



***Facultad
de
Ciencias***

**Comportamiento electromagnético de
nanopartículas de Oro. Efecto del tamaño
(Electromagnetic behavior of gold
nanoparticles. Size Effect)**

Trabajo de Fin de Grado
para acceder al

GRADO EN FÍSICA

Autor: Raúl Suárez García

Directores: Francisco González Fernández

Fernando Moreno Gracia

Septiembre-2015

Agradecimientos:

En primer lugar quiero agradecer a Paco y a Fernando por haberme dirigido este proyecto y haberme ayudado siempre que lo he necesitado. A Ángela, Yael y Andrea por toda la ayuda que me han dado. A mis padres y a mi hermano por apoyarme en todo momento y finalmente a mis amigos, no voy a nombrar a todos, que aunque no hayan participado en el proyecto han ayudado a que saliese adelante.

ÍNDICE

RESUMEN	4
ABSTRAC	5
1. INTRODUCCIÓN	6
2.OBJETIVOS Y ESQUEMA DEL TRABAJO	8
2.1-Objetivos.....	8
2.2-Esquema de trabajo.....	8
3. CONCEPTOS TEÓRICOS	9
3.1-Teoria de Mie.....	9
3.1.1-Solución a la ecuación de ondas.....	9
3.1.2-Campo electromagnético difundido e interno.....	11
3.1.3-Secciones eficaces de difusión absorción y extinción.....	14
3.1.4-Particula pequeña comparada con la longitud de onda.....	15
3.1.5-Intensidad difundida.....	16
3.2-Dispersión en metales: Modelo de Drude-Lorentz.....	16
4. RESULTADOS Y ANÁLISIS	19
4.1-Programas empleados.....	19
4.2-Eficiencias de extinción dispersión y absorción del oro.....	21
4.3-Dispersión en la región de campo cercano del oro.....	25.
4.4-Dispersión en la región de campo lejano del oro.....	29
5. CONCLUSIONES	32
6. BIBLIOGRAFÍA	34
APENDICE 1: PROGRAMAS MATLAB	36
Código 1-Mie_ab.....	36
Código 2-efiextAu.....	37
Código 3-efiscaAu.....	39
Código 4-efiabsAu.....	42
Código 5-represntefiext.....	45
Código 6-represntefis.....	45
Código 7-Mie_campoelcsca.....	46
Código 8-Mie_campoalejano.....	49

Resumen

En la actualidad, hay una rama de la nanotecnología que está adquiriendo gran importancia debido a las numerosas aplicaciones que pueden surgir. Esta rama es la nanoplasmónica, que es la rama que estudia la interacción de la radiación electromagnética con las nanopartículas metálicas.

Las características de las nanopartículas metálicas, en concreto la posibilidad de excitar resonancias plasmónicas superficiales localizadas, hacen de estas una gran herramienta, con un gran número de aplicaciones en diversos campos, como el de las comunicaciones, energías renovables y el de medicina. El oro, cuyo comportamiento es bien conocido, es capaz de excitar resonancias plasmónicas superficiales localizadas y además es un material biocompatible, hace que sean nanopartículas de este material las que se estén investigando o comenzando a emplear en diversas aplicaciones, como por ejemplo en la espectroscopia Raman de superficie aumentada (SERS), como agente terapéutico, como anticonceptivo, etc...[1-3]

Es por eso que en este trabajo, se ha realizado un estudio del comportamiento electromagnético de nanopartículas de oro, y el efecto del tamaño de la partícula en este. Se analiza, para nanopartículas de oro de distintos tamaños, la extinción de la intensidad del haz incidente, las resonancias plasmónicas que aparecen y su origen, como son las distribuciones de energía en el entorno de la nanopartícula y alejados de ella.

Los resultados obtenidos muestran como las nanopartículas de radios pequeños tienen un comportamiento similar al de un dipolo eléctrico, ya que aparece una única resonancia, que es la dipolar eléctrica. Al aumentar el tamaño de la partícula se observa cómo se aleja del comportamiento dipolar y comienzan a aparecer resonancias plasmónicas de órdenes superiores, formando patrones de difusión más complejos. Además al aumentar el tamaño, todas las resonancias sufren un desplazamiento hacia longitudes de onda mayores. Respecto a la extinción de la intensidad del haz incidente, para partículas pequeñas predomina el fenómeno de absorción mientras que al aumentar el tamaño de la partícula la dispersión va predominando cada vez más frente a la absorción.

PALABRAS CLAVE: Nanopartículas metálicas, dispersión, Mie, extinción, resonancias plasmónicas, campo cercano, campo lejano.

Abstract

Currently, there is a branch of nanotechnology that is gaining great importance due to the applications that can appear from it. This branch is called nanoplasmonic, which is the branch that studies the interaction of electromagnetic radiation with metallic nanoparticles.

The characteristics of metal nanoparticles, specifically the ability to excite localized surface plasmon resonances, makes them a great tool with a large number of applications in different fields, such as communications, renewable energy and medicine. Gold, whose behavior is well known, is able to excite localized surface plasmon resonance and it is also a biocompatible material. These characteristics are the reason why gold's nanoparticles are being under investigation or beginning to use in multiple applications for instance, in enhanced surface Raman spectroscopy, as a therapeutic agent, agent for contraception.....[1-3]

That is why in this investigation, we have studied the electromagnetic behavior of gold nanoparticles, and the effect of particle size on this. For gold nanoparticles of various sizes, it analyzes the extinction of the incident intensity beam, the plasmon resonances, when appear, such as energy distributions in the vicinity of the nanoparticle and away from it.

The results show that nanoparticles of small radio have a similar behavior of an electric dipole, a single resonance appears corresponding to the electric dipole resonance. By increasing the size of the particle, the dipolar behavior starts to dissappear and begin to appear plasmonic resonances of higher orders to form more complex distribution patterns. In addition to increasing the size, all resonances suffer a shift to larger wavelengths. Regarding the extinction of the incident intensity beam, for small particles the absorption phenomenon is dominant. When the particle size increases the scattering phenomenon start to be dominant.

KEYWORDS: metal nanoparticles, scattering, Mie, extinction, plasmonic resonance, near field, far field

1.-Introducción

A lo largo de la historia, el ser humano ha intentado explicar que es la luz y como interacciona esta con la materia. Han surgido muchas teorías hasta llegar a la respuesta de la onda-corpúsculo que tenemos hoy en día, pasando por rayos que salen de los ojos en la antigua Grecia, a pequeñas partículas de luz que rebotan. A medida que se realizaban avances sobre el tema, iban surgiendo avances tecnológicos que permitían mejorar algunos aspectos de la vida, como el invento del telescopio de Galileo, el láser, hasta los móviles que hoy en día todo el mundo utiliza. Aunque los descubrimientos tecnológicos han sido inmensos, hoy en día siguen apareciendo muchos y fue Richard Feynman quien, con su discurso “There’s plenty of Room at the Bottom”, abrió un camino hacia lo que hoy conocemos como la nanotecnología.

La nanotecnología es el campo de la ciencia aplicada que se dedica al control y a la manipulación de la materia a escala nanométrica. Aunque la nanotecnología es un campo reciente, los materiales nanoestructurados ya han sido utilizados en aplicaciones prácticas en nuestra vida diaria durante muchos años. Un caso famoso de uso de nanopartículas de oro en la antigüedad es la copa de Lycurgus, que fue creada por los romanos. Si la copa es iluminada desde fuera con luz blanca, las partículas de oro más grandes dispersan predominantemente el verde, haciéndola ver de ese mismo color. Sin embargo, cuando la copa se ilumina desde adentro las partículas más pequeñas absorben el verde y el azul, logrando que se observe de color rojo. Otros ejemplos de uso de nanopartículas metálicas son el color rojo de los vitrales en las catedrales de Europa, que se obtenía utilizando nanopartículas de oro, o la película fotográfica utiliza nanopartículas de plata. Dentro del campo de la nanotecnología existe una rama que se encarga del estudio de la interacción de la radiación electromagnética con los materiales nanoestructurados, que podría decirse ser una mezcla de la nanotecnología y la fotónica, conocida como nanofotónica [4].



Fig1.1:En la fotografía (a), de la izquierda, se muestra la Copa de Lycurgus hecha por los romanos usando nanopartículas de oro donde se observa verde la luz reflejada y rojo en la luz que se transmite. En la fotografía (b) se muestra el Vitral de la Catedral de Milán donde el rojo es producido por nanopartículas de oro.[1]

En el caso de que el estudio de la interacción radiación-materia sea de una nanopartícula metálica, existe una rama específica que estudia los fenómenos ópticos en la proximidad de sus superficies, conocida como nanoplasmonica. Cuando interacciona un campo electromagnético, de una determinada longitud de onda λ , con una nanopartícula metálica, los electrones libres de la superficie comienzan a oscilar. A esas oscilaciones se les conoce como oscilaciones de plasma, y a los distintos modos de oscilación se les llama plasmones. Las características de estos plasmones están relacionadas con las propiedades ópticas del metal, su geometría y dimensiones, longitud de onda de la radiación incidente, y el medio circundante.

Una radiación electromagnética que incida con la frecuencia adecuada puede llegar a generar una resonancia plasmónica. La resonancia plasmónica se genera cuando el campo electromagnético incidente hace que la nube de electrones libres oscile con la misma frecuencia a la que el campo incidente oscila. Las resonancias plasmónicas de superficie producen un campo electromagnético muy intenso y localizado en la proximidad de la superficie de la nanopartícula. [5]

Un aspecto negativo de las nanopartículas metálicas es que pueden presentar absorción de la radiación electromagnética al ser irradiadas, por lo que parte de la energía que incide sobre estas puede ser perdida, ya que por efecto Joule se transforma en energía térmica. Por eso se están realizando estudios en la actualidad con nanopartículas dieléctricas con alto índice de refracción, que tienen menos pérdidas.

La aparición de plasmones de superficie localizados, y su dependencia con el medio que rodea a la partícula, hace de las nanopartículas una buena herramienta de monitoreo óptico y de formación de imágenes. Un campo en el que la nanoplasmonica ha generado un gran número de aplicaciones es el de la medicina. Una de esas aplicaciones es su uso en la espectroscopia Raman de superficie aumentada (SERS) para detección de componentes químicos y bioquímicos, detección de células cancerígenas, etc... Otra aplicación importante en el campo de la medicina es el uso de nanopartículas como agentes terapéuticos. Una vez que las nanopartículas se unen a tejidos dañados o a células cancerosas, se puede inducir un calentamiento mediante irradiación. El calentamiento provoca la destrucción de las células o tejidos dañados, sin dañar el tejido sano que las rodean, como por ejemplo células tumorales, o incluso en China se ha comenzado a investigar su uso como anticonceptivo. [1-3]

Todas estas aplicaciones y otras que no se han nombrado hacen que el estudio de la interacción de la radiación electromagnética con nanopartículas metálicas y sea de un gran interés. Es por eso que en este trabajo se ha realizado el estudio del comportamiento electromagnético de estas nanopartículas, en particular del oro.

2.-Objetivos y Esquema de trabajo

2.1-Objetivos

En este trabajo se pretende realizar un estudio del comportamiento electromagnético de nanopartículas de oro, y el efecto que tiene en este comportamiento su tamaño. El motivo de que se elija el oro es que es bien conocido su comportamiento en la literatura y es un material biocompatible. El estudio se basa en la observación de los fenómenos que producen dichas nanopartículas cuando incide un haz de radiación electromagnética determinada sobre ellas. Se analiza la extinción de la intensidad del haz incidente, las resonancias plasmónicas que aparecen y su origen, y como son las distribuciones de energía en el entorno de la nanopartícula y alejado de ella.

2.2-Esquema de Trabajo

En primer lugar se muestra la teoría necesaria para abordar el problema de extinción de luz por una partícula esférica, la teoría de Mie, y las bases teóricas sobre el modelo de Drude-Lorentz (Capítulo 3). En segundo lugar se exponen los resultados obtenidos mediante los programas que se crearon con Matlab (Anexo 1), y el análisis de dichos resultados (Capítulo 4). Para finalizar se presentan las conclusiones obtenidas (Capítulo 5). Para realizar el estudio de las nanopartículas nos hemos centrado en el análisis de:

1. Eficiencias de extinción, dispersión, y absorción.
2. Intensidad del campo eléctrico en la región de campo cercano para las distintas resonancias
3. Intensidad del campo eléctrico en la región de campo lejano para las distintas resonancias

En todo el trabajo se han considerado partículas de diferentes tamaños, en el rango de 20 nm a 250 nm de radio.

3.-Conceptos Teóricos

3.1-Teoría de Mie

En 1908 Gustav Mie desarrollo una teoría que explicaba el comportamiento electromagnético de absorción y dispersión por partículas esféricas. Partiendo de las ecuaciones de Maxwell, y mediante un desarrollo matemático complejo, Mie obtuvo las ecuaciones del campo electromagnético dispersado e interno de la partícula. En este capítulo se muestran las bases de esta teoría que se utilizará para realizar el cálculo del campo electromagnético difundido por una partícula esférica de radio r_{par} , constante dieléctrica ϵ , y permeabilidad magnética μ , que es iluminada por una onda plana propagándose paralela al eje Z y polarizada paralela al eje X, tal y como se muestra en la Figura 3.1. [6]

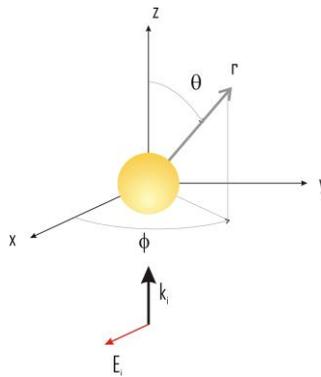


Fig3.1-Representación de un haz de luz polarizado en el eje X y propagándose paralelo al eje Z hacia una partícula esférica.

3.1.1-Solución a la ecuación de ondas

Como impone la teoría electromagnética, un campo electromagnético en un medio linear, isótropo, homogéneo debe satisfacer la ecuación de ondas:

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

Siendo \vec{E} el campo eléctrico y \vec{H} el campo magnético que se desea obtener y Donde k viene dado por $k = \omega\sqrt{\epsilon\mu}$, ω es la frecuencia del campo electromagnético y ϵ es la permitividad eléctrica y μ la permeabilidad magnética relativas. Además al tratarse de una partícula esférica aislada en un medio linear, isotrópico, homogéneo, y libre de cargas, se cumple que la divergencia de \vec{E} y \vec{H} son nulas:

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

Y mediante las ecuaciones de Maxwell se puede obtener una relación entre el campo eléctrico y magnético que es de la siguiente forma:

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = i\omega\mu\vec{H} \quad \vec{\nabla} \times \vec{H} = -i\omega\varepsilon\vec{E} \quad (3.3)$$

Para resolver las ecuaciones (3.1) se crea, dada una función escalar ψ , una función vectorial \vec{M} que cumple:

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

Donde c es un vector constante y \vec{M} es un vector generado por ψ . Sabiendo que la divergencia en el desarrollo de cualquier función vectorial es nula y aplicando el operador $\nabla^2 + k^2$ a ambos lados de la ecuación (3.4) se obtiene:

$$\nabla^2 \vec{M} + k^2 \vec{M} = \vec{\nabla} \times [c(\nabla^2 \psi + k^2 \psi)] \quad (3.5)$$

Por lo que \vec{M} satisface la ecuación de onda vectorial si ψ es solución de la ecuación de onda escalar. A partir de \vec{M} se puede construir otra función vectorial \vec{N} que viene dada por:

$$\vec{N} = \frac{\vec{\nabla} \times \vec{M}}{k} \quad (3.6)$$

Donde \vec{N} también tiene divergencia nula y cumple la ecuación de onda vectorial. Esta relación se puede escribir a demás como:

$$\vec{\nabla} \times \vec{N} = \vec{M}k \quad (3.7)$$

De las ecuaciones (3.6) y (3.77) se puede ver que las propiedades que tienen \vec{M} y \vec{N} cumplen todas las propiedades requeridas de un campo electromagnético:

- a) $\vec{\nabla} \times \vec{M}$ y es proporcional a \vec{N} viceversa
- b) Ambas satisfacen la ecuación de onda vectorial

Así el problema de encontrar soluciones a la ecuaciones de campo se reduce a encontrar soluciones a la ecuación de onda escalar ψ . Así a \vec{M} y \vec{N} se les conoce como los vectores armónicos. La elección de las funciones de generación viene dado por cualquier simetría que pueda aparecer en el problema. Dado que el interés está en partículas esféricas se elige funciones ψ que satisfacen la ecuación de onda en coordenadas esféricas r, ϑ, ϕ . Se puede escribir la ecuación de onda escalar aplicando coordenadas esféricas y separación de variables de la siguiente forma:

$$\psi(r, \vartheta, \phi) = R(r)\Theta(\vartheta)\Phi(\phi) \quad (3.8)$$

La solución completa de la ecuación de onda escalar ψ viene dada entonces como:

$$\psi_{emn} = \cos(m \cdot \phi) P_n^m(\cos \vartheta) z_n(k \cdot r) \quad (3.9)$$

$$\psi_{omn} = \sin(m \cdot \phi) P_n^m(\cos \vartheta) z_n(k \cdot r) \quad (3.10)$$

Donde los subíndices e y o denotan si la función tiene una paridad positiva (par) o negativa (impar) respectivamente, m es una constante entera determinada por condiciones que ψ debe satisfacer, P_n^m son las funciones de Legendre asociadas de primer tipo de grado n y orden m , donde $n = m, m + 1..$, y z_n son las funciones esféricas de Bessel de orden enésimo $j_n, y_n, h_n^{(1)}, h_n^{(2)}$ que están relacionadas con las funciones de Bessel de primer y segundo orden, J_n y Y_n respectivamente, de la siguiente manera:

$$j_n(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2 \cdot \rho}} J_{n+\frac{1}{2}}(\rho) \quad (3.11)$$

$$y_n(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2 \cdot \rho}} Y_{n+\frac{1}{2}}(\rho) \quad (3.12)$$

$$h_n^{(1)}(\rho) = j_n(\rho) + iy_n(\rho) \quad (3.13)$$

$$h_n^{(2)}(\rho) = j_n(\rho) - iy_n(\rho) \quad (3.14)$$

Donde $\rho = k \cdot r$. Sustituyendo las soluciones ψ_{emn} y ψ_{omn} en (3.4) y (3.6) obtenemos los armónicos esféricos vectoriales:

$$\vec{M}_{emn} = \vec{v} \times (r \psi_{emn}) ; \vec{M}_{omn} = \vec{v} \times (r \psi_{omn}) \quad (3.15)$$

$$\vec{N}_{emn} = \frac{\vec{v} \times \vec{M}_{emn}}{k} ; \vec{N}_{omn} = \frac{\vec{v} \times \vec{M}_{omn}}{k} \quad (3.16)$$

Por lo tanto los armónicos esféricos vectoriales $\vec{M}_{emn}, \vec{M}_{omn}, \vec{N}_{emn}, \vec{N}_{omn}$ son los modos normales de una partícula esférica.

