



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLAS DE HIDALGO

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO-MATEMÁTICAS
“MAT. LUIS MANUEL RIVERA GUTIÉRREZ”

MODELADO DE UN SENSOR DE RESONANCIA DE PLASMONES SUPERFICIALES PARA APLICACIONES BIOLOGICAS

TESIS PARA OBTENER EL GRADO DE
LICENCIADO EN CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

Presenta:
JOSUE COHENETE CRISOSTOMO

Asesora:
Dra. Mary Carmen y Monserrat
Peña Gomar

Coasesor:
Dr. Irving Rondón Ojeda

MORELIA, MICHOACAN, AGOSTO DEL 2017.

”Que ironía, el universo tratando de estudiarse a si mismo”

Agradecimientos

A mis padres por brindarme la oportunidad de estudiar una Licenciatura y ponerme el ejemplo día a día con su dedicación y esfuerzo en todo lo que hacen. Fue demasiado importante todo el apoyo que me brindaron a lo largo de toda la carrera así como todos los consejos y su paciencia.

A toda mi familia en general les agradezco por sus pláticas tan largas que me daban lo cual me llevo a ponerle más esfuerzo en todo.

A todos mis amigos, Jorge Morfin, Santiago Crisanto, Juan Morales, Samuel Morales, Armando Madrigal, Otilia Segura, Azucena Orozco, Manuel Vega, Eduardo Vite, solo por mencionar algunos, le agradezco por compartir los buenos y malos momentos.

A mi asesora de Tesis, Mary Carmen Peña Gomar la cual confió en mí para la realización de este proyecto brindándome en todo momento sus conocimientos y asesorías para lograr sacarlo adelante así como su amistad.

A mi Co-asesor Irving Rondón Ojeda por su gran paciencia que me tuvo y por su maravillosa orientación que me brindo para esta tesis, por su apoyo y amistad.

A todos mis profesores de la licenciatura en Físico-Matemático que me enseñaron tanto de la profesión como de la vida. En especial al profesor Jaime Nieto Pérez por sus pláticas tan motivadoras y por sus demostraciones maravillosas e interesantes prácticas de laboratorio.

A todos mis profesores que me ayudaron de alguna u otra forma en alguna etapa de mi formación.

Resumen

En esta tesis se modeló un sensor basado en la técnica de Resonancia de Plasmones Superficiales, que emplea una película delgada de oro (Au) para su implementación como un biosensor. Se hallaron los parámetros ópticos necesarios y las condiciones óptimas en donde ocurre dicha resonancia. Estos se obtuvieron resolviendo las ecuaciones de Maxwell y empleando el modelo de electrones libres de Drude. Con los parámetros obtenidos se implementaron algoritmos para obtener las curvas de la reflectancia; esto se logró analizando las ecuaciones de Fresnel para la geometría de Krechtsmann para 3 y 4 capas. Las curvas obtenidas con el programa en Matlab desarrollado, fueron para diferentes componentes del ojo humano y sustancias químicas. Se analizaron las curvas de la reflectancia donde la respuesta del plasmón se obtuvo localizando la caída de la reflectancia con el ángulo de acoplamiento. Se realizó una optimización del sistema donde se fue variando los parámetros ópticos, tales como la longitud de onda, el grosor de una capa de dieléctrico y el grosor de la película metálica. Finalmente se hizo un estudio numérico sobre la aplicación de la resonancia de plasmones superficiales para medir la concentración de bacterias de biopelícula E. Coli. De los resultados obtenidos, se observó que para una configuración de 4 capas se obtiene una mayor resolución en las mediciones, lo que permite diseñar un sistema experimental a base de resonancia de plasmones superficiales.

Palabras claves— Biosensor, Función dieléctrica, Resonancia, Plasmones, Reflectancia.

Abstract

This thesis modeled a sensor based on the technique of superficial plasmons resonance, which uses a thin film of gold (Au) for its implementation as a biosensor. We found the necessary optical parameters and the optimal conditions where this resonance occurs. These were obtained by solving the Maxwell equations and using the Drude-free electron model. With the parameters obtained, algorithms were implemented to obtain the curves of the reflectance; This was achieved by analyzing the Fresnel equations for the geometry of Krechtsmann for 3 and 4 layers. The curves obtained with the program in Matlab developed, were for different components of the human eye and chemicals. We analyzed the curves of the reflectance where the response of the plasmon was obtained by compared the fall of the reflectance with the angle of coupling. An optimization of the system was performed where the optical parameters were varied, such as the wavelength, the thickness of the dielectric and the thickness of the metal film. Finally a numerical study was made on the application of the resonance of superficial plasmons to measure the concentration of bacteria biofilm E. Coli. From the obtained results, it was observed that for a configuration of 4 layers a higher resolution is obtained in the measurements, which allows to design an experimental system a base of resonance of superficial plasmons.

Índice general

Agradecimientos	III
Resumen	IV
Abstract	V
1. Antecedentes	1
1.1. Biosensores	1
1.2. Resonancia de plasmones superficiales	2
1.2.1. Aplicaciones	3
1.3. Objetivos	7
1.4. Organización de la tesis	7
2. Fundamentos Teóricos	8
2.1. Ecuaciones de Maxwell	8
2.1.1. Propagación de la luz en un medio conductor.	9
2.1.2. Ecuaciones de Fresnel en un dieléctrico	11
2.1.3. Ecuaciones de Fresnel en un metal	16
2.2. Modelo Oscilador de Lorentz	19
2.3. Modelo de Drude	24
3. Plasmones	27
3.1. Teoría	27
3.2. Modelo multicapas	33
3.2.1. Modelo de 3 capas	34
3.2.2. Modelo de 4 capas	35
3.2.3. Modelo de N capas	37
4. Modelación	38
4.1. Simulación para 3 capas de muestras químicas y biológicas	39
4.2. Simulación para 4 capas	42
4.3. Optimización de parámetros ópticos	43
4.4. Modelación de un sensor SPR para detectar la bacteria E. Coli	46
5. Conclusiones	49
Bibliografía	51

Capítulo 1

Antecedentes

1.1. Biosensores

Antiguamente un biosensor se consideraba como una sonda analizadora que se introducía en un medio biológico y que proporcionaba una señal cuantificable. Esto también abarca a los electrodos ión selectivo y de pH [1]. Actualmente la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC) le asigna la siguiente definición: un biosensor es un instrumento capaz de facilitar una información analítica específica cuantitativa o semicuantitativa, empleando un elemento de reconocimiento biológico que está en contacto directo con un elemento transductor. La investigación de moléculas o conjunto de moléculas específicas constituye un proceso fundamental en el funcionamiento de los sistemas biológicos. La naturaleza ha desarrollado un vasto conjunto de biomoléculas o estructuras biomoleculares que presentan una gran selectividad en el estudio de alguna propiedad particular de una molécula específica de entre un conjunto o una mezcla de ellas. Este tipo de fenómeno de reconocimiento selectivo de especies evidentemente puede ser utilizados con fines analíticos para el diseño y preparación de sensores de dichas especies. El transductor, en el cual se encuentra retenido el material biológico, debe permitir la interacción del analito con el receptor en una respuesta eléctrica, que luego es amplificada o procesada y estará relacionada con la concentración de ese analito. Dicho transductor, determina la eficiencia en el procesamiento de la señal del biosensor, mientras que su selectividad es definida por la particularidad de la interacción del material biológico con el analito. Los dispositivos de este tipo deben responder continua y reversiblemente al analito de interés sin perturbar la muestra, eliminando así la necesidad de su pre-tratamiento (figura 1.1) [2].

