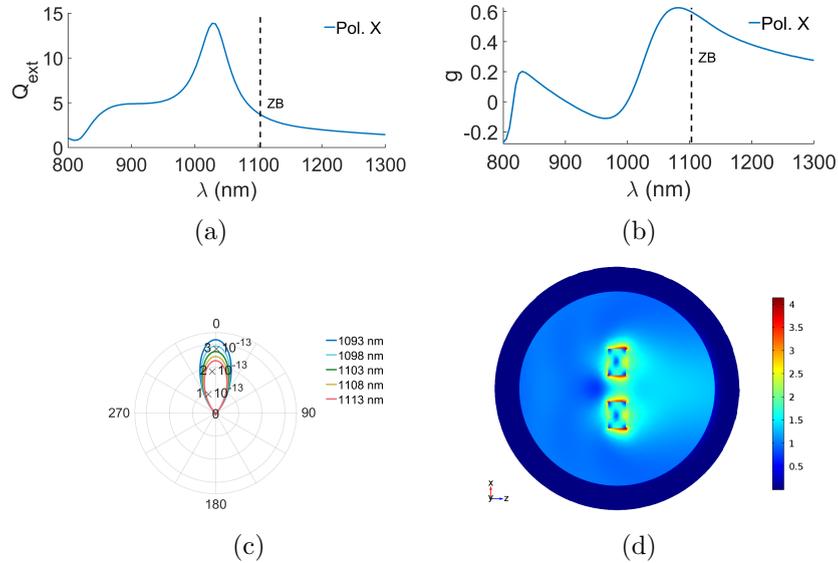


Figura 33: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) campo cercano para la longitud de onda, $\lambda_{ZB} = 1103$ nm, para un dímero de dos cilindros de $R = 150$ nm, $h = 200$ nm cada uno con un gap de 300 nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

Comparando los dos tipos de dímeros analizados, el primero formado por esferas y el segundo por cilindros, cuando la radiación incidente está polarizada en el eje X, se comprueba que en ambos casos se alcanzan valores para la eficiencia de extinción 4 veces más altos (en las configuraciones más óptimas) respecto a sus respectivas partículas aisladas. Sin embargo, en el dímero formado por dos cilindros la intensidad dispersada hacia adelante es 4.5 veces mayor, siendo así el valor más alto estudiado. Estos valores combinados con la direccionalidad que presentan las NPs HRI, y en particular el dímero formado por dos cilindros, hacen de esta geometría una opción eficiente para redirigir la radiación electromagnética en las células solares, favoreciendo el aprovechamiento de energía.

A continuación, en las Figs. 34-38, se muestran los espectros de la eficiencia de extinción y del parámetro g (donde la línea vertical punteada indica la longitud de onda correspondiente a la primera condición de Kerker), los diagramas de intensidad de campo lejano y los mapas de campo cercano, para dos cilindros de $R = 150$ nm, $h = 200$ nm cada uno, formando un dímero con un gap entre ellos de 4, 10, 50, 100 y 300 nm, respectivamente. La orientación de los cilindros es tal que su eje de revolución está paralelo a la dirección de propagación. La radiación incidente se propaga en el sentido positivo del eje Z y está polarizada en el eje Y.