3.1.2-Campo electromagnético difundido e interno

Una vez conocidos los armónicos esféricos vectoriales, que llamaremos VSH, podemos obtener el campo en cualquier punto del espacio ya que este se puede escribir como una combinación lineal de los VSH. Consideremos una esfera situada en el origen de coordenadas, en el vacío, por lo que $\varepsilon = 1$. Dicha partícula es iluminada con una onda electromagnética plana, de longitud de onda λ , polarizada en el eje x que incide paralela al eje Z, como se observa en la Figura 3.1. Las ecuaciones del campo eléctrico

y magnético incidente (\vec{E}_i, \vec{H}_i) en coordenadas esféricas vienen dada por las siguientes ecuaciones:

$$\vec{E}_i = E_\emptyset e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{e}_x \quad ; \quad \vec{H}_i = E_\emptyset e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{e}_y \quad (3.17)$$

Donde \vec{k} es el vector de onda tal que $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ y E_\emptyset es la amplitud del campo incidente. La expansión de este campo electromagnético incidente en VSH se expresa como:

$$\vec{E}_i = E_\emptyset \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} (\vec{M}_{o1n}^{(1)} - i\vec{N}_{e1n}^{(1)}) \quad (3.18)$$

$$\vec{H}_i = -\frac{k}{\omega\mu} E_\emptyset \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} (\vec{M}_{e1n}^{(1)} - i\vec{N}_{o1n}^{(1)}) \quad (3.19)$$

También se debe expandir el campo electromagnético disperso (\vec{E}_s, \vec{H}_s) y el interno de la esfera (\vec{E}_1, \vec{H}_1) en VSH. Para ello debemos imponer en el contorno de la esfera y el medio la siguiente condición de contorno:

$$(\vec{E}_i + \vec{E}_s - \vec{E}_1) \times \vec{e}_r = (\vec{H}_i + \vec{H}_s - \vec{H}_1) \times \vec{e}_r = 0 \quad (3.20)$$

Esta condición de contorno, la ortogonalidad de los VSH y la forma de la expansión del campo incidente dictan la forma de expansión de los campos disperso e interno de la esfera:

$$\vec{E}_s = E_\emptyset \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} (ia_n \vec{N}_{e1n}^{(3)} - b_n \vec{M}_{o1n}^{(3)}) \quad (3.21)$$

$$\vec{H}_s = \frac{k}{\omega\mu} E_\emptyset \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} (ib_n \vec{N}_{o1n}^{(3)} + a_n \vec{M}_{e1n}^{(3)}) \quad (3.22)$$

$$\vec{E}_1 = E_\emptyset \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} (c_n \vec{M}_{o1n}^{(1)} - id_n \vec{N}_{e1n}^{(1)}) \quad (3.23)$$

$$\vec{H}_1 = -\frac{k_1}{\omega\mu_1} E_\emptyset \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} (d_n \vec{M}_{e1n}^{(1)} + ic_n \vec{N}_{o1n}^{(1)}) \quad (3.24)$$

Donde k_1 y μ_1 son el numero de onda y la permeabilidad magnética relativa de la partícula esférica respectivamente, el superíndice (1) indica el primer orden de la función de Bessel usada, que corresponde a la función escalar $j_n(\rho)$ y el superíndice (3) indica la dependencia radial que viene dada por la función de Bessel $h_n^{(1)}(\rho)$. Como consecuencia de que en el origen debe ser finito se requiere que se tome $j_n(k_1 \cdot r)$ como función esférica de Bessel apropiada en las funciones generadoras para el vector armónico dentro de la esfera.

Los coeficientes a_n, b_n, c_n y d_n son los coeficientes de la expansión y que aplicando la condición de contorno (3.20) se pueden obtener sus expresiones que tienen la siguiente forma. En el caso de los coeficientes de dispersión:

$$a_n = \frac{\mu m^2 j_n(mx) [x j_n(x)]' - \mu_1 j_n(x) [m x j_n(mx)]'}{\mu m^2 j_n(mx) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 h_n^{(1)}(x) [m x j_n(mx)]'} \quad (3.25)$$

$$b_n = \frac{\mu_1 j_n(mx) [x j_n(x)]' - \mu j_n(x) [m x j_n(mx)]'}{\mu_1 j_n(mx) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu h_n^{(1)}(x) [m x j_n(mx)]'} \quad (3.26)$$

En el caso de los coeficientes del campo interno de la partícula:

$$c_n = \frac{\mu_1 j_n(x) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 h_n^{(1)}(x) [x j_n(x)]'}{\mu_1 j_n(mx) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu h_n^{(1)}(x) [m x j_n(mx)]'} \quad (3.27)$$

$$d_n = \frac{\mu_1 m j_n(x) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 m h_n^{(1)}(x) [x j_n(x)]'}{\mu m^2 j_n(mx) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 h_n^{(1)}(x) [m x j_n(mx)]'} \quad (3.28)$$

Donde x es el parámetro de tamaño de la partícula y m es el índice de refracción relativo que vienen dado por las expresiones:

$$x = k r_{par} = \frac{2\pi N r_{par}}{\lambda} \quad ; \quad m = \frac{n_1}{\tilde{n}} \quad (3.29)$$

Donde n_1 es el índice de refracción de la partícula y \tilde{n} es el índice de refracción del medio. La expansión en términos de los coeficientes de dispersión de Mie nos da una expansión multipolar del campo. Los coeficientes a_n representan la contribución eléctrica mientras que los coeficientes b_n representan la contribución magnética del campo dispersado. El subíndice n indica el multipolo que estamos considerando. Por ejemplo $n = 1$ representa el termino dipolar, $n = 2$ representa el termino cuadrupolar, $n = 3$ representa el termino sextopolar y así sucesivamente. Mediante estos coeficientes se puede conocer a que longitud de onda se produce un determinado tipo de resonancia. Si por ejemplo para una determinada longitud de onda a_1 se hace máximo, a esa longitud de onda se produce una resonancia dipolar eléctrica. Los coeficientes de dispersión pueden ser simplificados introduciendo las funciones de Ricatti-Bessel:

$$\Psi_n(\rho) = \rho j_n(\rho) \xi_n(\rho) = \rho h_n^{(1)}(\rho) \quad (3.30)$$

Si tomamos la permeabilidad de la partícula y el medio la misma obtenemos:

$$a_n = \frac{m \Psi_n(mx) \Psi_n'(x) - \Psi_n(x) \Psi_n'(mx)}{m \Psi_n(mx) \xi_n'(x) - \xi_n(x) \Psi_n'(mx)} \quad (3.31)$$

$$b_n = \frac{\Psi_n(mx) \Psi_n'(x) - m \Psi_n(x) \Psi_n'(mx)}{\Psi_n(mx) \xi_n'(x) - m \xi_n(x) \Psi_n'(mx)} \quad (3.32)$$

3.1.3-Secciones eficaces de difusión, absorción, y extinción

Un valor de interés en el estudio de la difusión de luz por partículas esféricas es el de las secciones eficaces y las eficiencias. Las secciones eficaces se conocen como el cociente de la energía electromagnética que atraviesa una esfera imaginaria centrada en la partícula entre la intensidad del haz de luz incidente. Una vez obtenidos las ecuaciones del campo electromagnético y los coeficientes de Mie se pueden obtener las secciones eficaces. Para la sección eficaz de difusión se tiene:

$$\sigma_{sca} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n + 1) (|a_n|^2 + |b_n|^2) \quad (3.33)$$

Para la sección eficaz de extinción:

$$\sigma_{ext} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n + 1) \text{Re}\{ a_n + b_n \} \quad (3.34)$$

Como consecuencia del principio de conservación de la energía, la radiación extinguida tiene que ser la suma de la dispersada y la absorbida. Teniendo en cuenta esto se puede obtener la sección eficaz de absorción de la siguiente manera:

$$\sigma_{abs} = \sigma_{ext} - \sigma_{sca} \quad (3.35)$$

Una vez obtenidas las secciones eficaces se pueden conocer las eficiencias ya que son la relación entre la sección eficaz de interacción y la sección eficaz de la partícula. Para la eficiencia de dispersión:

$$Q_{sca} = \frac{\sigma_{sca}}{\pi r_{par}^2} = \frac{2\pi}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n + 1) (|a_n|^2 + |b_n|^2) \quad (3.36)$$

Para la eficiencia de extinción:

$$Q_{ext} = \frac{\sigma_{ext}}{\pi r_{par}^2} = \frac{2\pi}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n + 1) \text{Re}\{ a_n + b_n \} \quad (3.37)$$

Recurriendo de nuevo al principio de conservación de la energía obtenemos la eficiencia de absorción:

$$Q_{abs} = Q_{ext} - Q_{sca} \quad (3.38)$$

3.1.4-Partícula pequeña comparada con la longitud de onda

En el caso de que la partícula sea pequeña comparada con la longitud de onda $r_{par} \ll \lambda$, se realiza una aproximación de la teoría de Mie conocida como la aproximación de Rayleigh, donde se obtienen unas nuevas expresiones aproximadas del campo electromagnético y las secciones eficaces. Para poder realizar esta aproximación se deben cumplir dos condiciones [8]:

- El parámetro de tamaño de la partícula debe cumplir que $x \ll 1$
- El producto de $|m| \cdot x$ debe cumplir $|m| \cdot x \ll 1$

Recordando que $x = kr_{par}$. Bajo estas condiciones, teniendo en cuenta los vectores unitarios en coordenadas esféricas de las componentes del campo eléctrico $(e_r, e_\vartheta, e_\phi)$ obtenemos las siguientes expresiones para el campo eléctrico difundido:

$$E_{sr} = \frac{\cos\phi}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n i a_n n(n+1) h_n^{(1)} \pi_n \sin\vartheta \quad (3.39)$$

$$E_{s\vartheta} = \frac{\cos\phi}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (i a_n \xi_n' \tau_n - b_n \xi_n \pi_n) \quad (3.40)$$

$$E_{s\phi} = \frac{\sin\phi}{\rho} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (b_n \xi_n \tau_n - i a_n \xi_n' \pi_n) \quad (3.41)$$

Dónde:

$$\pi_n = \frac{P_n^1}{\sin\vartheta} \quad ; \quad \tau_n = \frac{dP_n^1}{d\vartheta} \quad (3.42)$$

$$E_n = i^n E_0 \frac{(2n+1)}{n(n+1)} \quad (3.43)$$

En este caso solo debemos considerar los términos de primer orden, $n=1$, es decir la contribución dipolar, ya que al ser la partícula pequeña comparada con la longitud de onda los términos cuadrupolares y de mayor orden son despreciables. Teniendo en cuenta esto, los únicos coeficientes de Mie que contribuyen son a_1 y b_1 que, realizando la aproximación, vienen dados por las siguientes expresiones:

$$a_1 = -\frac{i2x^3}{3} \frac{\epsilon-1}{\epsilon+2} + O(x^5) \quad (3.44)$$

$$b_1 \approx 0 \quad (3.45)$$

Bajo estas condiciones la expresión del campo electromagnético difundido esta dominado por a_1 por lo que se puede aproximar que la partícula difunde como un dipolo eléctrico.

3.1.5-Intensidad difundida

La intensidad en cualquier punto del espacio, según dice el teorema de Poynting, viene definida por el modulo del cuadrado del campo eléctrico en dicho punto, está relacionado con esta a través de una constante de proporcionalidad, por lo que la intensidad difundida se puede obtener aproximadamente como $I_s \approx |E_s|^2$. Pero dependiendo del punto donde se calcula la intensidad se puede realizar la aproximación de campo lejano. Esta aproximación se puede aplicar cuando la distancia al punto donde se calcula la intensidad desde el origen es mucho mayor que la longitud de onda del haz incidente, es decir se cumple la condición $k \cdot r \gg 1$. Para la aproximación de campo lejano se tienen las siguientes expresiones para la intensidad cuando la luz incidente esta polarizada paralela $I_{s||}$, y perpendicular $I_{s\perp}$, respecto al plano de incidencia [6]:

$$I_{s\perp} = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \tau_n + b_n \pi_n) \right)^2 \quad (3.46)$$

$$I_{s||} = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \pi_n + b_n \tau_n) \right)^2 \quad (3.47)$$

Teniendo en cuenta de nuevo el principio de conservación de la energía se tiene que la intensidad total dispersada I_T en la aproximación de campo lejano es:

$$I_T = I_{s||} + I_{s\perp} \quad (3.48)$$

3.2-Difusión en metales: Modelo de Drude-Lorentz

Según el modelo clásico que Lorentz propuso en 1905, en un sistema electrón-ion los electrones se encuentran unidos a los núcleos por fuerzas restauradoras lineales, por lo que se les podía aproximar a osciladores armónicos clásicos con frecuencia propia. Al incidir una onda electromagnética sobre el material, esta hacía que los osciladores comenzaran a oscilar emitiendo radiación, haciendo que su movimiento se rigiese por la ecuación de un oscilador armónico amortiguado forzado. Para este modelo, la función dieléctrica relativa ε , correspondiente a un conjunto de osciladores armónicos amortiguados, cada uno con una frecuencia de resonancia ω_0 , se puede expresar de la siguiente manera:

$$\varepsilon = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \quad (3.49)$$

Donde γ es la constante de amortiguamiento de los osciladores. En el caso de los metales, Drude propone que los electrones pertenecientes a las orbitas atómicas externas no están ligados a los núcleos, sino que se pueden aproximar como

electrones libres, es decir que $\omega_0 = 0$. El caso que aproxima esa nube de electrones libres a un gas ideal se le conoce como el modelo de Drude-Lorentz. [4]

Cuando incide una onda electromagnética sobre el metal, esta interactúa con los electrones de la banda de conducción y hace que se produzca la oscilación coherente del gas de electrones a la que se conoce como, oscilación de plasma y a los distintos modos de oscilación se conocen como plasmones. Si dicha onda electromagnética oscila a la frecuencia adecuada puede llegar a generar una resonancia plasmónica. Esta resonancia se genera cuando el campo incidente hace que la nube de electrones libres oscile a la misma frecuencia que este.

Se pueden distinguir dos tipos de plasmones. Un tipo es conocido como “plasmones de superficie”, cuando el gas de electrones libres está confinado en un espacio dimensional (2D). El otro tipo es llamado “Plasmones de superficie localizados”, cuando el gas de electrones libres está confinado en una estructura tridimensional (3D).

Los plasmones de superficie se presentan en la interfaz entre un dieléctrico y un metal bajo unas determinadas circunstancias. La parte real de la constante dieléctrica del metal debe ser mayor que la parte imaginaria y el vector de ondas de la luz incidente debe igualar el vector de onda del plasmón de superficie \vec{k}_{SP} [9]. De esta forma se redistribuyen los electrones libres del metal generando una onda que viaja a lo largo del sustrato como se observa en la figura 3.2:

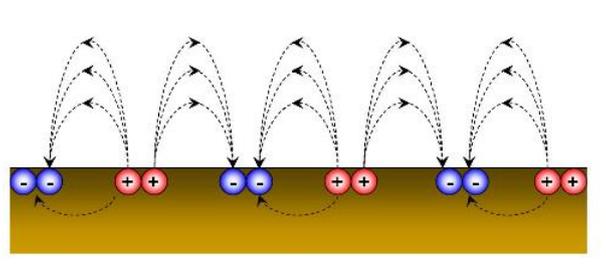


Fig 3.2: Representación de la formación de un plasmón en la interfase de un dieléctrico, representado de blanco, y un metal, representado de amarillo [11].