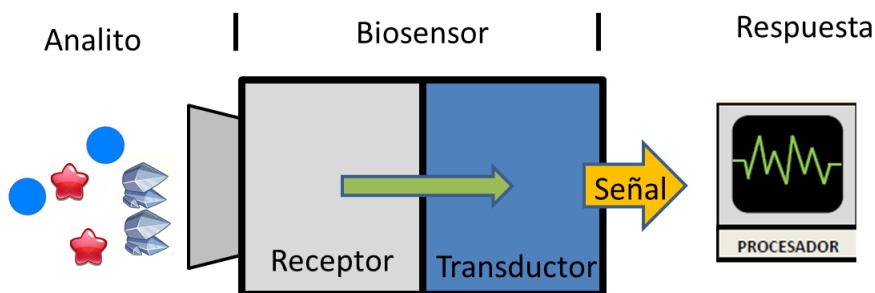


Figura 1.1: Esquema de un biosensor [2].

Algunos de los equipos analíticos son cada vez más complejos y son empleados para bioanálisis, los cuales fueron desarrollados en las últimas tres décadas y forman un biosensor dependiendo de la definición de transductor; por ejemplo espectrofotómetros IR y UV, fluorímetros, equipos RMN, etc. Sin embargo, los biosensores se diferencian esencialmente de las técnicas existentes desde varios puntos de vista muy útiles y fundamentales; el contacto del elemento biológico (células enteras, orgánulos, anticuerpos o enzimas) con un transductor que transforma la señal biológica en una señal eléctrica cuantificable; la porción sensora de un biosensor es comúnmente pequeña y eso permite dimensiones pequeños de muestra; una interferencia ínfima con los procesos existentes después de la implantación y; por último, el análisis de medios peligrosos o poco accesibles, sin interrumpir el flujo del proceso. El material biológico puede solucionarse para satisfacer las necesidades analíticas operando a varios niveles de especificidad. Puede ser altamente selectivo, específico para un margen estrecho de compuestos o mostrar un amplio espectro de especificidad. Un ejemplo claro de tal graduación de especificidad sería un biosensor sensible a un sólo antibiótico o a todos los amino-glucósidos, o bien a todos los antibióticos. Esta flexibilidad de elección del material biológico facilita al usuario adaptar el biosensor a la necesidad requerida [1].

Una técnica que se ha estado utilizando en el desarrollo de biosensores, son los basados en la Resonancia de Plasmón Superficial (SPR por sus siglas en ingles). Este fenómeno óptico permite la detección de cambios de índice de refracción en las proximidades de la superficie de separación entre un metal y un dieléctrico. Por ello, el sensor de SPR se engloba dentro de los sensores ópticos de Campo Evanesciente [3]. La tecnología SPR es una poderosa técnica para analizar las interacciones biomoleculares. Una de las principales ventajas es que SPR no requiere etiquetas fluorescentes, que a menudo son tóxicos y pueden interferir con los procesos biológicos [4]. El renovado interés por los SPR proviene de los recientes avances que permiten estructurar y caracterizar los metales a escala nanométrica [5], por lo que en las siguientes secciones se hablará sobre la definición de la Resonancia de plasmones superficiales y las aplicaciones relevantes en la actualidad.

1.2. Resonancia de plasmones superficiales

Debido a su carácter bidimensional y capacidad de almacenar luz en espacios reducidos, los plasmones superficiales son firmes candidatos a desempeñar una función clave en futuros dispositivos ópticos. Los metales además de reflejar luz, tienen una gran propiedad óptica menos conocida: bajo ciertas condiciones la luz puede viajar por las superficies metálicas sin alejarse de ellas. Esta es una propiedad muy peculiar, ya que en condiciones normales la luz viaja por las tres dimensiones del espacio y no se le confina con facilidad. En realidad, esta “luz superficial” es una onda más complicada que la luz normal, ya que no consiste sólo en un campo electromagnético, sino que involucra también los electrones libres presentes en los metales. Rufus Ritchie descubrió estas ondas, o “plasmones superficiales” (SP), en los años cincuenta del siglo pasado [6].

Los plasmones de superficie son soluciones de las ecuaciones de Maxwell en las que se tienen en cuenta los efectos del retardo de la velocidad de la luz. Una forma equivalente, se obtienen a partir de soluciones de la ecuación de Laplace para un potencial escalar que se propagan de una manera ondulada a lo largo de una interfaz dieléctrica-metal planar, y cuyas amplitudes disminuyen exponencialmente con el aumento de la distancia desde la interfaz a cada medio [7]. Los plasmones de superficie son básicamente cuantos de oscilaciones de plasma en una superficie metálica. Cuando un plasmón de superficie se acopla con un fotón, se forma una cuasipartícula llamada polaritón de

plasmón superficial (SPP) [8].

SP se basa en procesos de interacción entre la radiación electromagnética y los electrones de conducción en interfases metálicas o en pequeñas nanoestructuras metálicas, permitiendo a aplicaciones de la óptica en dimensiones sub-longitud de onda.

En 1968, dos configuraciones básicas de resonancia de plasmones superficial (SPR) son presentados por Otto [9] y por Kretschmann [10]. En 1983, por primera vez, Liedberg demostró el concepto de Resonancia de Plasmón Superficial (SPR) basado en la configuración de Kretschmann para la aplicación de biosensores [11].