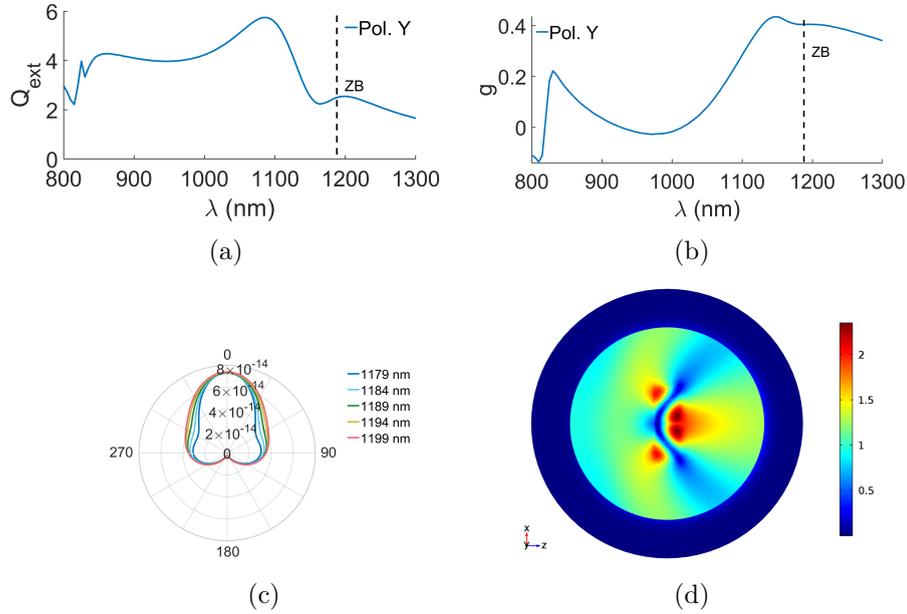


Figura 34: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) campo cercano para la longitud de onda, $\lambda_{ZB} = 1189$ nm, para un dímero de dos cilindros de $R = 150$ nm, $h = 200$ nm cada uno con un gap de 4 nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

En la Fig. 34 se observa que la longitud de onda ZB está en la cola de las resonancias (valor muy bajo de Q_{ext}) y como resultado la intensidad dispersada hacia adelante es un orden menor que en el caso anterior, cuando la radiación incidente está polarizada en el eje X. Además, el diagrama de intensidad dispersada es significativamente más ancho, lo que indica una menor direccionalidad de la intensidad dispersada. Este resultado se puede justificar de la misma manera que en el caso del dímero formado por dos esferas y la radiación incidente polarizada en el eje Y. En la configuración longitudinal (polarización en el eje X) el campo creado en cada partícula por el otro componente del dímero es, en módulo, el doble que en la configuración transversal (polarización en el eje Y). Por lo tanto, la intensidad dispersada hacia adelante se ve disminuida aproximadamente en un factor 4. Al igual que se ha comentado anteriormente, estos resultados no son eficientes para redirigir la luz en las células solares, tanto por la disminución de la intensidad dispersada como por la disminución de la direccionalidad observadas en el gráfico de la Fig. 34 (c).

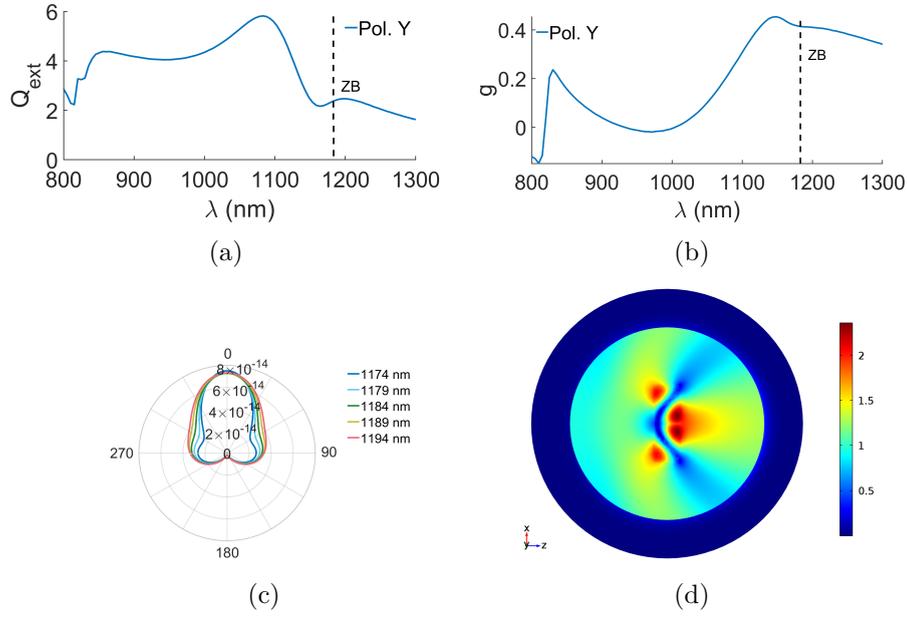


Figura 35: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) campo cercano para la longitud de onda, $\lambda_{ZB} = 1184$ nm, para un dímero de dos cilindros de $R = 150$ nm, $h = 200$ nm cada uno con un gap de 10 nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