Sin embargo el número de onda del plasmón es siempre mayor que el vector de onda de la luz en el espacio libre, por lo que un plasmón de superficie no puede ser excitado por luz propagándose en el vacío. Para ello se ha de modificar alguna de las componentes de ese vector de onda y existen ya diversos métodos para hacerlo [9].

Cuando una luz incide sobre una nanopartícula metálica esférica la nube de electrones libres comienza a oscilar a la misma frecuencia de la luz incidente que dan lugar a los plasmones de superficie localizados. Cuando los electrones del metal oscilan coherentemente, la nube de electrones es desplazada respecto del ion, dando lugar a distribuciones superficiales de carga. Dependiendo del tamaño, la forma de la

nanopartícula, y la longitud de onda de la luz incidente, se forman distintas distribuciones de carga.

Si el tamaño de la partícula es mucho menor que la longitud de onda de la luz incidente, el campo eléctrico oscilante de dicha luz induce un dipolo eléctrico en la partícula desplazando a una parte de los electrones móviles deslocalizados a una dirección lejos del resto de la partícula metálica, generando así una carga negativa en un lado de la partícula y dejando al otro lado de la partícula a los núcleos y sus electrones internos que no se han desplazado y forman una carga opuesta positiva produciendo así un dipolo. En cambio si el tamaño de la partícula aumenta o disminuye la longitud de onda entonces las distribuciones de carga que se crean son más complejas. En la Figura 3.3, se pueden observar las distribuciones de carga en partículas esféricas metálicas nanométricas en dos casos diferentes [10]:

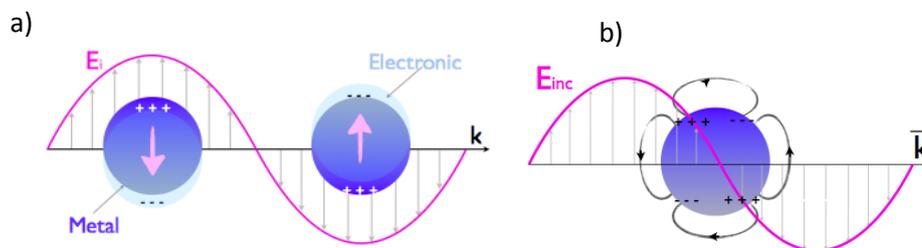


Fig3.3: Representación de una partícula pequeña comparada con la longitud de onda del campo que incide sobre ella, y ésta emite como un dipolo eléctrico(a) y a su derecha una partícula más grande (a), y ésta emite como un cuadrupolo eléctrico (b) [10]

Estos plasmones superficiales localizados generan campos electromagnéticos confinados intensos entorno a la partícula metálica. Para que estos plasmones de superficie localizados se observen bien es necesaria la condición de que la parte imaginaria sea muy pequeña y positiva ya que este término está asociado a las pérdidas por efecto Joule. Un material que cumple todos los requisitos en el rango del visible para observar plasmones superficiales localizados es el oro. Por eso, por ser un material bien conocido y por su biocompatibilidad se hace el estudio en este trabajo.

4-Resultados y Análisis

En este apartado se muestran los resultados obtenidos a partir de los programas desarrollados en Matlab, que se explicaran a continuación y cuyos códigos pueden encontrarse en el Anexo 1. Los valores de la constante dieléctrica ε del oro en función de λ son los propuestos por Jhonson y Christy [11] y se ha tomado siempre la permeabilidad magnética del medio y la de la partícula como $\mu = 1$. Se procederá a presentar y analizar los resultados de la siguiente manera:

- En primer lugar se presentaran los resultados obtenidos para las eficiencias de extinción, absorción, y dispersión de la partícula para distintos tamaños
- En segundo lugar se analiza la intensidad del campo eléctrico en la región de campo cercano con partículas de distintos tamaños.
- En tercer lugar se analiza la intensidad del campo eléctrico en la región de campo lejano para distintos tamaños.

Todo el análisis se ha realizado considerando partículas con diferentes tamaños en el rango de 20 nm a 250 nm de radio.

4.1-Programas empleados

Para el cálculo y representación de las eficiencias de extinción, absorción y dispersión, y la intensidad del campo eléctrico dispersado en la región de campo cercano y lejano, se han desarrollado unos códigos (Anexo 1) usando el programa Matlab. A continuación se describe cada uno de los programas desarrollados:

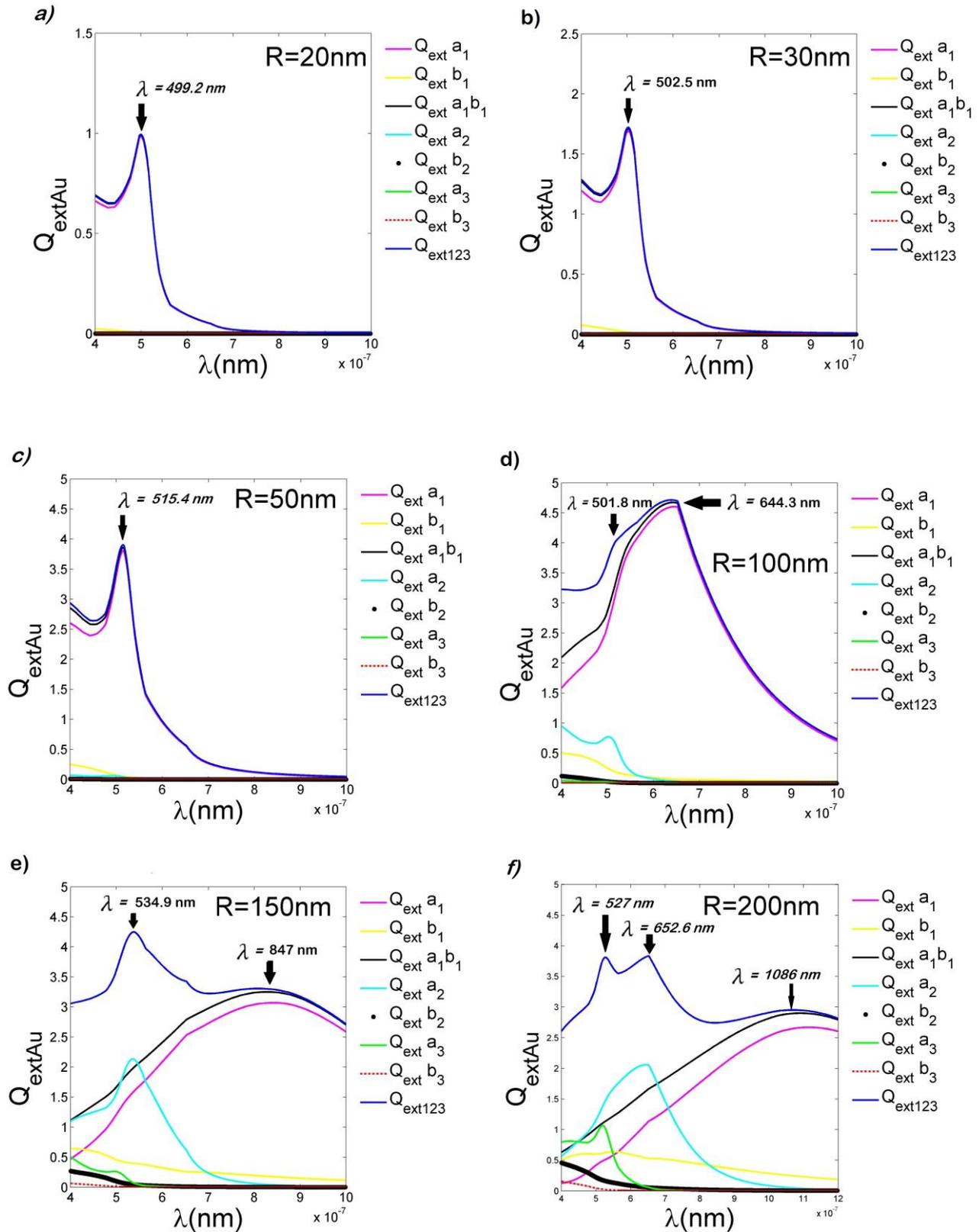
- **Mie_ab:** Calcula los coeficientes de Mie a_n y b_n , según las ecuaciones (3.31) y (3.32) respectivamente. Para la ejecución de este programa es necesario introducir los parámetros de: el valor del orden del último coeficiente del cálculo, el índice de refracción de la partícula y el medio, el radio de la partícula, y la longitud de onda del haz incidente.
- **efiextAu:** Calcula la eficiencia de extinción, total y la correspondiente a cada coeficiente de Mie, de una partícula de oro de un radio determinado, según la ecuación (3.34), y la representa frente a la longitud de onda del haz incidente. Para la ejecución de este programa es necesario introducir los parámetros de: el valor del orden del último coeficiente del cálculo, el índice de refracción del medio, el radio de la partícula, y la longitud de onda del haz incidente. Este programa carga los valores de la constante dieléctrica ε del oro en función de λ [11] y los coeficientes obtenidos de *Mie_ab*.
- **efiscaAu:** Calcula la eficiencia de extinción, total y la correspondiente a cada coeficiente de Mie, de una partícula de oro de un radio determinado, según la ecuación (3.33), y la representa frente a la longitud de onda del haz incidente.

Para la ejecución de este programa es necesario introducir los parámetros de: el valor del orden del último coeficiente del cálculo, el índice de refracción del medio, el radio de la partícula, y la longitud de onda del haz incidente. Este programa carga los valores de la constante dieléctrica ϵ del oro en función de λ [11] y los coeficientes obtenidos de *Mie_ab*.

- ***efiabsAu***: Calcula la eficiencia de extinción, total y la correspondiente a cada coeficiente de Mie, de una partícula de oro de un radio determinado, según la ecuación (3.35), y la representa frente a la longitud de onda del haz incidente. Para la ejecución de este programa es necesario introducir los parámetros de: el valor del orden del último coeficiente del cálculo, el índice de refracción del medio, el radio de la partícula, y la longitud de onda del haz incidente. Este programa carga los valores de la constante dieléctrica ϵ del oro en función de λ [11] y los coeficientes obtenidos de *Mie_ab*.
- ***Representefiext***: Representa las eficiencias de extinción de las partículas de oro de distinto tamaño frente a la longitud de onda del haz incidente. Para la ejecución de este programa es necesario introducir los cálculos de las eficiencias de extinción de las partículas de distintos tamaños calculadas con *efiextAu*.
- ***Representefis***: Representa en una misma figura las eficiencias de extinción, absorción y dispersión de una partícula de oro de un radio determinado frente a la longitud de onda del haz incidente. Para la ejecución de este programa es necesario introducir los cálculos de las eficiencias de extinción, absorción y dispersión de la partícula de radio deseado calculadas previamente con *efiextAu*, *efiabsAu* y *efiscaAu*.
- ***Mie_campoelecscsa***: Calcula el valor del campo eléctrico dispersado para una nanopartícula esférica cerca de su superficie, teniendo en cuenta únicamente los tres primeros coeficientes de Mie, según la ecuación (3.21). Además representa en un mapa de colores el valor del módulo al cuadrado del campo eléctrico, generando así un mapa de campo cercano. Para la ejecución de este programa es necesario introducir: el valor del orden del último coeficiente del cálculo, el índice de refracción del medio, el radio de la partícula, y la longitud de onda del haz incidente y además llamar al programa *Mie_ab*.
- ***Mie_campolejano***: Calcula y representa en coordenadas polares el valor de la intensidad del campo eléctrico dispersado, en la región de campo lejano, teniendo en cuenta únicamente los tres primeros coeficientes de Mie, según las ecuaciones (3.46) y (3.47). Se consideran los casos que el haz incidente está polarizado paralelo y perpendicular al plano de incidencia, así como la suma de ambos. Para la ejecución de este programa es necesario introducir: el valor del orden del último coeficiente del cálculo, el índice de refracción del medio y la partícula, el radio de la partícula, y la longitud de onda del haz incidente y además llamar al programa *Mie_ab*.

4.2-Eficiencias de Absorción, Dispersión, y Extinción:

A continuación se exponen en primer lugar los resultados obtenidos de las eficiencias de extinción de partículas de oro aisladas de distinto tamaños (Figura 4.1). Recordar que en todos los casos la luz incide paralela al eje Z, esta polarizada paralela al eje X y se toma como amplitud del campo eléctrico incidente $E_0 = 1$:



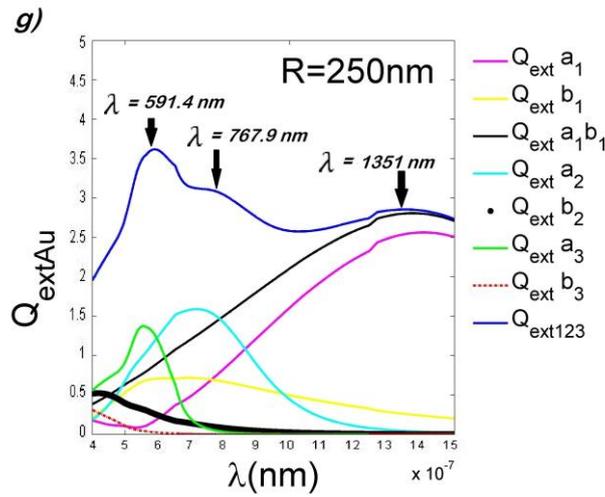


Fig 4.1: Eficiencia de extinción en función de la longitud de onda de la luz incidente, de una partícula de oro de 20 nm de radio (a), 30 nm de radio (b), 50 nm de radio (c), 100 nm de radio (d), 150 nm de radio (e), 200 nm de radio (f) y 250 nm de radio (g). Se muestra en líneas de distintos colores las contribuciones de las distintas resonancias donde $Q_{ext}a_1$ es la contribución de la resonancia dipolar eléctrica, $Q_{ext}a_2$ es la contribución de la resonancia cuadrupolar eléctrica, $Q_{ext}a_3$ es la contribución de la resonancia sextopolar eléctrica, $Q_{ext}b_1$ es la contribución de la resonancia dipolar magnética, $Q_{ext}b_2$ es la contribución de la resonancia cuadrupolar magnética, $Q_{ext}b_3$ es la contribución de la resonancia sextopolar magnética, $Q_{ext}a_1b_1$ es la suma de $Q_{ext}a_1$ y $Q_{ext}b_1$, y $Q_{ext}123$ es la suma de todas las contribuciones anteriores.

En la figura anterior se puede observar que para las partículas de radio entre 20 nm y 50 nm, es decir partículas pequeñas comparadas con la longitud de onda que cumple el criterio de Rayleigh, solo presentan una única resonancia, la dipolar eléctrica, correspondiente al término dipolar eléctrico a_1 que se representa con una línea rosa. Esta coincide con la línea de azul oscuro que es la suma total de todas las contribuciones de los coeficientes de Mie, por lo que la partícula extingue como si fuese un dipolo eléctrico, para esa longitud de onda, tal y como se esperaba según la teoría. El pico de la resonancia se va desplazando hacia longitudes de onda mayores a medida que aumenta el tamaño.

Para la partícula de 100 nm de radio, se sigue observando la resonancia dipolar eléctrica, pero se observa además que hay una contribución de una resonancia cuadrupolar eléctrica, correspondiente al término cuadrupolar eléctrico a_2 representado por una línea azul claro, que aparece en torno a los 500nm. Para la partícula de 150 nm de radio ya se pueden apreciar las dos resonancias separadas, la cuadrupolar eléctrica que sigue en torno a los 500nm, y la resonancia dipolar eléctrica que se ha salido ya del rango del visible desplazándose a una longitud de onda de 847 nm, en el infrarrojo. Al aumentar más el tamaño de la partícula, a 200 nm y 250 nm de radio, las resonancias dipolar y cuadrupolar eléctrica que se desplazan aún más hacia el infrarrojo, y aparece una nueva resonancia, la sextopolar eléctrica, correspondiente al término dipolar eléctrico a_3 que se representa con una línea verde.

Respecto a los efectos magnéticos correspondientes a los términos de b_n decir que son casi nulos para radios pequeños y a partir de $r_{par} = 100 \text{ nm}$, b_1 , que corresponde a la resonancia dipolar magnética, es la única apreciable.