Una fracción de la energía de luz incidente en un ángulo definido puede interactuar con los electrones de la película metálica (plasmón), dicha interacción reduce la intensidad de luz reflejada. El ángulo de incidencia exacto en el cual esto ocurre depende de un número de factores. Uno de los factores principales es el índice de refracción cerca de la parte posterior de la película metálica, en la cual las moléculas están inmovilizadas en una fase móvil que funciona, a todo lo largo, conduciendo a un cambio en el ángulo SPR, que se puede supervisar en tiempo real detectando cambios en la intensidad de la luz reflejada, dando lugar a un sensorgrama. Los ritmos de cambio de la señal de SPR se pueden analizar para arrojar constantes de ritmo aparente para las fases de asociación y disociación de la reacción. El tamaño del cambio en la señal de SPR es directamente proporcional a la masa que es inmovilizada. Se sabe que la resonancia del plasmón superficial (SPR) ocurre en un ángulo de incidencia característico. Este ángulo depende de la permitividad dieléctrica de las capas de los medios adyacentes, puesto que la permitividad depende de la frecuencia de la luz láser excitante [1].

1.2.1. Aplicaciones

Una interesante aplicación de SPR es en el campo de la biomédica, las nanoestructuras de metales plasmónicos representan un nuevo camino hacia la investigación y desarrollo. Por ejemplo, la terapia de ablación fototérmica (PTA por sus siglas en inglés) basada en nanomateriales metálicos se ha explorado activamente para tratar el cáncer con gran éxito. PTA se basa en el calor generado por la luz para destruir las células cancerosas y por lo tanto requiere una fuerte absorción óptica y una alta eficiencia de la conversión fototérmica. Las nanoestructuras metálicas deseadas para la PTA deben tener baja toxicidad, facilidad de administración y conveniencia para la bioconjugación para la focalización activa de las células cancerosas.

Las nanoestructuras de metales nobles son muy prometedoras para aplicaciones de PTA, incluyendo nanopartículas, nanoalambres, nanoceldas y nanoesferas huecas. Entre estas estructuras, las nanoesferas huecas de oro exhiben una combinación única de tamaño pequeño, forma esférica y SPR fuerte, estrecho y sintonizable. Esta perspectiva destaca la importancia del control de la forma en la determinación de las propiedades ópticas y fototérmicas de las nanoestructuras metálicas para aplicaciones PTA [12].

Un tratamiento de cáncer propuesto, emplearía efectos plasmónicos para destruir el tumor. Los médicos inyectan nanocomponentes de 100 nanómetros de partículas de silicio con una capa externa de oro (inserción) en el torrente sanguíneo. Las nanocápsulas se incrustarían en un tumor de rápido crecimiento. Si la luz láser del infrarrojo cercano apunta al área, viajaría a través de la piel

e induciría oscilaciones electrónicas resonantes en los nano-helios, calentando y matando células tumorales sin dañar el tejido sano circundante como se ilustra en la Figura 1.2.

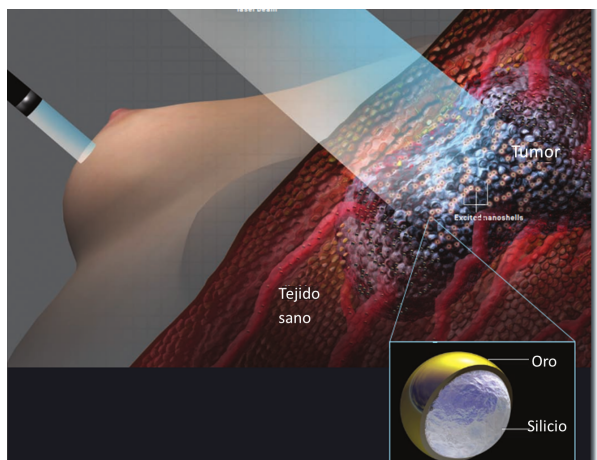


Figura 1.2: El principio básico detrás de PTA es utilizar el calor generado de la luz para destruir las células cancerosas [13].

En la misma área de aplicaciones biomédicas, la tecnología SPR tiene retos tecnológicos; como el desarrollo de un método rápido y eficaz para la detección de microorganismos patógenos ya que es importante para garantizar la seguridad y la inocuidad de los alimentos; controlar contaminación del medio ambiente, del agua y del suelo, o para impedir enfermedades por bioterrorismo. Se ha dicho que 1.5 billones de personas alrededor del mundo estén infectadas por bacterias cada año. Estos agentes plantean amenazas no sólo para la población general sino que también para depósitos de transfusiones de sangre. La industria de comida necesita métodos rápidos para la detección de bacterias patógenas. Los biosensores son necesarios para la detección de agentes que producen enfermedad en comida y agua. Las obras más recientes se basan en el uso de las técnicas que se instrumentan solas y además en el incremento de la sensibilidad de los biosensores desarrollados. Una solución propuesta es el uso de nanopartículas de oro que han ganado un interés creciente para sus características especiales. Además, el uso de nanopartículas permite incrementar la sensibilidad de los biosensores ya que presenta características especiales, tales como propiedades ópticas, electrónicas inusuales y funcionalidad fácil, así que el procedimiento mas atractivo está usando a microorganismos como bacterias y las fungosidades para sintetizar nanopartículas de oro. Los resultados indican que las nanopartículas de oro aumentan la relación superficie-volumen que induce una mayor sensibilidad y un límite de detección mejorado con relación al oro a granel [14–16].

La bacteria *Escherichia coli* (*E. coli*) ha sido intensamente investigada en las últimas décadas y es el organismo modelo procariótico más estudiado por su importancia en el campo de la biotecnología y la microbiología. Enterohemorrágica *E. coli* (EHEC) ha sido reconocida como la causa de graves enfermedades y mortalidad en brotes de enfermedades transmitidas por los alimentos. *E. coli* O157:H7 es una de las bacterias patógenas más preocupantes, pero el problema es grande ya que se sabe que otras cepas patógenas de *E. coli* causan enfermedades transmitidas por los alimentos y por el agua [16]. Uno de los artículos de gran interés para la detección de bacterias fue publicado en 2010 llamado “Surface plasmon resonance immunosensor for bacteria detection” donde se desarrolló un biosensor óptico (RSP) para la detección rápida de dos bacterias, *Escherichia coli* y *Lactobacillus*, como se ilustra en la figura 1.3.

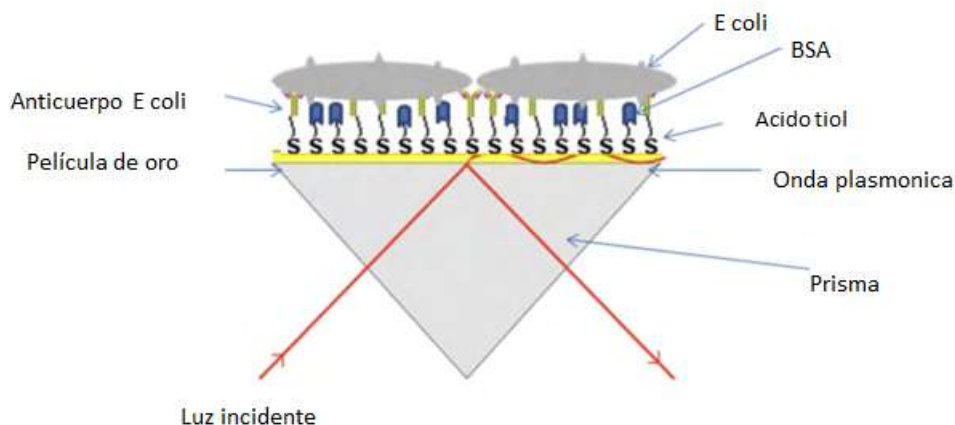


Figura 1.3: Biosensor de bacterias (E. Coli) SPR [14].