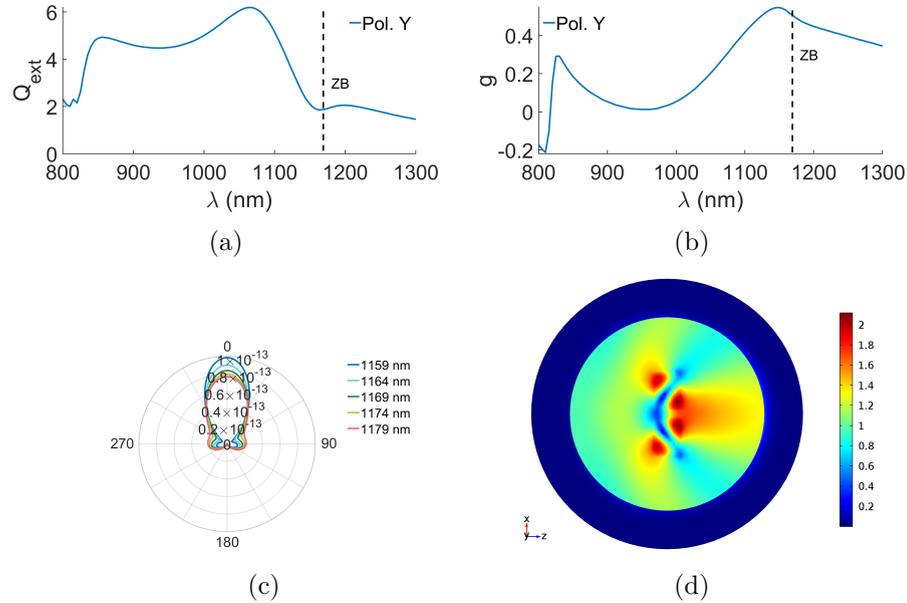


Figura 36: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) campo cercano para la longitud de onda, $\lambda_{ZB} = 1169$ nm, para un dímero de dos cilindros de $R = 150$ nm, $h = 200$ nm, cada uno con un gap de 50 nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

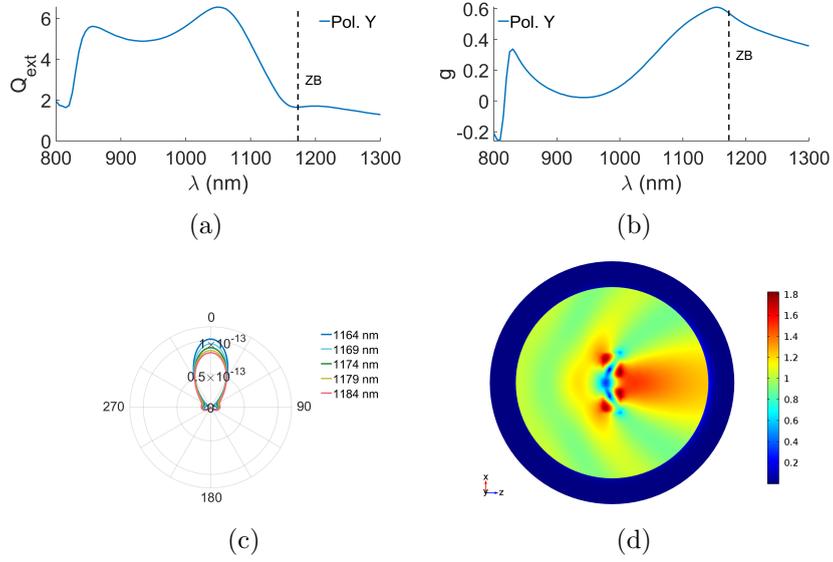


Figura 37: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) campo cercano para la longitud de onda, $\lambda_{ZB} = 1174$ nm, para un dímero de dos cilindros de $R = 150$ nm, $h = 200$ nm cada uno con un gap de 100 nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