De una forma visual hemos visto que los picos de las resonancias sufren un corrimiento hacia el infrarrojo al aumentar el tamaño de la partícula. La Tabla 4.1 muestra los valores de la posición de los picos de las distintas resonancias. Además la Figura 4.2 muestra un resumen de los valores de Q_{ext} frente a λ para los tamaños estudiados:

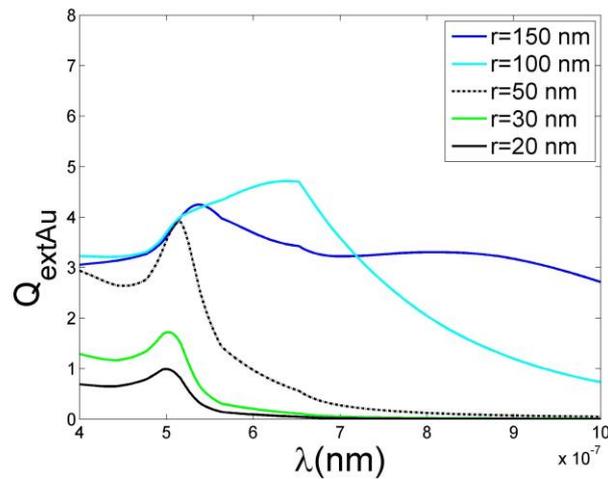


Fig 4.2: Eficiencia de extinción para partículas de oro de distintos radios frente a la longitud de onda

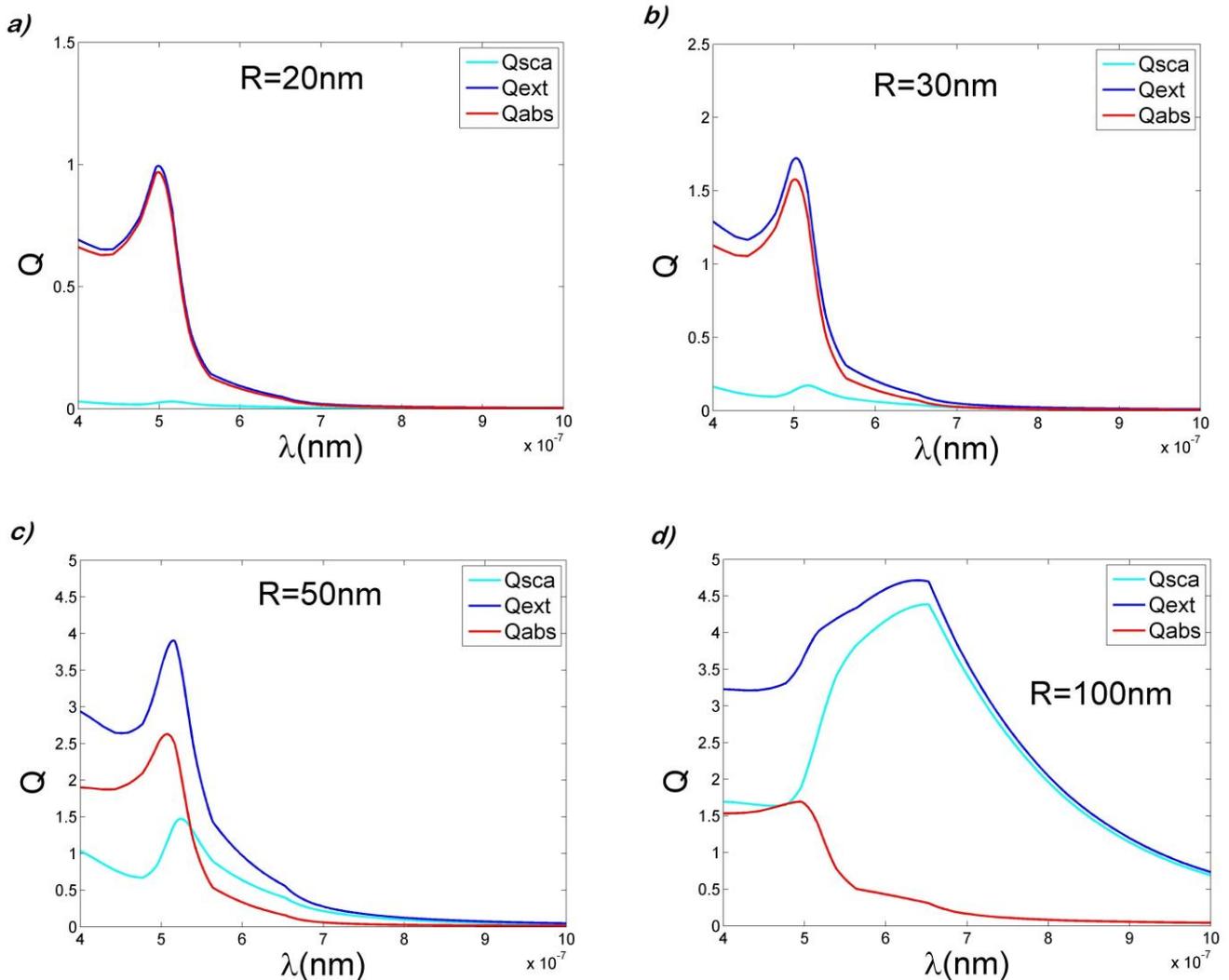
Radio/nm	Res a_1	Res a_2	Res a_3
20	499.2	-	-
30	502.5	-	-
50	515.4	-	-
100	644.3	501.8	-
150	847	534.9	-
200	1086	652.6	527
250	1351	720.9	591.4

Tab4.1: Valores de la longitud de onda en nm donde se sitúan los picos de las resonancias dipolares, cuadrupolares, y sextopolares eléctricas para los distintos valores de los radios en nm de la partícula

Como se puede comprobar de los valores de la Tabla 4.1 y la Figura 4.2 los picos de las resonancias sufren un desplazamiento hacia longitudes de onda mayores. La resonancia dipolar eléctrica ha sufrido un desplazamiento de 499.2 nm a 1351 nm para una variación de tamaño de 20 nm a 150 nm de radio, es decir $\Delta\lambda = 851.8$. En el caso de la resonancia cuadrupolar eléctrica, desde que aparece en la partícula de radio 100 nm a la partícula de 250 nm de radio, se desplaza de 501.8 nm a 767.9 nm, es

decir $\Delta\lambda = 218.7$ nm, mientras que la resonancia dipolar eléctrica para esa misma variación sufre un desplazamiento de $\Delta\lambda = 706.7$ nm. Por último la resonancia sextopolar desde que aparece en la partícula de 200 nm a la de 250 nm de radio, sufre un desplazamiento de $\Delta\lambda = 64.4$ nm, mientras que para esa misma variación de tamaño la resonancia dipolar eléctrica se desplaza $\Delta\lambda = 265$ nm, y la cuadrupolar eléctrica $\Delta\lambda = 68$ nm. Por lo tanto de estos resultados podemos deducir que a medida que crece el orden de la resonancia, el desplazamiento de esta hacia longitudes de onda mayores es menor siendo la de primer orden la que más se desplaza.

Una vez analizada la eficiencia de extinción en las partículas de oro la pregunta que nos podemos hacer es: ¿Qué efecto es el predominante en la extinción: La dispersión o la absorción?. Para responder a esto se muestran en la siguiente figura los resultados de las eficiencias de extinción, absorción, y dispersión en una misma gráfica para partículas de distinto tamaño:



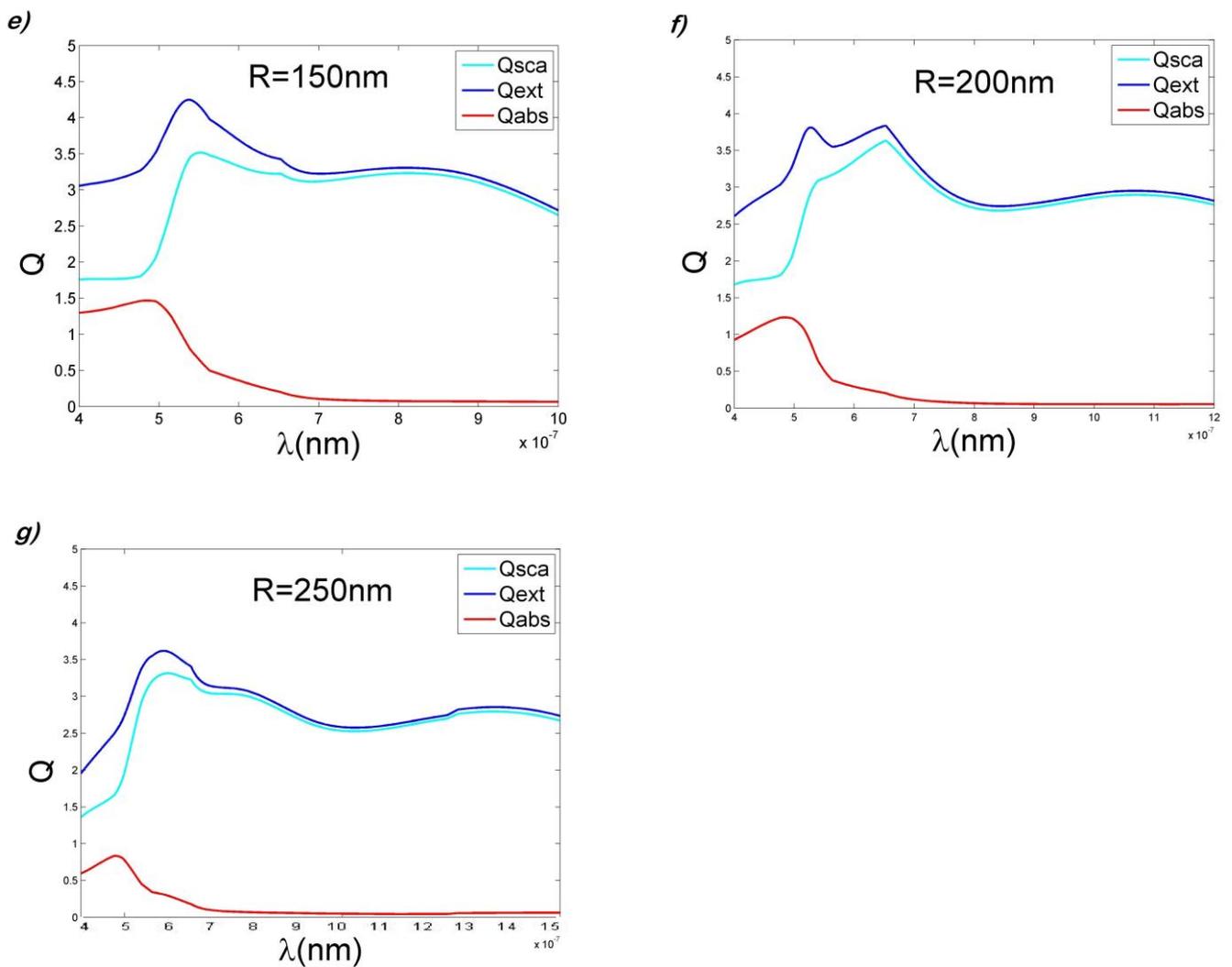


Fig 4.3: Eficiencia de extinción, dispersión y absorción en función de la longitud de onda de la luz incidente, de una partícula de oro de 20 nm de radio (a) , 30 nm de radio (b) ,50 nm de radio (c) , 100 nm de radio (d) , 150 nm de radio (e) , 200nm de radio (f) y 250 nm de radio (g). Se muestra en líneas de distintos colores distintas eficiencias donde Q_{ext} es la línea azul oscuro que representa la eficiencia de extinción, Q_{sca} es la línea azul claro que representa la eficiencia de dispersión y Q_{abs} es la línea roja que representa la eficiencia de absorción.

Las Figura 4.3 muestra los resultados de las eficiencias de extinción, dispersión y absorción frente a la longitud de onda para las partículas de distinto tamaño de 20 nm a 250nm de radio. De estas figuras se puede deducir que en las partículas más pequeñas la mayor parte, casi la total, de la extinción se debe a la absorción, y a medida que aumenta el tamaño de la partícula la dispersión aumenta siendo predominante a partir de tamaños superiores a 100 nm

4.3-Dispersión en la región de campo cercano:

En este apartado se analiza el módulo al cuadrado del campo eléctrico dispersado que está relacionado con la intensidad a través de una constante de proporcionalidad. El análisis se realiza en la región de campo cercano para partículas de oro de distintos tamaños. En primer lugar, en la Figura 4.4, se muestra una representación del sistema sobre el que se ha realizado el estudio, que consiste en un haz de luz que esta

polarizado en el eje X y que se propaga a lo largo del eje Z e incide sobre una partícula de oro.

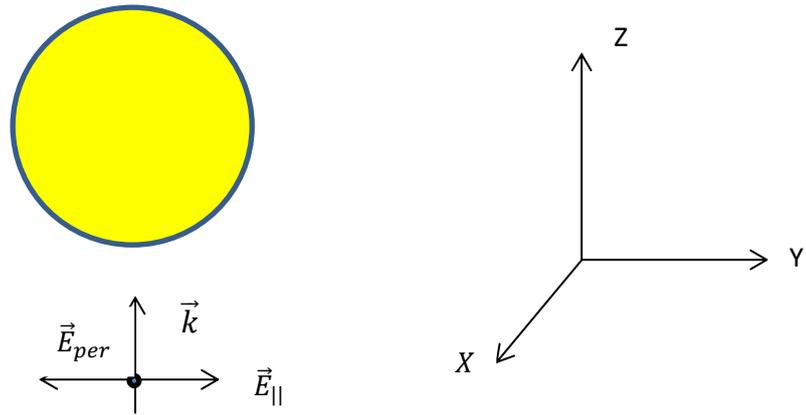
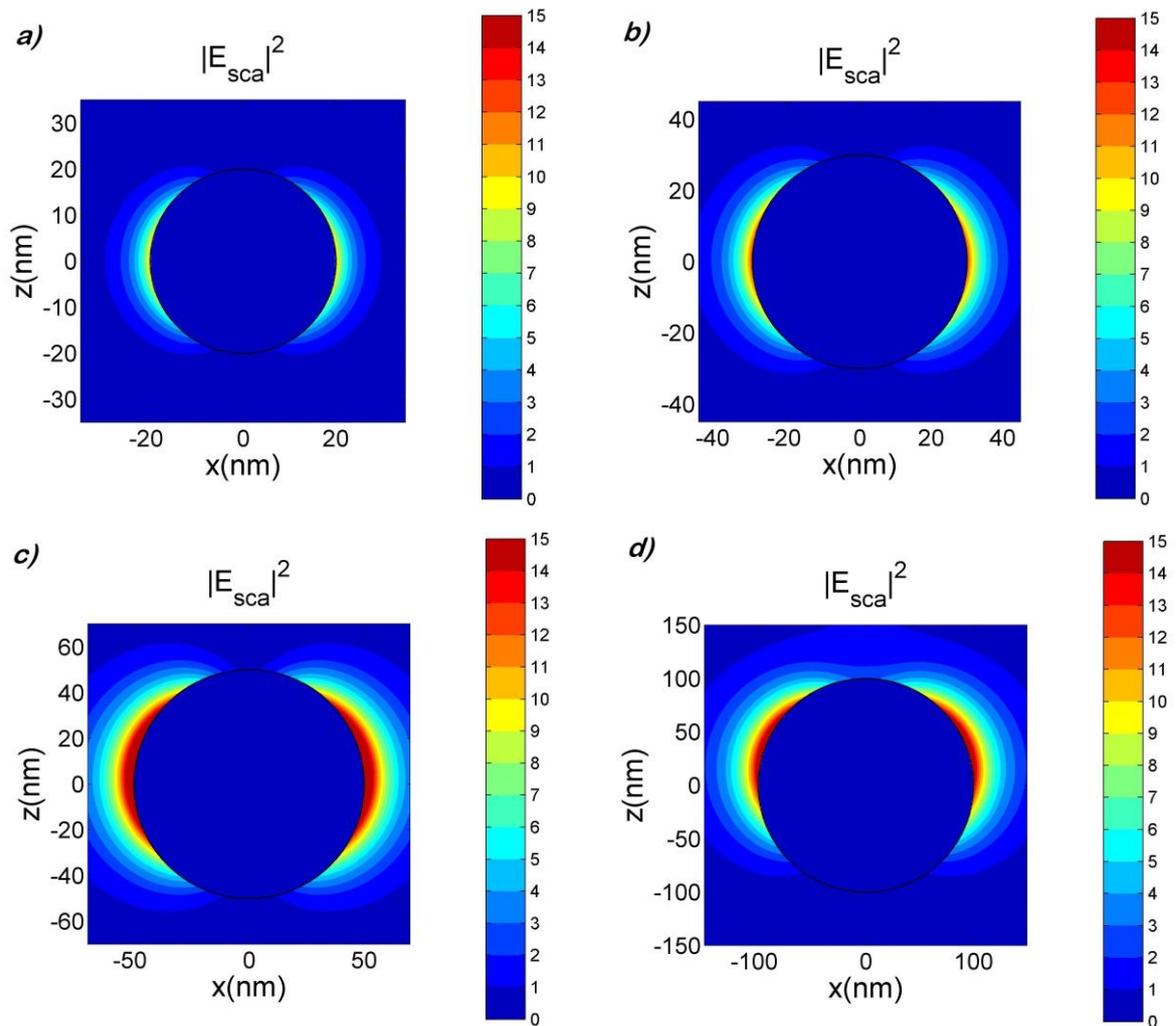
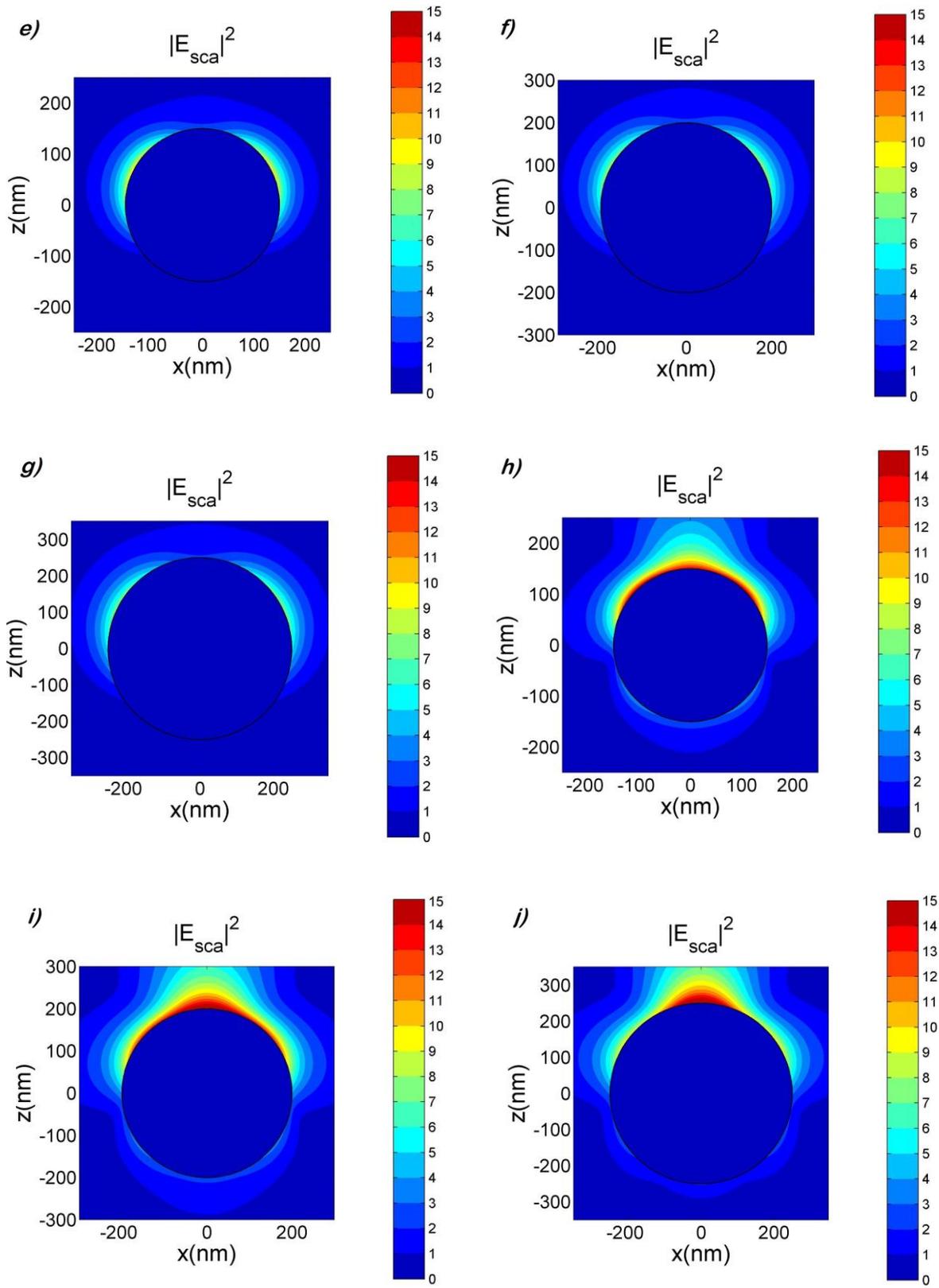