SPR ayudará en la detección viral que incluyen el cultivo de células MDCK, la fijación del complemento, la inhibición de la hemaglutinina (glucoproteína antigénica) y, la RT PCR (La reacción en cadena de la polimerasa con transcriptasa inversa por sus siglas en inglés). Puesto que métodos tradicionales generalmente implican procedimientos de laboratorio de trabajo intensivo y a menudo requieren personal capacitado para llevarlos a cabo. Por lo que el desarrollo de tecnologías de biosensores permitirá un diagnóstico rápido y específico de las enfermedades, de manera que un clínico pueda determinar rápidamente si se necesita tratamiento. La resonancia plasmónica de superficie se ha utilizado para la detección del virus de la gripe y el estudio de las interacciones que implican proteínas virales y receptores. El primer uso de SPR en la detección del virus de la gripe fue informado por Schofield y Dimmock [17].

Los biosensores SPR pueden ser utilizados para una caracterización diversa de los anticuerpos modificados, se han utilizado con éxito para la detección de drogas, en la detección de micotoxinas, pesticidas, monitoreo del proceso de destilación. Además se han empleado en la caracterización y detección en línea de carbohidratos, en alérgenos en alimentos y la detección y biodetección de productos químicos [1].

Otra aplicación que fue ganando terreno desde la invención del transistor en 1947, es el mejoramiento en el control sobre la transmisión de la luz mediante aberturas de longitud de onda secundaria a través de las excitaciones de plasmón. Esto sugiere una gran mejora del transistor, lo que ha estimulado una enorme cantidad de investigación desde la descripción inicial en 1998 de la transmisión mejorada de luz encontrada en las matrices de apertura [18]. También ha experimentado un crecimiento en el ancho de banda para la transmisión de información, pero no en la densidad de integración, por lo que la fotónica ha sido en su mayoría una tecnología de dispositivos discretos. El campo de la plasmónica puede ser una disciplina habilitadora para finalmente realizar la fotónica a la nanoescala, creando una nueva “unión p-n” en la que los dispositivos ópticos pueden ser escalados hasta y por debajo de la escala de la longitud de onda del espacio libre. Si bien existe un equilibrio entre la pérdida y la localización espacial en las guías de ondas de plasmón, tales resultados sugieren la posibilidad de crear fotónica integrada con incrustaciones de chip con interconexiones plasmónicas metálicas, como se muestra en la figura 1.4 (aplicaciones de SPR en Nanofotónica usando circuitos plasmónicos) [19].

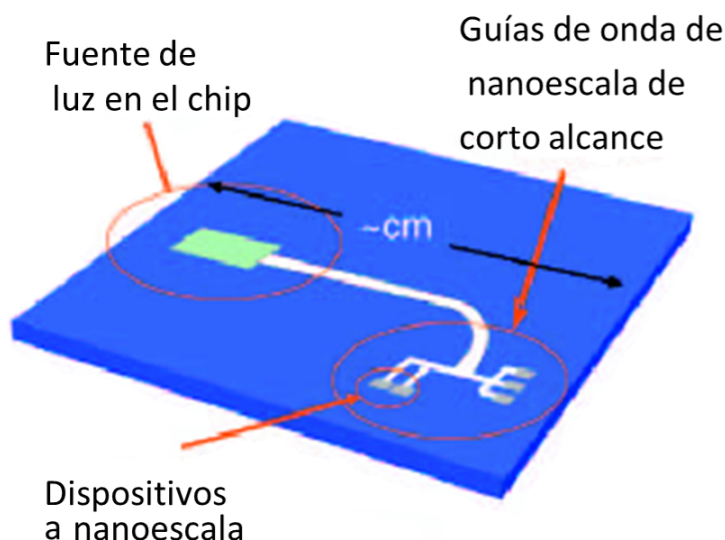


Figura 1.4: Esquema de una red de interconexión plasmónica de escala de chip que permite la propagación a escala de chip y la operación a escala de sub-longitud de onda [19].

En Aplicaciones para celdas fotovoltaicas la excitación de los plasmones superficiales se caracteriza por una fuerte dispersión y mejora del campo eléctrico alrededor de la vecindad de una película metálica. Mediante la manipulación de la geometría de las estructuras metálicas, la resonancia de plasmón superficial o las propiedades de propagación del plasmón pueden ajustarse dependiendo de las aplicaciones (figura 1.5). Las resonancias de metales nobles se encuentran principalmente en la región visible o infrarroja del espectro electromagnético. La resonancia del plasmón de superficie se ve afectada por el tamaño, la forma y las propiedades dieléctricas del medio circundante. La plata y el oro han dominado la investigación experimental en esta área, aunque otros metales también apoyan los plasmones de superficie.

Las celdas solares de película delgada se consideran actualmente la ruta hacia la fotovoltaica de bajo coste. Esto se logra reduciendo la capa fotoactiva, que es en su mayor parte silicio [20].

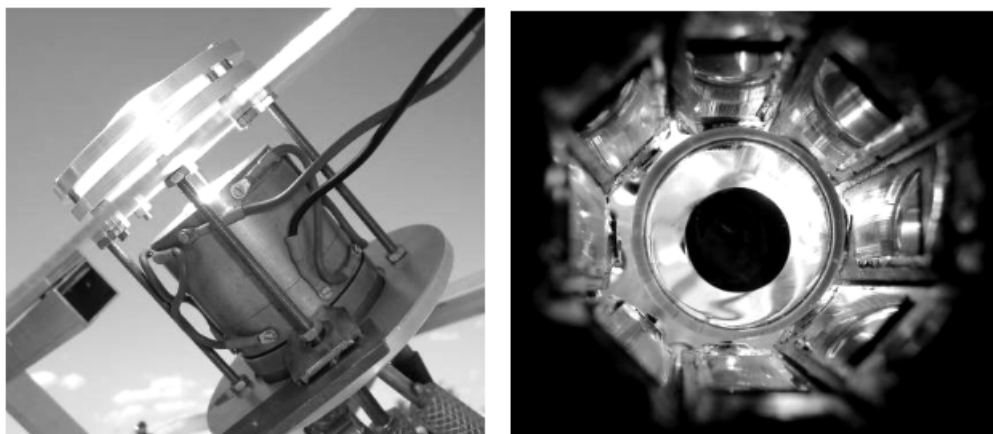


Figura 1.5: Prototipo en operación con las celdas termofotovoltaicas (izquierda). Detalle del interior de la cavidad óptica (derecha). [21].