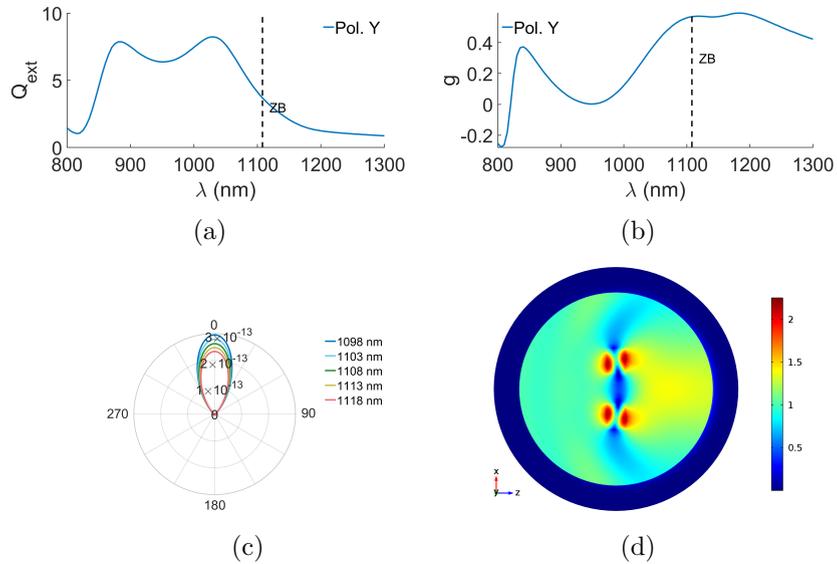


Figura 38: (a) Espectro de eficiencia de extinción, (b) parámetro de asimetría g , (c) diagrama de intensidad de campo lejano dispersado para diferentes longitudes de onda alrededor de la correspondiente a la Primera Condición de Kerker, y (d) campo cercano para la longitud de onda, $\lambda_{ZB} = 1108$ nm, para un dímero de dos cilindros de $R = 150$ nm, $h = 200$ nm cada uno con un gap de 300 nm. Las figuras (c) y (d) corresponden al plano Z-X.

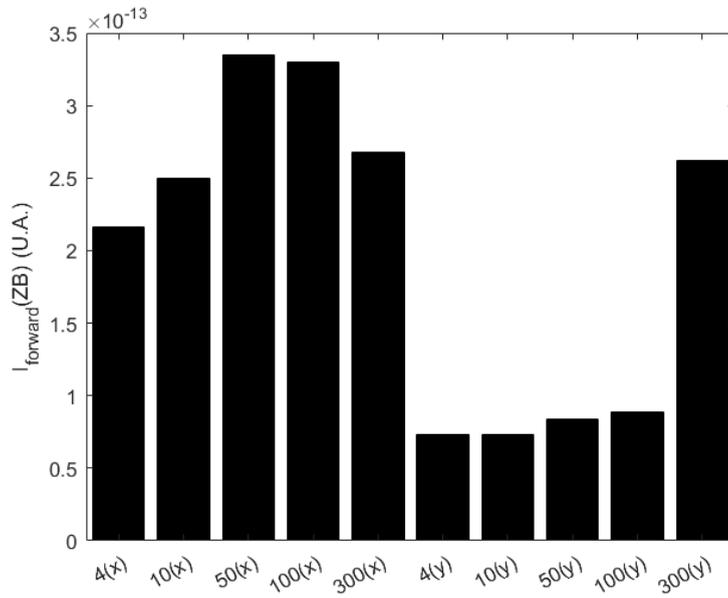
En las Figs. 34-38 se puede observar como a medida que el gap aumenta la situación es muy similar. En todos los casos la interacción es mucho más débil y la longitud de onda ZB está en la cola de las resonancias (menor valor de Q_{ext}) y como resultado la intensidad dispersada hacia adelante es menor respecto a la configuración longitudinal (polarización en el eje X).

A continuación, en la Fig. 39 se muestran dos gráficas con los valores de la intensidad dispersada hacia delante y la eficiencia de extinción para los dímeros formados por dos cilindros, para las dos polarizaciones estudiadas y las cinco distancias de gap consideradas en cada caso. En estas dos gráficas se comprueba claramente la diferencia entre todos los casos estudiados para el dímero de cilindros.