Fig4.4: Representación de un haz de luz polarizado en el eje X propagándose paralelo al eje Z cuando incide sobre una partícula esférica de oro

A continuación se exponen algunos de los resultados de los patrones de difusión de campo cercano obtenidos en el plano ZX:





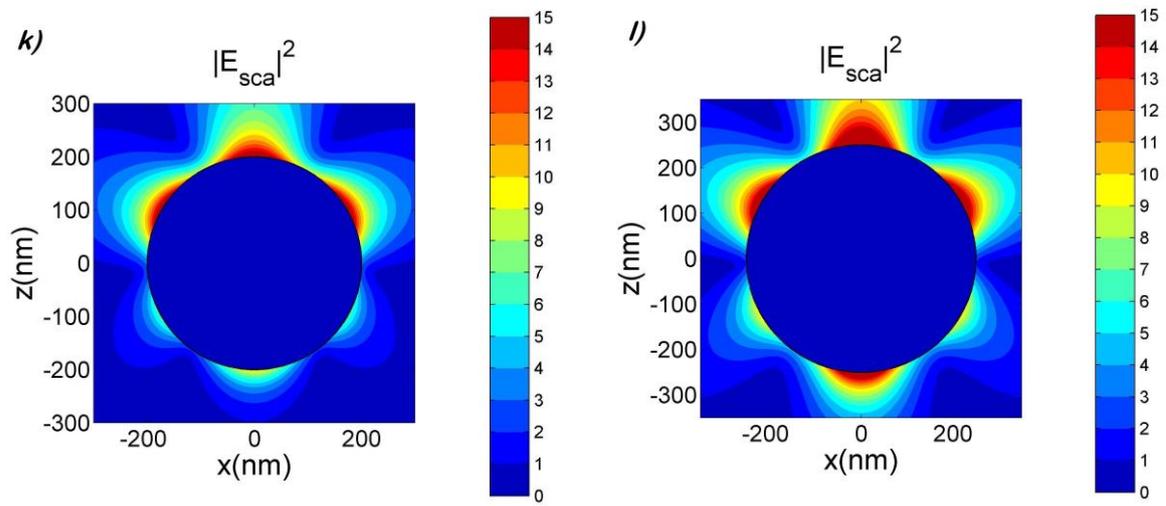


Fig 4.5: Mapas del módulo al cuadrado del campo eléctrico dispersado $|E_{sca}|^2$ en el plano ZX para diferentes tamaños de partículas y diferentes longitudes de onda incidentes correspondientes a las resonancias dipolares, cuadrupolares, y sextopolares eléctricas. En particular en 4.4.a los valores de r_{par} y λ son : $r_{par} = 20 \text{ nm}$ y $\lambda=499.2 \text{ nm}$. En la figura 4.4.b: $r_{par} = 30 \text{ nm}$ y $\lambda=502.5 \text{ nm}$. En la figura 4.4.c: $r_{par} = 50 \text{ nm}$ y $\lambda=515.4 \text{ nm}$. En la figura 4.4.d: $r_{par} = 100 \text{ nm}$ y $\lambda=644.3 \text{ nm}$. En la figura 4.4.e: $r_{par} = 150 \text{ nm}$ y $\lambda=847 \text{ nm}$. En la figura 4.4.f: $r_{par} = 200 \text{ nm}$ y $\lambda=1086 \text{ nm}$. En la figura 4.4.g: $r_{par} = 250 \text{ nm}$ y $\lambda=1351 \text{ nm}$. En la figura 4.4.h: $r_{par} = 150 \text{ nm}$ y $\lambda=501.8 \text{ nm}$. En la figura 4.4.i: $r_{par} = 200 \text{ nm}$ y $\lambda=652.6 \text{ nm}$. En la figura 4.4.j: $r_{par} = 250 \text{ nm}$ y $\lambda=720.5 \text{ nm}$. En la figura 4.4. k: $r_{par} = 200 \text{ nm}$ y $\lambda=527 \text{ nm}$. En la figura 4.4. l: $r_{par} = 250 \text{ nm}$ y $\lambda=591.4 \text{ nm}$.

De las Figuras 4.5.a-4.5.c se puede observar que al incidir un haz de radiación que genera una resonancia dipolar eléctrica, sobre una partícula de entre 20 nm-50 nm de radio, la manera en que dispersa la luz hacia los lados y de forma simétrica es de igual forma que en el caso de un dipolo eléctrico y además la intensidad de la luz dispersada aumenta al aumentar el tamaño de la partícula. Al aumentar el tamaño a 100 nm de radio, Figura 4.5.d, e incidir con luz que provoca de nuevo una resonancia dipolar eléctrica, se observa que la dispersión es lateral de nuevo, aunque en este caso no del todo perpendicular a la dirección de incidencia. Se observa que se ha elevado la dirección de dispersión hacia adelante debido a que ya se está perdiendo el comportamiento dipolar como consecuencia de la influencia de la aparición de la resonancia cuadrupolar eléctrica.

Al aumentar aún más el tamaño, Figuras 4.5.e-4.5.g, se mantiene este comportamiento, pero la intensidad de la luz dispersada es menor, ya que el pico de la eficiencia de extinción ha disminuido.

En los casos que se incide con un haz de luz que genera la resonancia cuadrupolar eléctrica, para partículas de entre 150 nm y 250 nm de radio, Figuras 4.5.h-4.5.j, se observa un patrón de dispersión más complejo correspondiente a un cuadrupolo eléctrico donde la mayoría de la luz es dispersada en mayor parte hacia adelante y los laterales, e incluso una pequeña parte hacia atrás.

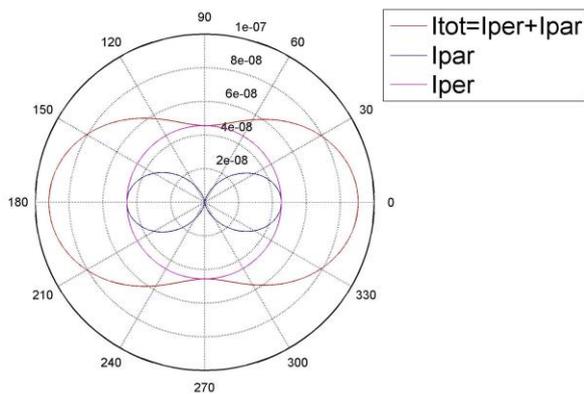
Por último, Para los casos que se incide con un haz de luz que genera la resonancia sextopolar eléctrica, Figuras 4.5.k y 4.5.l, se observa un patrón de dispersión con seis

l6bulos en todas las direcciones, predominando la direcci6n hacia adelante. De nuevo al aumentar el tama1o de la part6cula aumenta la intensidad de la luz dispersada.

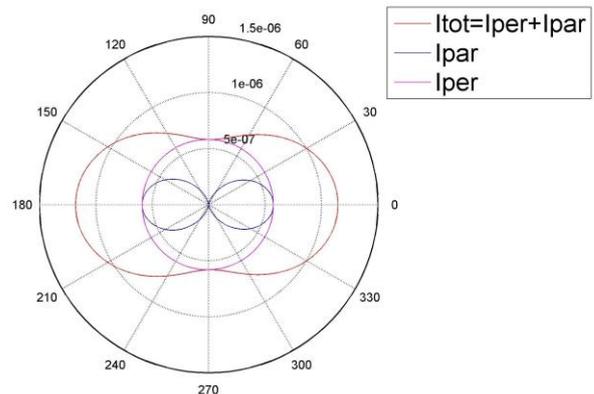
4.4-Dispersi6n en la regi6n de campo lejano:

En este apartado se muestran los resultados obtenidos de los diagramas de campo lejano, donde se representa la intensidad del campo el6ctrico difundida en coordenadas polares en el plano ZX (Intensidad del campo el6ctrico difundido frente al ángulo de dispersi6n), por part6culas de oro de varios tama1os, al incidir con luz natural, que contiene componente paralela y perpendicular al plano de incidencia, como en la Figura 4.4. En todos los casos la longitud de onda de la luz incidente es de 518 nm. Se ha tomado esta longitud de onda para realizar todos los c6lculos ya que muchas de las resonancias se forman cerca de ella, para as6 poder observar el efecto que se produce en el patr6n de difusi6n al cambiar el tama1o y pasar pr6ximo a las diferentes resonancias. Todos los c6lculos se han realizado para una distancia de 10000 nm de la part6cula (Condici6n de campo lejano).

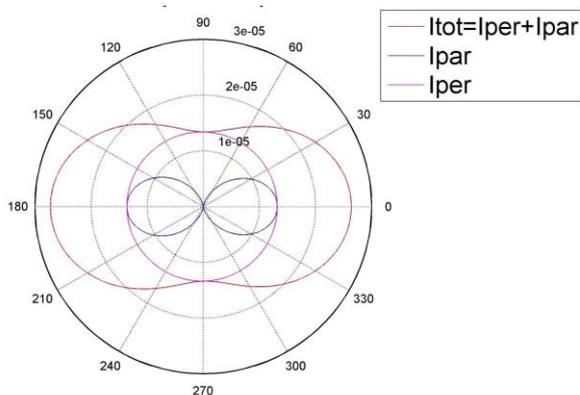
a)



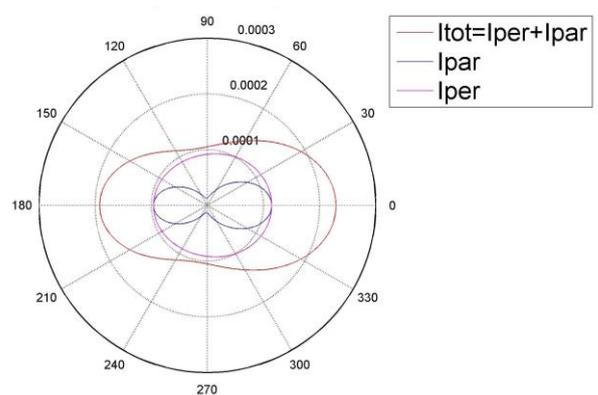
b)



c)



d)



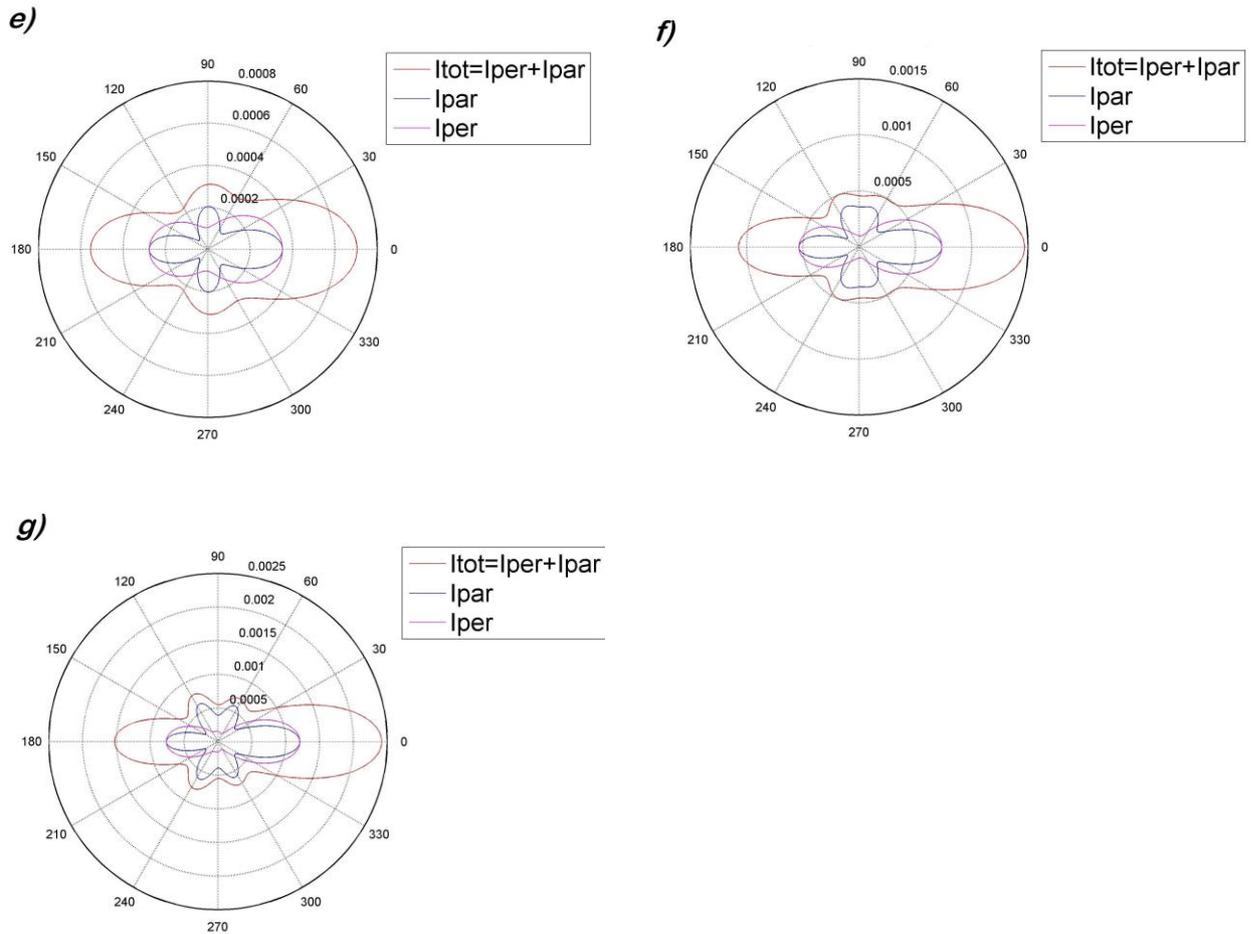


Fig4.6: Representación en coordenadas polares del patrón de intensidad de la luz dispersada con polarización perpendicular al plano de dispersión(línea rosa) , paralela al plano de dispersión(línea azul) , y la intensidad total, la suma de ambas (línea roja). Los distintos tamaños para los que se ha calculado son: En la Figura 4.5.a $r_{par} = 20 \text{ nm}$, en la Figura 4.5.b $r_{par} = 30 \text{ nm}$, en la Figura 4.5.c $r_{par} = 50 \text{ nm}$, en la Figura 4.5.d $r_{par} = 100 \text{ nm}$, en la Figura 4.5.e $r_{par} = 150 \text{ nm}$, en la Figura 4.5.f $r_{par} = 200 \text{ nm}$ y en la Figura 4.5.g $r_{par} = 250 \text{ nm}$ En todos los casos incide un haz de luz de $\lambda=518.4 \text{ nm}$ sobre partículas de oro de índice de refracción $n_1 = 0.5925 + 2.1473i$

En la Figura 4.6 se puede observar, en primer lugar, que la intensidad difundida crece al aumentar el tamaño de la partícula, tal y como habíamos mencionado en los apartados anteriores. Se observa como para las partículas de entre 20nm-50 nm de radio, Figura 4.6.a-4.6.c, hay un patrón de difusión similar al que se produce cuando se ilumina un dipolo eléctrico. Cuando se observa la componente perpendicular al plano de difusión se produce un patrón de intensidad de forma circular, mientras que cuando se observa la componente paralela aparecen dos lóbulos formando un “ocho”, siendo nulo a $\vartheta = 90^\circ$ que es lo que ocurre al iluminar un dipolo, que no radia en la dirección de oscilación.