1.3. Objetivos

Objetivo General

Modelar un Sensor de Resonancia de Plasmones de Superficie para aplicaciones biológicas.

Objetivos Particulares

- Comprender los conceptos físicos involucrados en el fenómeno de la resonancia de plasmones de superficie.
- Realizar un análisis numérico para un sistema de 3 y 4 capas con la configuración Kretschmann.
- Encontrar los parámetros idóneos para obtener un sensor a base de Resonancia de Plasmones con aplicaciones biológicas.

1.4. Organización de la tesis

En este trabajo de tesis esta desarrollado de la siguiente manera:

En el capítulo II se habla de los fundamentos teóricos de medios metálicos que se describen con la ecuación de onda. Se usa la propagación de la luz en un medio conductor y las ecuaciones de Fresnel para materiales dieléctricos y conductores. Además se describe los modelos oscilatorios de Lorentz y Drude para hallar la dependencia de la permitividad con la frecuencia.

En el capítulo III se muestra la teoría de Resonancia de Plasmón Superficial donde se resuelven las ecuaciones de Maxwell para una interfaz plana metal-dieléctrico. De esta forma se determinó los parámetros y condiciones donde se forma los plasmones. Se presentan las configuraciones de Kretschmann y Otto para el modelo de 3 y 4 capas. Además se realiza un análisis de las ecuaciones de Fresnel para medios conductores donde se determinó la ecuación de reflectancia para n capas con geometría de Kretschmann.

En el cuarto capítulo, se realiza el análisis numérico usando la configuración de Kretschmann para el caso de 3 y 4 capas. Se elaboró un programa en MatLab usando los parámetros y las condiciones vistas en los capítulos anteriores. Se analizaron datos de muestras biológicas del ojo humano; que consistieron en humor vítreo, el estroma así como algunas sustancias químicas como metanol ácido acético, por mencionar algunos. Se obtuvieron gráficas para cada muestra donde se describen los parámetros tales como la reflectancia, el ángulo de acoplamiento, la longitud de onda de la radiación incidente y el grosor de la película delgada. Además de los materiales del ojo también se estudió la aplicación de la SPR para el análisis en bacterias con el caso de la bacteria E. Coli a diferentes concentraciones.

Finalmente, en el capítulo V se dan las conclusiones principales de esta tesis.

Capítulo 2

Fundamentos Teóricos

En este capítulo se hará una revisión del comportamiento de los campos electromagnéticos cuando interactúan en un medio dieléctrico y con los metales. Se estudiará como están relacionadas las propiedades microscópicas con las macroscópicas, siendo útil y suficiente como primera aproximación el hacer un análisis clásico para el estudio de los plasmones superficiales.

2.1. Ecuaciones de Maxwell

Para estudiar la propagación de las ondas electromagnéticas partimos de las ecuaciones de Maxwell (escritas en el sistema internacional de unidades SI):

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho, \quad (2.1a)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.1b)$$

$$\nabla \times \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0, \quad (2.1c)$$

$$\nabla \times \vec{H} - \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \vec{J}. \quad (2.1d)$$

En estas ecuaciones $\vec{E}$ representa el campo eléctrico, $\vec{H}$ el campo magnético, $\vec{D}$ el desplazamiento eléctrico, $\vec{B}$ la inducción magnética, ρ es la densidad de las cargas eléctricas libres, $\vec{J}$ representa la densidad de corriente [22].

Directamente de las ecuaciones de Maxwell, se deriva la conservación de la carga eléctrica dada por la ecuación de continuidad

$$\nabla \cdot \vec{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \quad (2.2)$$

También es esencial, considerar el movimiento de una carga (q), cuando se somete a campos electromagnéticos dado por la fuerza de Lorentz por:

$$\vec{F} = q\vec{E} + q\vec{v} \times \vec{B}. \quad (2.3)$$

Por otro lado se tiene que las relaciones entre los campos microscópicos, $\vec{E}$ y $\vec{B}$, y los campos macroscópicos, $\vec{D}$ y $\vec{H}$, conocidas como relaciones constitutivas

$$\vec{D} = \epsilon\vec{E} + \vec{P}, \quad (2.4a)$$

$$\vec{B} = \mu\vec{H} + \vec{M}, \quad (2.4b)$$

donde $\vec{P}$ es la polarización eléctrica (momento dipolar eléctrico promedio por unidad de volumen), $\vec{M}$ es la polarización magnética (momento dipolar magnético promedio por unidad de volumen), $\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$ es permitividad eléctrica que se escribe como el producto de la permitividad en el vacío $\varepsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12}$ F/m por la permitividad relativa, esta es una cantidad compleja, la misma forma se define la permeabilidad magnética $\mu = \mu_0 \mu_r$, de valor en el vacío $\mu_0 = 1,257 \times 10^{-6}$ H/m [18].

Se tiene que en el estudio de la propagación de las ondas normalmente se hace abstracción del mecanismo que las produjo (el proceso de la producción de las ondas es, desde luego, muy importante, pero no es relevante para nuestro estudio).

2.1.1. Propagación de la luz en un medio conductor.

Para entender la respuesta de los metales, se parte de las ecuaciones de Maxwell dadas por (2.1), considerando la densidad de carga eléctrica $\rho = 0$:

$$\nabla \cdot \vec{D} = 0, \quad (2.5a)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.5b)$$

$$\nabla \times \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0, \quad (2.5c)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J}, \quad (2.5d)$$

donde $\vec{J} = \sigma \vec{E}$ y σ es la conductividad del medio, la ecuación de onda en un medio conductor se calcula usando propiedades vectoriales, para el campo eléctrico y magnético se puede escribir como.

$$\nabla^2 \vec{E} - \mu \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} - \mu \sigma \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = 0, \quad (2.6)$$

$$\nabla^2 \vec{B} - \mu \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} - \mu \sigma \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0. \quad (2.7)$$

Para campos de la forma $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r})e^{-i\omega t}$ y $\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{B}(\vec{r})e^{-i\omega t}$ se obtienen al sustituir las ecuaciones de Helmholtz

$$\nabla^2 \vec{E} + k^2 \vec{E} = 0, \quad (2.8)$$

y

$$\nabla^2 \vec{H} + k^2 \vec{H} = 0, \quad (2.9)$$

donde

$$k^2 = \omega^2 \mu (\varepsilon - i \frac{\sigma}{\omega}), \quad (2.10)$$

donde k es el vector de onda, ω es la frecuencia a la que oscila los campos.