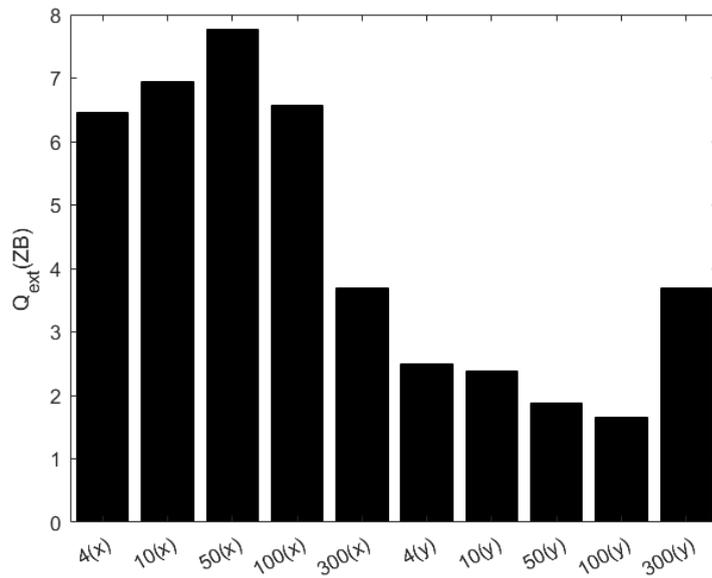
Al igual que en el dímero de esferas, el caso longitudinal muestra valores de la eficiencia de extinción y de la intensidad dispersada hacia adelante significativamente mayores que el caso trasversal.

Además, como se había analizado, las dos configuraciones más eficientes que se han analizado son los dímeros compuestos por dos cilindros con gaps de 50 y 100 nm entre ellos, respectivamente, y la radiación incidente polarizada en el eje X. El resto de configuraciones estudiadas no resultan tan eficaces ya que la eficiencia de extinción es mucho menor o comparable al valor del caso de un cilindro aislado (ya que al añadir una segunda partícula dispersan el doble de radiación).

Otro aspecto importante a tener en cuenta es la manufacturación de las NPs. Como se comentó en la sección 7.1, las NPs esférica son más difíciles y caras de producir que las cilíndricas [27,28]. En las secciones 7.2 y 7.3 se han estudiado dímeros formados por esferas y por cilindros, respectivamente. Se ha comprobado como la interacción entre los componentes del dímero hace estas configuraciones más eficientes (mayor eficiencia de extinción), respecto a los casos de partícula aislada estudiados. Tras haber analizado todos los resultados se comprueba que los cilindros son una geometría más eficiente que las esferas para redirigir la radiación electromagnética en las células solares, no solo por los aspectos comentados sobre la manufacturación sino también por los valores más altos obtenidos en Q_{ext} y en $I_{forward}$. Finalmente, además de los resultados estudiados, es importante recordar el caso estudiado del paralelepípedo en la sección 7.1, donde se comprobó la eficiencia de esa geometría de cara al objetivo de este trabajo.



(a)



(b)

Figura 39: Gráficas comparativas para el dímero formado por dos cilindros de (a) la intensidad emitida hacia delante, $I_{\text{forward}}(\text{ZB})$, para la longitud de onda ZB y (b) la eficiencia de extinción, $Q_{\text{ext}}(\text{ZB})$, para la longitud de onda ZB.

8. Conclusiones y trabajo futuro

Se ha llevado a cabo un estudio sobre el comportamiento electromagnético de nanopartículas (de silicio) de alto índice de refracción analizando distintas geometrías y configuraciones, con el objetivo de redirigir la luz en las células solares, favoreciendo así la absorbancia. A continuación se presentan las conclusiones de las tres secciones estudiadas: partículas aisladas, dímeros de esferas y dímeros de cilindros.

8.1. Partículas aisladas

En la primera parte del trabajo se han analizado varias geometrías elementales (esfera, cilindro, cubo y paralelepípedo). Se ha visto que el paralelepípedo es la geometría más eficiente y tiene los mayores valores de $Q_{ext}(ZB)$ e $I_{for}(ZB)$ (casi el doble que el cilindro y cuatro veces más que la esfera). Esto es debido a su geometría, ya que la longitud de onda correspondiente a la primera condición de Kerker está en el máximo de las resonancias (mayor valor de Q_{ext})

El cilindro, orientado con su eje de revolución paralelo a la dirección de propagación, ha sido la segunda geometría más eficiente. En este caso, la longitud de onda ZB está desplazada hacia la cola de las resonancias (menor valor de Q_{ext}), disminuyendo la intensidad dispersada hacia adelante.