En el caso de la partícula de 100 nm de radio, Figura 4.6.d, se pierde ese patrón similar al dipolar, ya no es simétrico y la intensidad de la componente paralela ya no es nula a

$\vartheta = 90^\circ$ como consecuencia de la aparición de la resonancia cuadrupolar. Se observa un crecimiento del lóbulo de $\vartheta = 0$ mientras que el de $\vartheta = 180$ disminuye, es decir dispersa más hacia a delante.

Al aumentar más el tamaño, los casos de las partículas de 150 nm-250 nm de radio, Figuras 4.6.e-4.6.g, se observa como ya ha desaparecido por completo el comportamiento dipolar, el patrón de intensidad de la componente perpendicular deja de ser circular y en el patrón de intensidad de la componente paralela aparecen nuevos lóbulos debido a que para esos tamaños aparecen resonancias de orden mayor. Además sigue predominando la dispersión de la intensidad en la dirección $\vartheta = 0$.

5-Conclusiones

Se ha realizado un estudio de la dispersión de la luz en partículas esféricas mediante las ecuaciones del campo eléctrico dispersado obtenidas de la Teoría de Mie. Para ello se han analizado las eficiencias de absorción dispersión y extinción para partículas esféricas de oro. Además se ha realizado el análisis de los patrones de difusión en el campo cercano y lejano. Todos los resultados se han obtenido mediante unos programas de Matlab.

Tras analizar los resultados de las eficiencias de partículas de oro de distinto tamaño, se obtienen las siguientes conclusiones:

- Para partículas de oro esféricas de entre 20nm-50nm de radio aparece un único pico en la eficiencia de extinción, que corresponde a la resonancia dipolar eléctrica.
- Al aumentar el tamaño de la partícula, a los 100 nm de radio, aparece una contribución de una resonancia cuadrupolar eléctrica, y al aumentar el tamaño a 150 nm de radio este pico se hace más intenso.
- A partir de 150 nm de radio aparece una resonancia sextopolar eléctrica que se hace cada vez más intensa.
- Existe un desplazamiento de los picos de las resonancias hacia longitudes de ondas mayores al aumentar el tamaño de la partícula. En el caso de la resonancia de dipolar eléctrica sufre un desplazamiento cuando la partícula varía el tamaño de 20 nm de radio a 250 nm de $\Delta\lambda_{a1} = 851.8 \text{ nm}$. En cambio la resonancia cuadrupolar sufre un desplazamiento cuando la partícula varia el tamaño de 100 nm de radio a 250 nm de $\Delta\lambda_{a2} = 218.7 \text{ nm}$, mientras que el pico correspondiente a a_1 para esa misma variación sufre un desplazamiento de $\Delta\lambda = 706.7 \text{ nm}$. Es decir, la resonancia dipolar se desplaza más que la cuadrupolar. Por último la resonancia sextopolar desde que aparece en la partícula de 200 nm a la de 250 nm de radio, sufre un desplazamiento de $\Delta\lambda_{a3} = 64.4 \text{ nm}$, mientras que para esa misma variación de tamaño la resonancia dipolar eléctrica se desplaza $\Delta\lambda = 265 \text{ nm}$, y la cuadrupolar eléctrica $\Delta\lambda = 68 \text{ nm}$. El pico de la resonancia dipolar eléctrica sufre un gran desplazamiento, mientras que el de la cuadrupolar y sextopolar eléctrica casi no se desplazan.
- Para partículas pequeñas de entre 20nm y 50 nm de radio la mayor parte de la extinción es debida a la absorción y al aumentar el tamaño de la

partícula, la dispersión va predominando cada vez más frente a la absorción.

- En ningún caso hay resonancias magnéticas, frente a lo que ocurre en nanopartículas dieléctricas con alto índice de refracción.

Tras el análisis de los patrones de difusión del campo cercano se obtienen las siguientes conclusiones:

- Se producen grandes concentraciones de energía cerca de la superficie de la partícula. En el caso de la resonancia dipolar eléctrica esa concentración es más intensa a medida que aumenta el tamaño de la partícula siendo su máximo en la partícula de 100 nm y a partir de 150nm ya decrece la intensidad.
- Las partículas más pequeñas de 20 nm a 50 nm dispersan la luz como dipolos eléctricos y a medida que aumenta el tamaño de la partícula se pierde ese patrón y se forman figuras más complejas

Tras el análisis de los patrones de difusión del campo lejano se obtienen las siguientes conclusiones:

- La intensidad difundida crece al aumentar el tamaño de la partícula.
- Para las partículas pequeñas de 20nm a 50 nm de radio el diagrama de difusión es similar al de un dipolo eléctrico, al incidir con luz polarizada paralela al plano de difusión se produce un patrón circular para la luz dispersada, mientras que para luz polarizada perpendicular aparecen dos lóbulos formando un “ocho”, siendo nulo a $\vartheta = 90^\circ$, no radia en la dirección de oscilación. Por lo que a estas partículas se les puede considerar como un dipolo radiante.
- Para partículas pequeñas de entre 20nm a 50 nm de radio, dispersan de igual forma en la dirección $\vartheta = 0$ y $\vartheta = 180$, las intensidades paralela y perpendicular coinciden en esas direcciones. A medida que aumenta el tamaño de la partícula se observa un crecimiento del lóbulo de $\vartheta = 0$ mientras que el de $\vartheta = 180$ decrece, es decir que predomina la dispersión hacia delante.
- A partir de la partícula de 100 nm de radio se pierde ese patrón similar al dipolar, comienzan a aparecer lóbulos debido a que aparecen resonancias de órdenes mayores en este caso la cuadrupolar y la sextopolar eléctrica.

6-Bibliografía

- [1]-Elder de la Rosa Cruz, *Nanofotónica: luz + nanopartículas*, Revista electrónica ide@s CONCYTEG, Año 2, Num.24, 20 agosto de 2007
- [2]- Laura M.Lechuga, *Nanomedicina: aplicacion de la nanotecnologia en la salud*
- [3]-Elena Sanza, *Tres nuevos anticonceptivos que deberías conocer*, consultado el 5/09/2015-12:16 disponible en : <http://www.muyinteresante.es/salud/articulo/tres-nuevos-metodos-anticonceptivos-que-deberias-conocer-541380277112>
- [4]- Jesica Maria José Santillán, *Estudio de las propiedades ópticas de materiales nanoestructurados y aplicaciones*, Tesis Doctoral, Universidad Nacional de la Plata , 2013
- [5]- Daniel Mazón Solorzano, *Determinación de tamaños de nanopartículas metálicas mediante técnicas espectroscópicas y polarimétricas* , Proyecto fin de Carrera, Universidad de Cantabria,2012
- [6]- C. F. Bohren, D.R. Huffman, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, Jhon Wiley & Sons, 1963
- [7]-H. C. van de Hulst, *Light Scattering by small particles*, Jhon Wiley & Sons, 1957
- [8]- Beatriz Setién Araujo, *Estudio espectral de la difusión de luz por dímeros de partículas metálicas* , Universidad de Cantabria, 2009
- [9]- Braulio Garcia-Camara, *On light scattering by nanoparticles with conventional and non-conventional optical properties* , Tesis Doctoral, Universidad de Cantabria, 2010
- [10]-Ángela Barreda Gomez, *Electromagnetic behavior of nanoparticle dimers*, Proyecto fin de Carrera, Universidad de Cantabria, 2013
- [11]- P. B. Johnson, R. Christy, *Optical Constants of the Noble Metals*, Phys.Rev., 1972
- [12]-Beatriz Setién Araujo, *Caracterización de tamaños de nanopartículas metálicas mediante el análisis de la polarización de la luz difundida*, Proyecto fin de Carrera, Universidad de Cantabria,2008
- [13]- Daniel. A. Cruz, Miriam C. Rodriguez, *Nanopartículas metálicas y plasmones de superficie: Una relación profunda*, La laguna-Tenerife-España, 2012.

- [14]- Paula Izquierdo Gómez, *Estudio electromagnético de nanopartículas multicapa* , Proyecto fin de Carrera, Universidad de Cantabria, 2011
- [15]- Mark I. Stockman, *Nanoplasmonics: The physics behind the applications* ,2011
- [16]- Mark I. Stockman, *Nanoplasmonics: past, present and glimpse into future*,2011
- [17]-Yael Gutiérrez Vela, *On the radiative and non-radiative contribution to the electromagnetic light scattering by magnetodielectric particles*, Proyecto fin de Carrera, Universidad de Cantabria, 2014
- [18]-Olivier Merchiers, *Un estudio de los efectos de difusión múltiple sobre la radiación difundida por agregados de partículas*, Tesis Doctoral, Universidad de Cantabria, 2007

Anexo 1

Código 1: Mie_ab.m

```
function coeficientesn = Mie_ab(N,N1,nmax,rpar,landa)
%Se introducen los parámetros necesarios para el cálculo
nmax=input('Introduzca el valor del orden del ultimo coeficiente: ');
N1=input('Introduzca el valor del índice de la partícula: ');
N=input('Introduzca el valor del índice del medio: ');
rpar=input('Introduzca el valor del radio de la partícula en nm: ');
landa=input('Introduzca el valor de la longitud de onda de la luz incidente en
nm: ');
%Se calculan todas las constantes y valores necesarios
mu=1;
mul=1;
x=(2*pi*rpar)/landa;
m=N1/N;
raizx=sqrt((pi)/(2*x));
raizmx=sqrt((pi)/(2*m*x));
%Se crean las matrices de ceros donde se almacenan los resultados
coeficientean=zeros(1,nmax);
coeficientebn=zeros(1,nmax);
%Se realizan los cálculos de las funciones de Bessel, Ricatti-Bessel y sus
%derivadas y finalmente los coeficientes de Mie a_n y b_n. Todo esto en un
%bucle para realizarse tantas veces como coeficientes se deseen.
for l=1:1:nmax
    nu=l+0.5;
    Jnux = besselj(nu,x);
    Jnumx = besselj(nu,m*x);
    Jnux1 = besselj(nu-1,x);
    Jnumx1 = besselj(nu-1,m*x);
    Sjnx=raizx*Jnux;
    Sjnmx=raizmx*Jnumx;
    Sjnx1=raizx*Jnux1;
    Sjnmx1=raizmx*Jnumx1;
    finmx=m*x*Sjnmx;
    finx=x*Sjnx;
    finmx1=m*x*Sjnmx1;
    finx1=x*Sjnx1;
    devfinmx=finmx1-(l*Sjnmx);
    devfinx=finx1-(l*Sjnx);
    Ynux = bessely(nu,x);
    Ynumx = bessely(nu,m*x);
    Ynux1 = bessely(nu-1,x);
    Ynumx1 = bessely(nu-1,m*x);
    Synx=raizx*Ynux;
    Synmx=raizmx*Ynumx;
    Synx1=raizx*Ynux1;
    Synmx1=raizmx*Ynumx1;
    Hnx =Sjnx+li*Synx ;
    Hnmx = Sjnmx+li*Synmx;
    Hnx1 = Sjnx1+li*Synx1;
    Hnmx1 = Sjnmx1+li*Synmx1;
    ginx=x*Hnx;
    ginmx=m*x*Hnmx;
    ginx1=x*Hnx1;
    ginmx1=m*x*Hnmx1;
    devginx=ginx1-(l*Hnx);
    devginmx=ginmx1-(l*Hnmx);
    a_n=((mu*m*finmx*devfinx)-(mul*finx*devfinmx))/((mu*m*finmx*devginx)-
    (mul*ginx*devfinmx));
    b_n=((mul*finmx*devfinx)-(mu*m*finx*devfinmx))/((mul*finmx*devginx)-
    (mu*m*ginx*devfinmx));
%Una vez calculados se guardan los coeficientes en las matrices creadas
```

```

%previamente
for e=1:1:nmax
coeficientean(1,e)=a_n;
coeficientebn(1,e)=b_n;
end
end
coeficientesn=[coeficientean ; coeficientebn ];
%%el resultado de este programa es una matriz de nmax X 2 donde cada
%%columna son los coeficientes an y bn desde n=1 hasta n=nmax
save Coeficientes coeficientean coeficientebn coeficientesn
end

```

Código 2: efiextAu.m

```

function result= efiextAu(N,nmax,rpar,landa)
%Se cargan los datos de la constante dieléctrica para cada longitud de onda
%del haz incidente
load('epsimgAu2.mat')
load('epsrealAu2.mat')
[numfil,numcol]=size(DatosAuepsreal5);
%Se crean unas matrices donde se guardaran las eficiencias de extinción de
%cada coeficiente de Mie y la total
eficiencialandaal=zeros(numfil,2);
eficiencialandabl=zeros(numfil,2);
eficiencialandaabl=zeros(numfil,2);
eficiencialandaa2=zeros(numfil,2);
eficiencialandab2=zeros(numfil,2);
eficiencialandaa3=zeros(numfil,2);
eficiencialandb3=zeros(numfil,2);
eficiencialanda123=zeros(numfil,2);
%Se introducen todos los parámetros necesarios
mu=1;
mul=1;
N=input('Introduzca el valor del índice del medio: ');
nmax=input('Introduzca el valor del orden del ultimo coeficiente:');
rpar=input('Introduzca el valor del radio de la partícula en nm: ');
ii=sqrt(-1);
%Se abre un bucle para realizar el cálculo para cada longitud de onda.
for t=1:1:numfil
landa=DatosAuepsreal5(t,1);
epsilon=DatosAuepsreal5(t,2);
epsilonimg=DatosAuepsimg5(t,2);
N1=sqrt(epsilon+ii*epsilonimg);
m=N1/N;
x=(2*pi*rpar)/landa;
x2=x*x;
f=Mie_abcd(N,N1,nmax,rpar,landa);
Efiextal=0;
%Se abre un bucle para realizar el cálculo de las distintas eficiencias de
%extinción.
for g=1:1:1
anr=real(f(1,g));
bnr=0;
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E=ctec*cn*(anr+bnr);
Efiextal=Efiextal+E;
end
eficiencialandaal(t,1)=Efiextal;
eficiencialandaal(t,2)=landa;
Efiextbl=0;
for g=1:1:1
anr=0;
bnr=real(f(2,g));
cn=(2*g+1);