Para medios conductores se tiene una constante dieléctrica $\tilde{\varepsilon}$ y un índice de refracción $\tilde{n}$ complejos definido como:

$$\tilde{\varepsilon} = \varepsilon_r + i\varepsilon_i, \quad (2.11a)$$

$$\tilde{n} = n + i\kappa, \quad (2.11b)$$

$$\tilde{n} = \sqrt{\tilde{\varepsilon}}, \quad (2.11c)$$

donde κ es denominado coeficiente de extinción. No olvidar que ambos parámetros son dependientes de la frecuencia ω . Ahora elevando al cuadrado la ecuaciones 2.11c y 2.11b e igualándolos obtenemos

$$\tilde{\varepsilon} = (n + i\kappa)^2 = n^2 - \kappa^2 + 2in\kappa. \quad (2.12)$$

Separando la parte real y la parte imaginaria se obtiene las siguientes ecuaciones:

$$\varepsilon_r = n^2 - \kappa^2, \quad (2.13a)$$

$$\varepsilon_i = 2n\kappa. \quad (2.13b)$$

Finalmente es importante mencionar que cuando $\sigma = 0$ se obtiene las ecuaciones de onda para el campo eléctrico y magnético expresadas por

$$\nabla^2 \vec{E} - \mu\varepsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0, \quad (2.14)$$

y

$$\nabla^2 \vec{B} - \mu\varepsilon \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} = 0. \quad (2.15)$$

Se puede demostrar que estas ecuaciones admiten soluciones representadas por ondas planas de la forma

$$E(z, t) = E_0 e^{i(\vec{k}z - \omega t)} \quad (2.16)$$

y

$$B(z, t) = B_0 e^{i(\vec{k}z - \omega t)}. \quad (2.17)$$

donde $\vec{k}$ representa un vector de onda complejo. De forma simple se puede obtener una relación al sustituir (2.16) y (2.17) en los campos $\vec{E}$ y $\vec{B}$ de la forma

$$\tilde{k}^2 = \mu\varepsilon\omega^2 + i\mu\sigma\omega, \quad (2.18)$$

proponiendo un vector de onda como

$$\tilde{k} = k + i\kappa. \quad (2.19)$$

Después de resolver de forma algebraica se obtienen las siguientes expresiones

$$k \equiv \omega \sqrt{\frac{\varepsilon\mu}{2}} \left[\sqrt{1 + \left(\frac{\sigma}{\varepsilon\omega}\right)^2} + 1 \right]^{1/2} \quad (2.20)$$

y

$$\kappa \equiv \omega \sqrt{\frac{\varepsilon\mu}{2}} \left[\sqrt{1 + \left(\frac{\sigma}{\varepsilon\omega}\right)^2} - 1 \right]^{1/2}, \quad (2.21)$$

donde la parte imaginaria del vector de onda dado por (2.19), representa la atenuación de la onda en el tiempo o una onda evanescente. Es decir las ecuaciones dadas por (2.16) y (2.17) se escribirán como

$$E(z, t) = E_0 e^{-\kappa z} e^{i(kz - \omega t)} \quad (2.22)$$

y

$$B(z, t) = B_0 e^{-\kappa z} e^{i(kz - \omega t)}, \quad (2.23)$$

donde la amplitud de onda se reduce una distancia que físicamente indica una medida de cuanto en longitud la onda penetra en el conductor

$$d \equiv \frac{1}{\kappa}. \quad (2.24)$$

A continuación se describe los principios físicos cuando una onda electromagnética se propaga en un medio dieléctrico y en un metal, lo cual se fundamenta teórica y experimentalmente con las ecuaciones de Fresnel.

2.1.2. Ecuaciones de Fresnel en un dieléctrico

Se definen los coeficientes de Fresnel como los cocientes entre las amplitudes de los campos eléctricos de las ondas reflejadas y transmitidas, y las amplitudes del campo de la onda incidente, en cada dirección. Los coeficientes de Fresnel de reflexión r y transmisión t en general, se expresan como:

$$r = \left(\frac{E_{0r}}{E_{0i}} \right) \quad (2.25)$$

y

$$t = \left(\frac{E_{0t}}{E_{0i}} \right). \quad (2.26)$$

Para el caso particular donde $\vec{E}$ es perpendicular (s) al plano de incidencia nuestros coeficientes quedan:

$$r_s = \frac{n_1 \cos \theta_i - n_2 \cos \theta_t}{n_1 \cos \theta_i + n_2 \cos \theta_t}, \quad (2.27)$$

$$t_s = \frac{2n_1 \cos \theta_i}{n_1 \cos \theta_i + n_2 \cos \theta_t}, \quad (2.28)$$

y para el caso donde $\vec{E}$ es paralelo (p) al plano de incidencia, se tiene

$$r_p = \frac{n_2 \cos \theta_i - n_1 \cos \theta_t}{n_1 \cos \theta_t + n_2 \cos \theta_i}, \quad (2.29)$$

$$t_p = \frac{2n_1 \cos \theta_i}{n_1 \cos \theta_t + n_2 \cos \theta_i}. \quad (2.30)$$

En la interfase que separa los dos medios, debido a las leyes del electromagnetismo, se cumplen las siguientes condiciones.

- El campo eléctrico paralelo a la interfase es continuo.
- El campo magnético paralelo a la interfase es continuo.

Al graficar los coeficientes de Fresnel para el campo eléctrico paralelo y transversal se obtiene unas curvas que se muestran en la figura 2.1 cuando $n_t > n_i$.