Por último, el cubo y la esfera son unas geometrías menos eficientes. Tienen los menores valores de la eficiencia de extinción por lo que no son unas geometrías eficientes para redirigir la radiación electromagnética en las células solares.

Después de estudiar partículas aisladas, se han estudiado agregados con el objetivo de analizar la interacción entre las partículas que forman el agregado. En este trabajo se han considerado dímeros formados por esferas y por cilindros.

8.2. Dímeros de esferas

Con el fin de estudiar la interacción entre las dos esferas que forman el dímero se han utilizado cinco gaps: 4, 10, 50, 100 y 300 nm con el objetivo de estudiar la interacción a medida que el gap aumenta. Además, se han estudiado dos polarizaciones para la radiación incidente, en el eje X y en el eje Y.

En el caso longitudinal, polarización en el eje X, el campo electromagnético oscila paralelo a la línea que une los centros de ambas esferas y por lo tanto se produce una zona de alto campo electromagnético entre ambas esferas. La longitud de onda correspondiente a la primera condición de Kerker está en el máximo de la resonancia y se alcanza un mayor valor de $Q_{ext}(ZB)$ (4 veces mayor respecto a una esfera aislada) y por lo tanto de $I_{forward}(ZB)$ (7.5 veces mayor respecto a una esfera aislada). Esta interacción es mucho más efectiva cuando el gap es menor, especialmente cuando es 4 o 10 nm. A medida que el gap aumenta, la interacción disminuye y se pierde la zona de alto campo entre los componentes del dímero. Además, la longitud de onda ZB se encuentra en la cola de las resonancias (menor valor de Q_{ext}) y la intensidad dispersada hacia adelante disminuye.

En el caso trasversal, polarización en el eje Y, el campo oscila perpendicular a la línea que une los centros de ambas esferas y no se produce una zona de alto campo electromagnético entre los componentes del dímero. Además, se ha comprobado que el campo que cada

partícula produce en el otro componente del dímero es, en módulo, la mitad que en el caso longitudinal. A través de estos resultados, se explica la disminución de la eficiencia de extinción, y por lo tanto de la intensidad dispersada, en el caso trasversal.

8.3. Dímeros de cilindros

Con el fin de estudiar la interacción entre los dos cilindros que forman el dímero se han utilizado cinco gaps: 4, 10, 50, 100 y 300 nm con el objetivo de estudiar la interacción a medida que el gap aumenta. Además, se han estudiado dos polarizaciones para la radiación incidente, en el eje X y en el eje Y.

El caso longitudinal es muy similar al dímero formado por dos esferas, ya que también se da una zona de alto campo electromagnético entre los componentes del cilindro. Sin embargo, la configuración más eficiente se da para un gap de 50 nm seguido del caso de un gap de 100 nm, en donde la distancia aún es pequeña comparada con el tamaño de las nanopartículas que forman el dímero. En estas dos situaciones, las resonancias se han solapado y la longitud de onda correspondiente a la primera condición de Kerker está cerca del máximo de las resonancias, lo que produce un mayor valor para $Q_{ext}(ZB)$ y un valor 4.5 veces mayor para $I_{forward}(ZB)$ respecto al caso de un cilindro aislado. Al igual que en el dímero de esferas, a medida que el gap sigue aumentando la interacción es mucho más débil y la eficiencia de extinción disminuye significativamente.

En el caso trasversal ocurre lo mismo que en los dímeros de esferas, la interacción no es tan efectiva debido a que el campo oscila perpendicular a la alineación de los cilindros y por eso no se produce una intensificación del campo electromagnético.