```

```

ctec=(2)/x2;
E=ctec*cn*(anr+bnr);
Efiextb1=Efiextb1+E;
end
eficiencialandab1(t,1)=Efiextb1;
eficiencialandab1(t,2)=landa;
Efiextab1=0;
for g=1:1:1
anr=real(f(1,g));
bnr=real(f(2,g));
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E=ctec*cn*(anr+bnr);
Efiextab1=Efiextab1+E;
end
eficiencialandaab1(t,1)=Efiextab1;
eficiencialandaab1(t,2)=landa;
Efiexta2=0;
for g=2:1:2
anr=real(f(1,g));
bnr=0;
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E=ctec*cn*(anr+bnr);
Efiexta2=Efiexta2+E;
end
eficiencialandaa2(t,1)=Efiexta2;
eficiencialandaa2(t,2)=landa;
Efiextb2=0;
for g=2:1:2
anr=0;
bnr=real(f(2,g));
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E=ctec*cn*(anr+bnr);
Efiextb2=Efiextb2+E;
end
eficiencialandab2(t,1)=Efiextb2;
eficiencialandab2(t,2)=landa;
Efiexta3=0;
for g=3:1:3
anr=real(f(1,g));
bnr=0;
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E=ctec*cn*(anr+bnr);
Efiexta3=Efiexta3+E;
end
eficiencialandaa3(t,1)=Efiexta3;
eficiencialandaa3(t,2)=landa;
Efiextb3=0;
for g=3:1:3
anr=0;
bnr=real(f(2,g));
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E=ctec*cn*(anr+bnr);
Efiextb3=Efiextb3+E;
end
eficiencialandab3(t,1)=Efiextb3;
eficiencialandab3(t,2)=landa;
Efiext3=0;
for g=1:1:3
anr=real(f(1,g));
bnr=real(f(2,g));
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E=ctec*cn*(anr+bnr);

```

```

Efiext3=Efiext3+E;
end
eficiencialanda123(t,1)=Efiext3;
eficiencialanda123(t,2)=landa;
end
%Una vez calculado todo se guarda en una matriz todo junto y además se
%guarda en un archivo aparte la eficiencia total de la partícula de radio
%que hemos designado para así luego cargarla en otro programa. Llamamos XX al
%valor del radio
eficiencialandextAu= [
eficiencialandaa1,eficiencialandab1,eficiencialandaa1b1,eficiencialandaa2,efic
iencialandab2,eficiencialandaa3,eficiencialandab3,eficiencialanda123];
eficienciatotalextextAuXX=eficiencialanda123;
save eficienciaextAuXXnm eficienciatotalextextAuXX
result=eficiencialandextAu;
%Finalmente representamos todas las eficiencias de extinción frente a la
%longitud de onda
Figura= figure;
plot(eficiencialandaa1(:,2),eficiencialandaa1(:,1),'m','Linewidth',2)
hold on
plot(eficiencialandab1(:,2),eficiencialandab1(:,1),'y','Linewidth',2)
plot(eficiencialandaa1b1(:,2),eficiencialandaa1b1(:,1),'k','Linewidth',2)
plot(eficiencialandaa2(:,2),eficiencialandaa2(:,1),'c','Linewidth',2)
plot(eficiencialandab2(:,2),eficiencialandab2(:,1),'k*','Linewidth',2,'MarkerS
ize',5)
plot(eficiencialandaa3(:,2),eficiencialandaa3(:,1),'g','Linewidth',2)
plot(eficiencialandab3(:,2),eficiencialandab3(:,1),'-
.r','Linewidth',2,'MarkerSize',1)
plot(eficiencialanda123(:,2),eficiencialanda123(:,1),'b','Linewidth',2)
L=legend('Q_{ext} a_1', 'Q_{ext} b_1', 'Q_{ext} a_{1}b_{1}', 'Q_{ext}
a_2', 'Q_{ext} b_2', 'Q_{ext} a_3', 'Q_{ext}
b_3', 'Q_{ext123}','Location','NorthEastOutside')
xlim([400E-9 1000E-9])
ylim([0 5])
xlabel('\lambda (nm)', 'FontSize' , 30)
ylabel('Q_{extAu}', 'FontSize' , 30)
title('R=XXnm', 'FontSize' , 30)
set(gca, 'FontSize' , 9) % el tamaño de los números
set(L, 'FontSize' , 20)
legend boxoff
print(Figura, '-djpeg', '-r300', ['Q_ext2AuXX vs lambda.jpg']);
hold off
end

```

Código 3: efiscaAu.m

```

function result= efiscaAu(N,nmax,rpar,landa)
%Se cargan los datos de la constante dieléctrica para cada longitud de onda
%del haz incidente
load('epsimgAu2.mat')
load('epsrealAu2.mat')
[numfil,numcol]=size(DatosAuepsreal5);
%Se crean unas matrices donde se guardaran las eficiencias de dispersión de
%cada coeficiente de Mie y la total
eficiencialandaa1=zeros(numfil,2);
eficiencialandab1=zeros(numfil,2);
eficiencialandaa1b1=zeros(numfil,2);
eficiencialandaa2=zeros(numfil,2);
eficiencialandab2=zeros(numfil,2);
eficiencialandaa3=zeros(numfil,2);
eficiencialandab3=zeros(numfil,2);
eficiencialanda123=zeros(numfil,2);
%Se introducen todos los parámetros necesarios
N=input('Introduzca el valor del índice del medio: ');
nmax=input('Introduzca el valor del orden del ultimo coeficiente:');
rpar=input('Introduzca el valor del radio de la partícula en nm: ');
mu=1;
mul=1;

```

```

ii=sqrt(-1);
%Se abre un bucle para realizar el cálculo para cada longitud de onda.
for t=1:1:numfil
landa=DatosAuepsreal5(t,1);
epsilonal=DatosAuepsreal5(t,2);
epsilonimg=DatosAuepsimg5(t,2);
N1=sqrt(epsilonal+(ii*epsilonimg));
m=N1/N;
x=(2*pi*rpar)/landa;
x2=x*x;
f=Mie_abcdconxymrepresent(mu,mul,m,nmax,x,rpar,landa);
Efiscaal=0;
%Se abre un bucle para realizar el cálculo de las distintas eficiencias de
%dispersión.
for g=1:1:1
anr=(norm(f(1,g))).^2;
bnr=0;
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E=ctec*cn*(anr+bnr);
Efiscaal=Efiscaal+E;
end
eficiencialandaal(t,1)=Efiscaal;
eficiencialandaal(t,2)=landa;
Efiscaal=0;
for g=1:1:1
anr=0;
bnr=(norm(f(2,g))).^2;
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E=ctec*cn*(anr+bnr);
Efiscaal=Efiscaal+E;
end
eficiencialandab1(t,1)=Efiscaal;
eficiencialandab1(t,2)=landa;
Efiscaal=0;
for g=1:1:1
anr=(norm(f(1,g))).^2;
bnr=(norm(f(2,g))).^2;
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E=ctec*cn*(anr+bnr);
Efiscaal=Efiscaal+E;
end
eficiencialandaal1(t,1)=Efiscaal;
eficiencialandaal1(t,2)=landa;
Efiscaal=0;
for g=2:1:2
anr=(norm(f(1,g))).^2;
bnr=0;
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E=ctec*cn*(anr+bnr);
Efiscaal=Efiscaal+E;
end
eficiencialandaal2(t,1)=Efiscaal;
eficiencialandaal2(t,2)=landa;
Efiscaal=0;
for g=2:1:2
anr=0;
bnr=(norm(f(2,g))).^2;
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E=ctec*cn*(anr+bnr);
Efiscaal=Efiscaal+E;
end
eficiencialandab2(t,1)=Efiscaal;
eficiencialandab2(t,2)=landa;

```

```

Efiscaa3=0;
for g=3:1:3
anr=(norm(f(1,g))).^2;
bnr=0;
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E=ctec*cn*(anr+bnr);
Efiscaa3=Efiscaa3+E;
end
eficiencialandaa3(t,1)=Efiscaa3;
eficiencialandaa3(t,2)=landa;
Efisca3=0;
for g=3:1:3
anr=0;
bnr=(norm(f(2,g))).^2;
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E=ctec*cn*(anr+bnr);
Efisca3=Efisca3+E;
end
eficiencialandab3(t,1)=Efisca3;
eficiencialandab3(t,2)=landa;
Efisca3=0;
for g=1:1:3
anr=(norm(f(1,g))).^2;
bnr=(norm(f(2,g))).^2;
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E=ctec*cn*(anr+bnr);
Efisca3=Efisca3+E;
end
eficiencialanda123(t,1)=Efisca3;
eficiencialanda123(t,2)=landa;
end
%Una vez calculado todo se guarda en una matriz todo junto y además se
%guarda en un archivo aparte la eficiencia total de la partícula de radio
%que hemos designado para así luego cargarla en otro programa. Llamamos XX al
%valor del radio
eficiencialandscaAu= [
eficiencialandaa1,eficiencialandab1,eficiencialandaa1b1,eficiencialandaa2,efic
iencialandab2,eficiencialandaa3,eficiencialandab3,eficiencialanda123];
eficienciatotalscaAuXX=eficiencialanda123;
save eficienciascaAuXX eficienciatotalscaAuXX
result=eficiencialandscaAu;
%Finalmente representamos todas las eficiencias de dispersión frente a la
%longitud de onda
Figura= figure;
plot(eficiencialandaa1(:,2),eficiencialandaa1(:,1),'m','Linewidth',2)
hold on
plot(eficiencialandab1(:,2),eficiencialandab1(:,1),'y','Linewidth',2)
plot(eficiencialandaa1b1(:,2),eficiencialandaa1b1(:,1),'k','Linewidth',2) %'Mar
kerSize',3)
plot(eficiencialandaa2(:,2),eficiencialandaa2(:,1),'c','Linewidth',2)
plot(eficiencialandab2(:,2),eficiencialandab2(:,1),'k*','Linewidth',2,'MarkerS
ize',5)
plot(eficiencialandaa3(:,2),eficiencialandaa3(:,1),'g','Linewidth',2)
plot(eficiencialandab3(:,2),eficiencialandab3(:,1),'-
.r','Linewidth',2,'MarkerSize',1)
plot(eficiencialanda123(:,2),eficiencialanda123(:,1),'b','Linewidth',2)
L=legend('Q_{sca} a_1', 'Q_{sca} b_1', 'Q_{sca} a_{1}b_{1}', 'Q_{sca}
a_2', 'Q_{sca} b_2', 'Q_{sca} a_3', 'Q_{sca}
b_3', 'Q_{sca123}', 'Location', 'NorthEastOutside')
xlim([400E-9 1000E-9])
ylim([0 8])
xlabel('\lambda(nm)', 'FontSize', 30)
ylabel('Q_{scaAu}', 'FontSize', 30)
title('Q_{scaAu}(XX) vs \lambda', 'FontSize', 30)
set(gca, 'FontSize', 25) % el tamaño de los números

```

```

set(L,'FontSize' , 20)
legend boxoff
print(Figura,'-djpeg','-r300', ['Q_scaAuXX vs lambda.jpg']);
hold off
end

```

Código 4: efiabsAu.m

```

function result= efiabsAu(mu,mul,N1,N,nmax,rpar,landa)
%Se cargan los datos de la constante dieléctrica para cada longitud de onda
%del haz incidente
load('epsimgAu2.mat')
load('epsrealAu2.mat')
[numfil,numcol]=size(DatosAuepsreal5);
%Se crean unas matrices donde se guardaran las eficiencias de absorción de
%cada coeficiente de Mie y la total
eficiencialandaa1=zeros(numfil,2);
eficiencialandab1=zeros(numfil,2);
eficiencialandaa1b1=zeros(numfil,2);
eficiencialandaa2=zeros(numfil,2);
eficiencialandab2=zeros(numfil,2);
eficiencialandaa3=zeros(numfil,2);
eficiencialandb3=zeros(numfil,2);
eficiencialanda123=zeros(numfil,2);
%Se introducen todos los parámetros necesarios
N=input('Introduzca el valor del índice del medio: ');
nmax=input('Introduzca el valor del orden del ultimo coeficiente:');
rpar=input('Introduzca el valor del radio de la partícula en nm: ');
mu=1;
mul=1;
ii=sqrt(-1);
%Se abre un bucle para realizar el cálculo para cada longitud de onda.
for t=1:1:numfil
landa=DatosAuepsreal5(t,1);
epsilonreal=DatosAuepsreal5(t,2);
epsilonimg=DatosAuepsimg5(t,2);
N1=sqrt(epsilonreal+(ii*epsilonimg));
m=N1/N;
x=(2*pi*rpar)/landa;
x2=x*x;
f=Mie_abcdconxymrepresent(mu,mul,m,nmax,x,rpar,landa);
Efiabsa1=0;
%Se abre un bucle para realizar el cálculo de las distintas eficiencias de
%absorción.
for g=1:1:1
anr=real(f(1,g));
an2=(norm(f(1,g))).^2;
bnr=0;
bn2=0;
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E1=ctec*cn*(anr+bnr);
E2=ctec*cn*(an2+bn2);
E=E1-E2;
Efiabsa1=Efiabsa1+E;
end
eficiencialandaa1(t,1)=Efiabsa1;
eficiencialandaa1(t,2)=landa;
Efiabsb1=0;
for g=1:1:1
anr=0;
an2=0;
bnr=real(f(2,g));
bn2=(norm(f(2,g))).^2;
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E1=ctec*cn*(anr+bnr);
E2=ctec*cn*(an2+bn2);

```

```

E=E1-E2;
Efiabsb1=Efiabsb1+E;
end
eficiencialandab1(t,1)=Efiabsb1;
eficiencialandab1(t,2)=landa;
Efiabsalbl=0;
for g=1:1:1
anr=real(f(1,g));
an2=(norm(f(1,g))).^2;
bnr=real(f(2,g));
bn2=(norm(f(2,g))).^2;
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E1=ctec*cn*(anr+bnr);
E2=ctec*cn*(an2+bn2);
E=E1-E2;
Efiabsalbl=Efiabsalbl+E;
end
eficiencialandaalbl(t,1)=Efiabsalbl;
eficiencialandaalbl(t,2)=landa;
Efiabsa2=0;
for g=2:1:2
anr=real(f(1,g));
an2=(norm(f(1,g))).^2;
bn2=0;
bnr=0;
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E1=ctec*cn*(anr+bnr);
E2=ctec*cn*(an2+bn2);
E=E1-E2;
Efiabsa2=Efiabsa2+E;
end
eficiencialandaa2(t,1)=Efiabsa2;
eficiencialandaa2(t,2)=landa;
Efiabsb2=0;
for g=2:1:2
anr=0;
an2=0;
bnr=real(f(2,g));
bn2=(norm(f(2,g))).^2;
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E1=ctec*cn*(anr+bnr);
E2=ctec*cn*(an2+bn2);
E=E1-E2;
Efiabsb2=Efiabsb2+E;
end
eficiencialandab2(t,1)=Efiabsb2;
eficiencialandab2(t,2)=landa;
Efiabsa3=0;
for g=3:1:3
anr=real(f(1,g));
an2=(norm(f(1,g))).^2;
bnr=0;
bn2=0;
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E1=ctec*cn*(anr+bnr);
E2=ctec*cn*(an2+bn2);
E=E1-E2;
Efiabsa3=Efiabsa3+E;
end
eficiencialandaa3(t,1)=Efiabsa3;
eficiencialandaa3(t,2)=landa;
Efiabsb3=0;
for g=3:1:3
anr=0;

```

```

an2=0;
bnr=real(f(2,g));
bn2=(norm(f(2,g))).^2;
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E1=ctec*cn*(anr+bnr);
E2=ctec*cn*(an2+bn2);
E=E1-E2;
Efiabsb3=Efiabsb3+E;
end
eficiencialandab3(t,1)=Efiabsb3;
eficiencialandab3(t,2)=landa;
Efiabs3=0;
for g=1:1:3
anr=real(f(1,g));
an2=(norm(f(1,g))).^2;
bnr=real(f(2,g));
bn2=(norm(f(2,g))).^2;
cn=(2*g+1);
ctec=(2)/x2;
E1=ctec*cn*(anr+bnr);
E2=ctec*cn*(an2+bn2);
E=E1-E2;
Efiabs3=Efiabs3+E;
end
eficiencialanda123(t,1)=Efiabs3;
eficiencialanda123(t,2)=landa;
end
%Una vez calculado todo se guarda en una matriz todo junto y además se
%guarda en un archivo aparte la eficiencia total de la partícula de radio
%que hemos designado para así luego cargarla en otro programa. Llamamos XX al
%valor del radio
eficiencialandabsAu= [
eficiencialandaa1,eficiencialandab1,eficiencialandaa1b1,eficiencialandaa2,efic
iencialandab2,eficiencialandaa3,eficiencialandb3,eficiencialanda123];
eficienciatotalabsAuXX=eficiencialanda123;
save eficienciaabsAuXXnm eficienciatotalabsAuXX
result=eficiencialandabsAu;
%Finalmente representamos todas las eficiencias de absorción frente a la
%longitud de onda
Figura= figure;
plot(eficiencialandaa1(:,2),eficiencialandaa1(:,1),'m','Linewidth',2)
hold on
plot(eficiencialandab1(:,2),eficiencialandab1(:,1),'y','Linewidth',2)
plot(eficiencialandaa1b1(:,2),eficiencialandaa1b1(:,1),'k','Linewidth',2)%!Mar
kerSize',3)
plot(eficiencialandaa2(:,2),eficiencialandaa2(:,1),'c','Linewidth',2)
plot(eficiencialandab2(:,2),eficiencialandab2(:,1),'k*','Linewidth',2,'MarkerS
ize',5)
plot(eficiencialandaa3(:,2),eficiencialandaa3(:,1),'g','Linewidth',2)
plot(eficiencialandab3(:,2),eficiencialandab3(:,1),'-
.r','Linewidth',2,'MarkerSize',1)
plot(eficiencialanda123(:,2),eficiencialanda123(:,1),'b','Linewidth',2)
L=legend('Q_{abs} a_1', 'Q_{abs} b_1', 'Q_{abs} a_{1}b_{1}', 'Q_{abs}
a_2', 'Q_{abs} b_2', 'Q_{abs} a_3', 'Q_{abs}
b_3', 'Q_{abs123}','Location','NorthEastOutside')
xlim([400E-9 1000E-9])
ylim([0 2])
xlabel('\lambda(nm)', 'FontSize', 30)
ylabel('Q_{absAu}', 'FontSize', 30)
title('Q_{absAu}(XXnm) vs \lambda', 'FontSize', 30)
set(gca, 'FontSize', 25) % el tamaño de los números
set(L, 'FontSize', 20)
legend boxoff
print(Figura, '-djpeg', '-r300', ['Q_absAu250 vs lambda.jpg']);
hold off
end