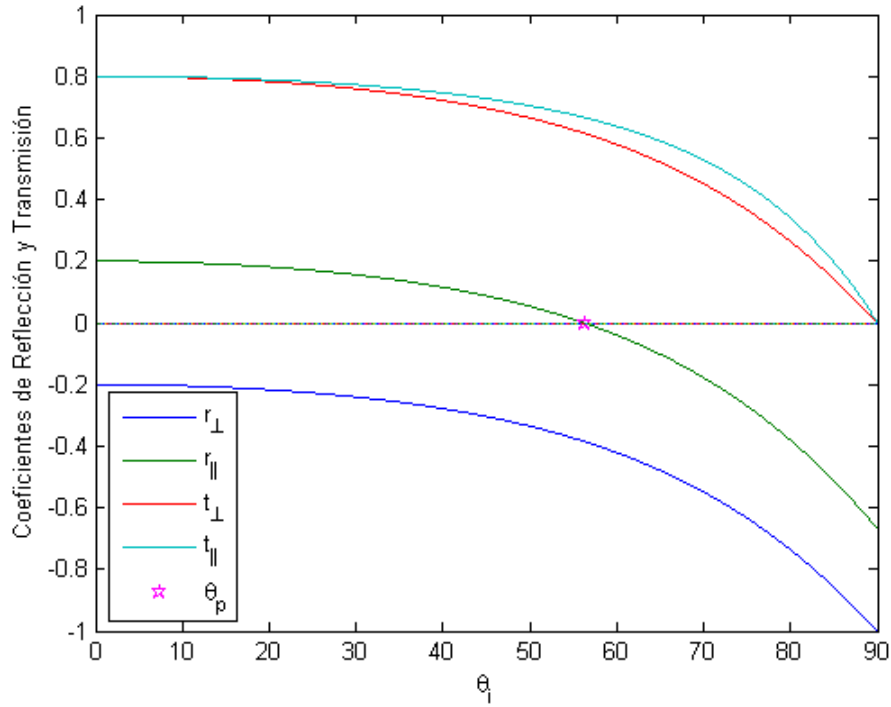


Figura 2.1: Coeficientes de Fresnel para reflexión y transmisión para la amplitud como función del ángulo de incidencia correspondientes a la reflexión externa ($n_t > n_i$), $n_i = 1$ y $n_t = 1.5$.

De la ley de Snell se deduce que $\theta_i > \theta_t$ y así $r_\perp$ es negativo para todos los valores de θ_i . Por lo contrario $r_\parallel$ comienza ser positivo en $\theta_i = 0$ y decrece gradualmente hasta que se anula cuando ($\theta_i + \theta_t = 90^\circ$). El valor particular del ángulo de incidencia por el cual esto ocurre se denota por θ_p y se le conoce como el ángulo de polarización.

En la figura 2.2 se muestra el desfase entre el campo incidente y el reflejado para cuando el campo E es perpendicular al plano de incidencia. Esto se puede relacionar directamente de $r_\perp$, pues en la figura 2.1 podemos ver que $r_\perp$ vs. θ_i su valor es negativo para cualquier valor de θ_i , esto implica que haya un desfase de π rad entre $\vec{E}$ incidente y $\vec{E}$ reflejado.

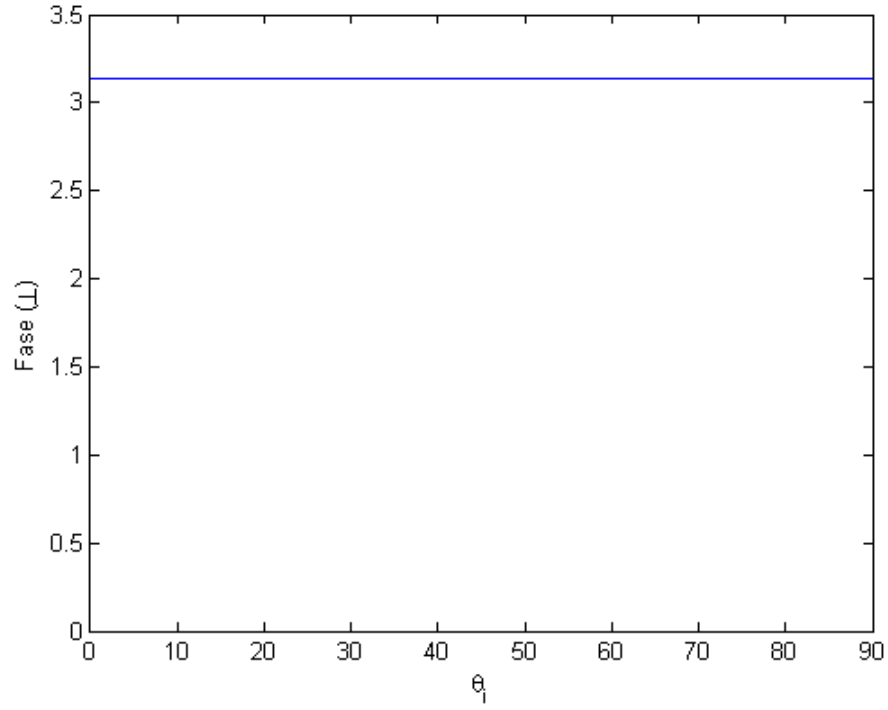


Figura 2.2: Desfasamiento para el caso perpendicular como función del ángulo de incidencia, en donde $n_i < n_t$.

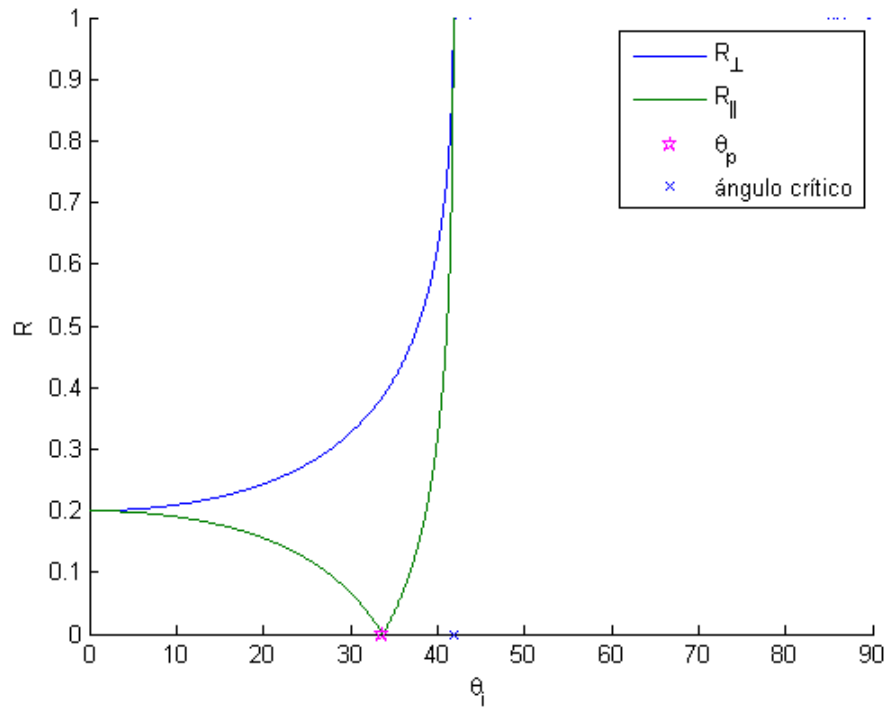


Figura 2.3: Curvas de Reflectancia con polarización transversal y paralela en función del ángulo de incidencia correspondientes a la reflexión interna ($n_i > n_t$) para $n_i = 1,5$ y $n_t = 1$ [22].