Teniendo en cuenta todos los resultados se puede comprobar que las geometrías y configuraciones más eficientes son el dímero formado por dos cilindros, con sus ejes de revolución paralelos a la dirección de propagación, con un gap de 50 nm (el segundo caso más eficiente sería con un gap de 100 nm) y con la radiación incidente polarizada en el eje X. Seguido de estos dos casos estarían los dímeros de esferas con gaps de 4 y 10 nm, respectivamente, con la radiación incidente polarizada en el eje X. Sin embargo, como ya se comentó anteriormente, la manufacturación de nanopartículas esféricas es costosa y cara por lo que los cilindros son la opción más eficiente para redirigir la radiación electromagnética en las células solares, favoreciendo el aprovechamiento de la energía.

8.4. Trabajo futuro

Debido a la potencia numérica de COMSOL se pueden simular configuraciones mucho más complejas que las estudiadas en este trabajo. Algunas de ellas serían:

- Agregados más complejos, con más partículas o mezclando diferentes geometrías. Además se puede cambiar la orientación entre las partículas.
- Geometrías inhomogéneas, como aleaciones o partículas core-shell las cuales tienen por ejemplo un núcleo metálico con una cobertura dieléctrica.
- Partículas sobre un sustrato, analizando como influyen las distintas propiedades (geometría, tamaño, índice de refracción).

Referencias

- [1] Ángela Inmaculada Barreda Gómez. *Sobre el comportamiento electromagnético de pequeñas partículas dieléctricas de alto índice de refracción*. PhD thesis, 4 2019.
- [2] Gobind Das, Maria Coluccio, Salma Alrasheed, Andrea Giugni, M Allione, Bruno Torre, Gerardo Perozziello, Patrizio Candeloro, and Enzo Di Fabrizio. Plasmonic nanostructures for the ultrasensitive detection of biomolecules. 39:547–586, 11 2016.
- [3] Antoine Lesuffleur, Hyungsoon Im, Nathan Lindquist, and Sang-Hyun Oh. Periodic nanohole arrays with shape-enhanced plasmon resonance as real-time biosensors. *Applied Physics Letters*, 90:243110–243110, 06 2007.
- [4] Jack Sheng Kee, Sweeyin Lim, A. P. Perera, Mi Kyoung Park, and Yong Zhang. Plasmonic nanohole array for biosensor applications. In *2012 Photonics Global Conference (PGC)*, pages 1–4, Dec 2012.
- [5] Tracy Paxon, R Scott Duthie, Casey Renko, Andrew Burns, Frank J. Mondello, and Marie Lesaicherre. Identifying biological agents with surface-enhanced raman scattering. *SPIE Newsroom*, 04 2011.
- [6] Alois Bonifacio, Silvia Cervo, and Valter Sergo. Label-free surface-enhanced raman spectroscopy of biofluids: fundamental aspects and diagnostic applications. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 407(27):8265–8277, Nov 2015.
- [7] Harry Atwater and Albert Polman. Plasmonics for improved photovoltaic devices. *Nature materials*, 9:865, 10 2010.
- [8] Michael Tribelsky, Geffrin Jean-Michel, Amelie Litman, Christelle Eyraud, and Fernando Moreno. Small dielectric spheres with high refractive index as new multifunctional elements for optical devices open. *Scientific Reports*, 5:12288, 03 2015.
- [9] Vincenzo Giannini, Antonio I. Fernández-Domínguez, Susannah C. Heck, and Stefan A. Maier. Plasmonic nanoantennas: Fundamentals and their use in controlling the radiative properties of nanoemitters. *Chemical Reviews*, 111(6):3888–3912, 2011.
- [10] Derin Sevenler, Nese Lortlar Unlu, and M. Selim ünlü. *Nanoparticle Biosensing with Interferometric Reflectance Imaging*, pages 81–95. 01 2015.
- [11] Arseniy Kuznetsov, Andrey E. Miroshnichenko, Mark Brongersma, Yuri S. Kivshar, and Boris Luk'yanchuk. Optically resonant dielectric nanostructures. *Science*, 354:aag2472–aag2472, 11 2016.
- [12] Andrey Matsko, A.A. Savchenkov, D Strekalov, Vladimir Ilchenko, and L Maleki. Review of applications of whispering-gallery mode resonators in photonics and nonlinear optics. *Interplanetary Network Progress Report*, 42, 08 2005.
- [13] M. Kerker, D.-S. Wang, and C. L. Giles. Electromagnetic scattering by magnetic spheres. *J. Opt. Soc. Am.*, 73(6):765–767, Jun 1983.