```

Código 5: represntefiext.m

```
function result= represntefiext
%Se cargan las eficiencias de extinción de las partículas de distinto tamaño
load('eficienciaextAu20nm.mat')
load('eficienciaextAu30nm.mat')
load('eficienciaextAu50nm.mat')
load('eficienciaextAu100nm.mat')
load('eficienciaextAu150nm.mat')
load('eficienciaextAu200nm.mat')
load('eficienciaextAu250nm.mat')
%Se representan las eficiencias de extinción frente a la longitud de onda
Figura= figure;
plot(eficienciatotalextAu250(:,2),eficienciatotalextAu250(:,1),'m','Linewidth',
,2)
hold on
plot(eficienciatotalextAu200(:,2),eficienciatotalextAu200(:,1),'r','Linewidth',
,2)
plot(eficienciatotalextAu150(:,2),eficienciatotalextAu150(:,1),'b','Linewidth',
,2)
plot(eficienciatotalextAu100(:,2),eficienciatotalextAu100(:,1),'c','Linewidth',
,2)
plot(eficienciatotalextAu50(:,2),eficienciatotalextAu50(:,1),'-
.k','Linewidth',2)
plot(eficienciatotalextAu30(:,2),eficienciatotalextAu30(:,1),'g','Linewidth',2
)
plot(eficienciatotalextAu20(:,2),eficienciatotalextAu20(:,1),'k','Linewidth',2
)
L=legend('r=250 nm','r=200 nm ','r=150 nm', 'r=100 nm', 'r=50 nm', 'r=30 nm',
'r=20 nm')
xlim([400E-9 1500E-9])
ylim([0 8])
xlabel('\lambda(nm)', 'FontSize' , 30)
ylabel('Q_{extAu}', 'FontSize' , 30)
title('Q_{extAu} vs \lambda', 'FontSize' , 30)
set(gca, 'FontSize' , 10)
set(L, 'FontSize' , 20)
print(Figura, '-djpeg', '-r300', ['Q_extAu vs lambda.jpg']);
hold off
end
```

Código 6: represntefis.m

```
function result= represntefis
%Se cargan las eficiencias de extinción, absorción y dispersion de la
particula de tamaño que deseemos.Llamamos XX al valor del radio
load('eficienciaextAuXXnm.mat')
load('eficienciaabsAuXXnm.mat')
load('eficienciascaAuXXnm.mat')
%Se representan las eficiencias frente a la longitud de onda
plot(eficienciatotalextAu20(:,2),eficienciatotalextAu200(:,1),'b','Linewidth',
2.9)
hold on
plot(eficienciatotalscaAu20(:,2),eficienciatotalscaAu200(:,1),'c','Linewidth',
2)
plot(eficienciatotalabsAu20(:,2),eficienciatotalabsAu200(:,1),'r','Linewidth',
2)
L=legend('Q_{ext}', 'Q_{sca}', 'Q_{abs}')
set(L, 'FontSize' , 20)
set(gca, 'FontSize' , 25)
xlim([400E-9 1500E-9])
ylim([0 8])
xlabel('\lambda(nm)', 'FontSize' , 30)
ylabel('Q (ua)', 'FontSize' , 30)
title(' R=XXnm ', 'FontSize' , 30)
hold off
end
```

Código 7: Mie_campoelecsca.m

```
function result=Mie_campoelecsca(N,N1,nmax,landa,rpar)
%%Primero introducimos todos los valores necesarios para el cálculo
mu=1;
mu1=1;
E_cero=1;
N=input('Introduzca el valor del índice del medio: ');
N1=input('Introduzca el valor del índice de la partícula: ');
m=N1/N;
landa=input('Introduzca el valor de la longitud de onda de la luz
incidente en microm: ');
k=(2*pi*N)/landa;
nmax=input('Introduzca el valor del orden del ultimo coeficiente: ');
n=1:1:nmax;
rpar=input('Introduzca el valor del radio de la partícula en nm: ');
x=k*rpar;
nnn=Mie_abcd(N,N1,nmax,rpar,landa);
%%Ahora creamos todos los vectores y matrices de ceros que vamos a
usar
p_n=zeros(1,length(n));
p_n_2=zeros(1,length(n));
tau_n=zeros(1,length(n));
tau_n_2=zeros(1,length(n));
E_1=zeros(1,3);
E_1_en=zeros(1,3);
e=zeros(1,3);
v=zeros(1,3);
guardar=zeros(1,3);
guardar_2=zeros(1,3);
matriz_guardar=zeros(length(n),3);
%%Ahora creamos todos los puntos X Y Z donde se va a calcular el campo
x_max=rpar+100;
y_max=x_max;
intervalo=1;
Xdata=zeros(1,(x_max*2));
Ydata=zeros(1,(y_max*2));
Zdata=zeros(length(Xdata),length(Ydata));
%%ahora pasamos a coordenadas esfericas y creamos un bucle for para ir
%%seleccionando todos los puntos
vectorx=-x_max:intervalo:x_max;
vectory=-y_max:intervalo:y_max;
for ii=1:1:length(vectorx)
    Xdata=vectorx(ii)
    for j=1:1:length(vectory)
        Ydata=vectory(j);
        [theta,fi,r]=cart2sph(Xdata,Ydata,0);
        %%Una vez se tienen las coordenadas se calcula el campo electrico
        dispersado para esas coordenadas
        if r<rpar
            Zdata(ii,j)=0;
        elseif r>rpar
            for s=3:1:4
                p_n(1)=0;
                p_n(2)=1;
                tau_n(1)=0;
                tau_n(2)=cos(theta);
                p_n_1(s)=(((2*(s-1)-1)/((s-1)-1)))*p_n(s-1);
                p_n_2(s)=((s-1)/(s-2))*p_n(s-2);
                p_n(s)=p_n_1(s)*cos(theta)-p_n_2(s);
```

```

tau_n_1(s)=(s-1)*p_n(s)*cos(theta);
tau_n_2(s)=(s)*p_n(s-1);
tau_n(s)=tau_n_1(s)-tau_n_2(s);
%%Comenzamos calculando el campo electrico con n=1
E=((1i^(s-1))*E_cero*(2*(s-1)+1))/((s-1)*(s));

E_1_theta=((1i*E_cero*3)/(2))*cos(fi)*sqrt(pi/(2*k*r))*besselh(1+1/2,1,
k*r);
E_1_phi=((1i*E_cero*3)/(2))*(-
sin(fi)*cos(theta)*sqrt(pi/(2*k*r))*besselh(1+1/2,1,k*r));
E_1=[0,E_1_theta,E_1_phi];

E_1_r_en=((1i*E_cero*3)/(2))*(cos(fi)*2*sin(theta)*sqrt(pi/(2*k*r))*be
sselh(1+1/2,1,k*r))/(k*r);

E_1_theta_en=((1i*E_cero*3)/(2))*cos(fi)*cos(theta)*((k*r*sqrt(pi/(2*k
*r))*besselh(1/2,1,k*r)-
(k*r*sqrt(pi/(2*k*r))*besselh(1+1/2,1,k*r)))/(k*r));
E_1_phi_en=((1i*E_cero*3)/(2))*(-
sin(fi)*((k*r*sqrt(pi/(2*k*r))*besselh(1/2,1,k*r)-
(k*r*sqrt(pi/(2*k*r))*besselh(1+1/2,1,k*r)))/(k*r)));
E_1_en=[E_1_r_en,E_1_theta_en,E_1_phi_en];
a_1=nnn(1,1);
b_1=nnn(2,1);
campo_electrico_1=1i*a_1*E_1_en-b_1*E_1;
%Moln=e

f=@(r,theta,fi)(cos(fi))*(p_n(s))*sqrt(pi/(2*k*r))*besselh(s-
1+1/2,1,k*r);
w=f(r,theta,fi);
t=@(r,theta,fi)(-sin(fi)*sqrt(pi/(2*k*r))*besselh(s-
1+1/2,1,k*r)*(tau_n(s)));
b=t(r,theta,fi);
e=[0,w,b];
%Neln=guardar
e_r=@(r,theta,fi)(cos(fi)*(s-
1)*(s)*sin(theta)*p_n(s)*sqrt(pi/(2*k*r))*besselh(s-
1+1/2,1,k*r))/(k*r);
derivada=((k*r*sqrt(pi/(2*k*r))*besselh(s-
2+1/2,1,k*r))-(((s-1)*k*r*sqrt(pi/(2*k*r))*besselh(s-
1+1/2,1,k*r))))/(k*r);
e_theta=@(r,theta,fi)(cos(fi)*(tau_n(s))*derivada);
e_phi=@(r,theta,fi)(-sin(fi)*p_n(s)*derivada);
e_1=e_r(r,theta,fi);
e_2=e_theta(r,theta,fi);
e_3=e_phi(r,theta,fi);
guardar=[e_1,e_2,e_3];
a_n=nnn(1,s-1);
b_n=nnn(2,s-1);
campo_electrico=E*(1i*a_n*guardar-b_n*e);
matriz_guardar(1,1)=campo_electrico_1(1);
matriz_guardar(1,2)=campo_electrico_1(2);
matriz_guardar(1,3)=campo_electrico_1(3);
matriz_guardar(s-1,1)=campo_electrico(1);
matriz_guardar(s-1,2)=campo_electrico(2);
matriz_guardar(s-1,3)=campo_electrico(3);

```

end

%%Ahora se colocan los resultados del campo eléctrico y se calcula la intensidad en cada punto

```

vector_resultado=[sum(matriz_guardar(:,1)),sum(matriz_guardar(:,2)),sum(matriz_guardar(:,3))];

modulo_vector_resultado=sqrt((vector_resultado(1))^2+(vector_resultado(2))^2+(vector_resultado(3))^2);

modulo_vector_resultado_cuadrado=modulo_vector_resultado^2;
Zdata(ii,j)=abs(modulo_vector_resultado_cuadrado);

    end
    end

end

%Una vez calculado todo se representa
Xdata=vectorx;
Ydata=vectory;
limit_step=intervalo;
upper_value=max(Xdata);
lower_value=min(Xdata);
limitx = lower_value:limit_step:upper_value;
limity = lower_value:limit_step:upper_value;
[Xgrid,Ygrid] = meshgrid(limitx,limity);
Zgrid = griddata(Xdata, Ydata, Zdata, Xgrid, Ygrid)
Figura = figure;
contourf(Xgrid,Ygrid,Zgrid,100, 'LineStyle', 'none');
axis square;
hold on
% Draw the spheres into the contour plot
angle = 0:.01:2*pi;
plot(rpar*sin(angle),rpar*cos(angle),...
     'k','LineWidth',1);
xlabel('x(nm)','FontSize', 25)
ylabel('z(nm)','FontSize', 25)
title('|E_{sca}|^2','FontSize', 25)
xlim([-350 350])
ylim([-350 350])
set(gca,'FontSize', 20) % el tamaño de los números
contourcmap('jet',[0:1:15],...
           'colorbar','on','location','vertical')
print(Figura,'-djpeg','-r300',['intencampocercanoAuXXnm.jpg']);
hold off
result=Zdata;
end

```

Código 8: Mie_campolejano.m

```
function result= Mie_campolejano(N1,N,nmax,rpar,landa)
E_cero=1;
mu=1;
mul=1;
N=input('Introduzca el valor del índice del medio: ');
N1=input('Introduzca el valor del índice de la partícula: ');
m=N1/N;
rpar=input('Introduzca el valor del radio de la partícula en nm: ');
landa=input('Introduzca el valor de la longitud de onda de la luz incidente en nm: ');
nmax=input('Introduzca el valor del orden del último coeficiente: ');
k=(2*pi)/landa;
rpar=250;
rpos=10000;
fi=0;
x=k*rpar;
vectortheta=0:0.01:2*pi;
f=Mie_abcdconxymrepresent(mu,mul,m,nmax,x,rpar,landa);
almacen=zeros(length(vectortheta),4);
n=1:1:nmax;
p_n=zeros(1,length(n));
p_n_2=zeros(1,length(n));
tau_n=zeros(1,length(n));
tau_n_2=zeros(1,length(n));
for o=1:1:length(vectortheta)
theta=vectortheta(o);
a_1=f(1,1);
b_1=f(2,1);
a_2=f(1,2);
b_2=f(2,2);
a_3=f(1,3);
b_3=f(2,3);
a_4=f(1,4);
b_4=f(2,4);
%Primero calculamos las intensidades para n=1
cte1=3/2;
S11=cte1*(a_1+b_1*cos(theta));
S21=cte1*(a_1*cos(theta)+b_1);
Epar1=(-E_cero*(exp(1i*k*rpos)))/(-1i*k*rpos)*S11;
Eper1=(E_cero*(exp(1i*k*rpos)))/(-1i*k*rpos)*S21;
Ipar1=(norm(Epar1)).^2;
Iper1=(norm(Eper1)).^2;
%Ahora calculamos las intensidades para n=2
p_n(1)=0;
p_n(2)=1;
tau_n(1)=0;
tau_n(2)=cos(theta);
p_n_1(3)=((2*(3-1)-1)/((3-1)-1))*p_n(3-1);
p_n_2(3)=(3-1)/(3-2)*p_n(3-2);
p_n(3)=p_n_1(3)*cos(theta)-p_n_2(3);
tau_n_1(3)=(3-1)*p_n(3)*cos(theta);
tau_n_2(3)=(3)*p_n(3-1);
tau_n(3)=tau_n_1(3)-tau_n_2(3);
cte2=5/6;
S12=cte2*(a_2*p_n(3)+b_2*tau_n(3));
S22=cte2*(a_2*tau_n(3)+b_2*p_n(3));
Epar2=(-E_cero*(exp(1i*k*rpos)))/(-1i*k*rpos)*S12;
Eper2=(E_cero*(exp(1i*k*rpos)))/(-1i*k*rpos)*S22;
Ipar2=(norm(Epar2)).^2;
Iper2=(norm(Eper2)).^2;
%Ahora calculamos las intensidades para n=3
p_n_1(4)=((2*(4-1)-1)/((4-1)-1))*p_n(4-1);
p_n_2(4)=(4-1)/(4-2)*p_n(4-2);
p_n(4)=p_n_1(4)*cos(theta)-p_n_2(4);
tau_n_1(4)=(4-1)*p_n(4)*cos(theta);
```

```

tau_n_2(4)=(4)*p_n(4-1);
tau_n(4)=tau_n_1(4)-tau_n_2(4);
cte4=7/12;
S13=cte4*(a_3*p_n(4)+b_3*tau_n(4));
S23=cte4*(a_3*tau_n(4)+b_3*p_n(4));
Epar3=(-E_cero*(exp(1i*k*rpos)))/(-1i*k*rpos)*S13;
Eper3=(E_cero*(exp(1i*k*rpos)))/(-1i*k*rpos)*S23;
Ipar3=(norm(Epar3)).^2;
Iper3=(norm(Eper3)).^2;
%Ahora sumamos todas las intensidades
Ipar=Ipar1+Ipar2+Ipar3;
Iper=Iper1+Iper2+Iper3;
Itot=Ipar+Iper;
almacen(o,1)=theta;
almacen(o,2)=Ipar;
almacen(o,3)=Iper;
almacen(o,4)=Itot;
intensidadlejAu250=almacen;
end
save campolejanoAu250nm intensidadlejAu250
result=almacen;
Figura= figure;
polar(almacen(:,1),almacen(:,4),'r')
hold on
polar(almacen(:,1),almacen(:,3),'b')
polar(almacen(:,1),almacen(:,2),'m')
L=legend('Itot=Iper+Ipar', 'Ipar', 'Iper','Location','NorthEastOutside')
set(L,'FontSize' , 20)
title('Intensidad(R=250) vs Theta','FontSize' , 30)
print(Figura,'-djpeg','-r300', ['IntenlejXXnmAulanda vs theta.jpg']);
hold off
end

```