- [14] Braulio García-Cámara, R Alcaraz de la Osa, Jose Saiz, Francisco González, and Fernando Moreno. Directionality in scattering by nanoparticles: Kerker’s null-scattering conditions revisited. *Optics letters*, 36:728–30, 03 2011.
- [15] Weeratouch Pongruengkiat and Suejit Pechprasarn. Whispering-gallery mode resonators for detecting cancer. *Sensors*, 17(9), 2017.
- [16] C. Bohren and D. R. Huffman. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. Wiley Science Paperback Series, 1998.
- [17] B. García-Cámara, F. González, F. Moreno, and J. M. Saiz. Exception for the zero-forward-scattering theory. *J. Opt. Soc. Am. A*, 25(11):2875–2878, Nov 2008.
- [18] COMSOL Multiphysics. <https://www.comsol.com/>.
- [19] Alexander E. Krasnok, Andrey E. Miroshnichenko, Pavel A. Belov, and Yuri S. Kivshar. All-dielectric optical nanoantennas. *Opt. Express*, 20(18):20599–20604, Aug 2012.
- [20] Heiko Kollmann, Xianji Piao, Martin Esmann, Simon F Becker, Dongchao Hou, Chuong Huynh, Lars-Oliver Kautschor, Guido Boesker, Henning Vieker, André Beyer, Armin Götzhäuser, Namkyoo Park, Ralf Vogelgesang, Martin Silies, and Christoph Lienau. Toward plasmonics with nanometer precision: Nonlinear optics of helium-ion milled gold nanoantennas. *Nano Letters*, 07 2014.
- [21] Prashant Jain, Xiaohua Huang, Ivan El-Sayed, and Mostafa El-Sayed. Noble metals on the nanoscale: Optical and photothermal properties and some applications in imaging, sensing, biology, and medicine. *Accounts of chemical research*, 41:1578–86, 06 2008.
- [22] Xiao Chen and H J Schluesener. Nanosilver: A nanoparticle in medical application. *Toxicology letters*, 176:1–12, 02 2008.
- [23] Vincenzo Giannini, Antonio Fernández-Domínguez, Susannah Heck, and Stefan Maier. Plasmonic nanoantennas: Fundamentals and their use in controlling the radiative properties of nanoemitters. *Chemical reviews*, 111:3888–912, 03 2011.
- [24] Dr. Aravind Kumar Rengan, Amirali Bukhari, Arpan Pradhan, Renu Malhotra, Rinti Banerjee, Rohit Srivastava, and Abhijit De. In vivo analysis of biodegradable liposome gold nanoparticles as efficient agents for photothermal therapy of cancer. *Nano Letters*, 15:842–848, 01 2015.
- [25] Bhavya Sharma, Renee R. Frontiera, Anne-Isabelle Henry, Emilie Ringe, and Richard P. Van Duyne. Sers: Materials, applications, and the future. *Materials Today*, 15(1):16 – 25, 2012.
- [26] Bao-Ying Wen, Xi Jin, Yue Li, Ya-Hao Wang, Chao-Yu Li, Miao-Miao Liang, Rajapandiyam Panneerselvam, Qing-Chi Xu, De-Yin Wu, Zhi-Lin Yang, Jian-Feng Li, and Zhong-Qun Tian. Shell-isolated nanoparticle-enhanced raman spectroscopy study of the adsorption behaviour of dna bases on au(111) electrode surfaces. *Analyst*, 141:3731–3736, 2016.

- [27] Toshihiko Shibanuma, Pablo Albella, and Stefan A. Maier. Unidirectional light scattering with high efficiency at optical frequencies based on low-loss dielectric nanoantennas. *Nanoscale*, 8:14184–14192, 2016.
- [28] Toshihiko Shibanuma, Takayuki Matsui, Tyler Roschuk, Jacek Wojcik, Peter Mascher, Pablo Albella, and Stefan A. Maier. Experimental demonstration of tunable directional scattering of visible light from all-dielectric asymmetric dimers. *ACS Photonics*, 4(3):489–494, 2017.
- [29] Ángela Inmaculada Barreda Gómez. Electromagnetic behavior of nanoparticle dimers, Jul 2013.