En la reflexión interna, en el cual el medio incidente es más denso, es decir $n_i > n_t$. En la figura 2.3 se muestra como $R = |r_{\perp}|^2$ aumenta desde su valor inicial en $\theta_i = 0$ alcanzando +1 a lo que se denomina ángulo crítico θ_c .

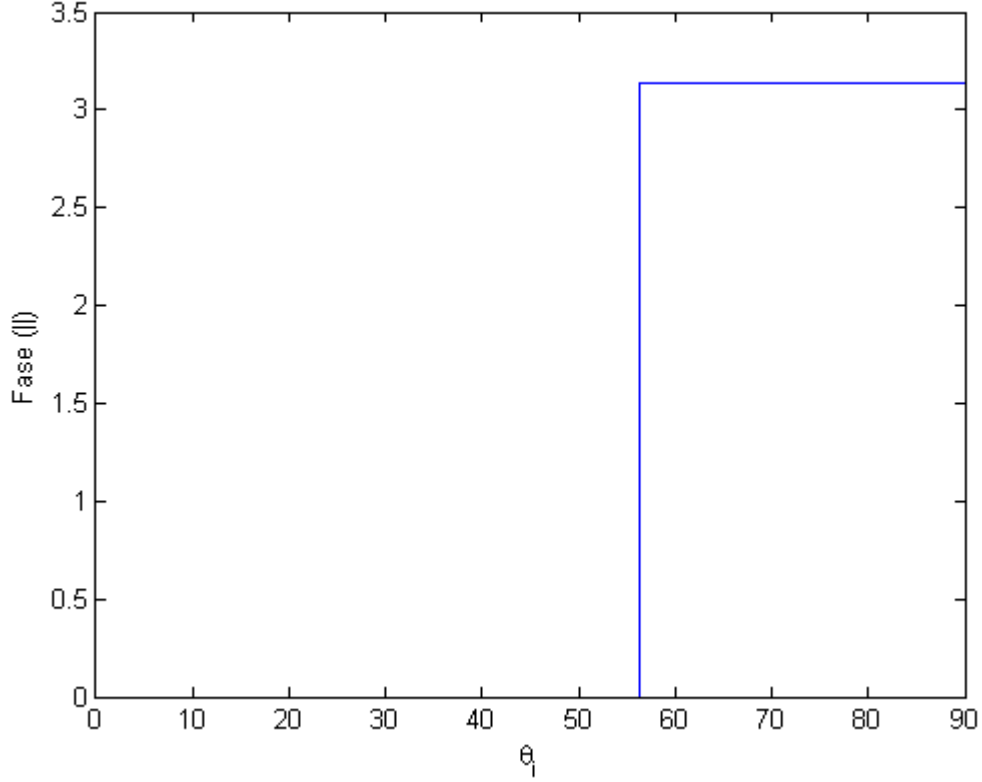


Figura 2.4: Desfasamiento para el caso paralelo como función del ángulo de incidencia, en donde $n_i < n_t$.

En la figura 2.4 se muestra el desfasamiento entre el campo incidente y el reflejado para cuando el campo $\vec{E}$ es paralelo al plano de incidencia.

Se sabe que la intensidad de la luz es proporcional al cuadrado de la amplitud del campo eléctrico, de esta forma, podemos escribir la fracción de la luz reflejada de la superficie, o Reflectancia, en términos de los Coeficientes de Fresnel, para el caso de polarización perpendicular:

$$R_s = \left[\frac{n_1 \cos \theta_i - n_2 \cos \theta_t}{n_1 \cos \theta_i + n_2 \cos \theta_t} \right]^2. \quad (2.31)$$

Para el caso de del rayo polarizado paralelamente al plano de incidencia la ecuación viene dado por:

$$R_p = \left[\frac{n_1 \cos \theta_t - n_2 \cos \theta_i}{n_1 \cos \theta_t + n_2 \cos \theta_i} \right]^2. \quad (2.32)$$

En el caso de no existir pérdidas como absorción o esparcimiento, se puede tener la siguiente relación:

$$T_s = 1 - R_s \quad (2.33)$$

y

$$T_p = 1 - R_p, \quad (2.34)$$

donde T es la Transmitancia para polarización perpendicular (T_s) y paralela (T_p).

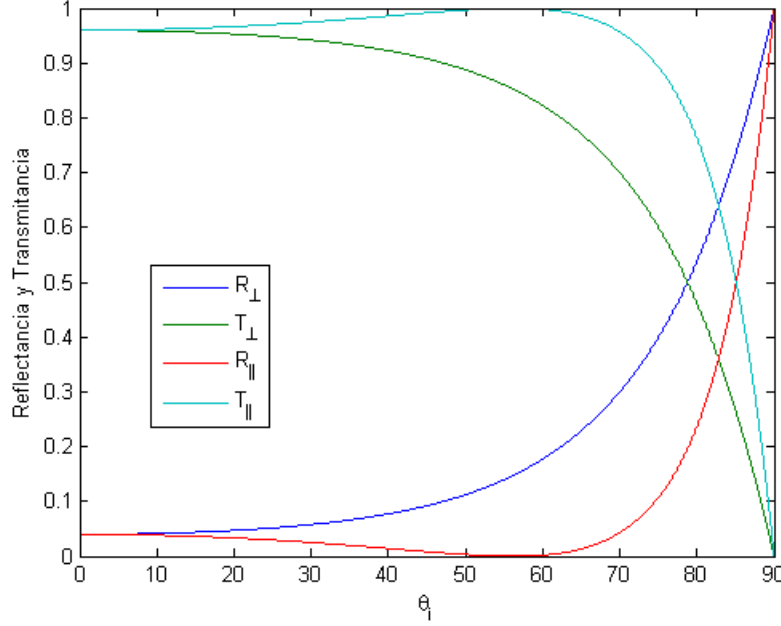


Figura 2.5: Reflectancia y Transmitancia frente al ángulo de incidencia para $n_i = 1,0$ y $n_t = 1,5$ [22].

En la figura 2.5 se muestran el comportamiento de la reflectancia y la transmitancia perpendicular y paralela como función del ángulo de incidencia. Para el caso del campo perpendicular la transmitancia es máxima a incidencia normal y va decreciendo conforme el ángulo de incidencia aumenta. Ya que en este caso no tenemos el ángulo de Brewster, en ningún momento la reflectancia es cero. La reflectancia paralela comienza en el mismo valor que el de la reflectancia perpendicular, pero al contrario de esta, la reflectancia paralela comienza a decrecer hasta llegar a cero, que es cuando el ángulo de incidencia es igual al ángulo de polarización o también conocido como ángulo de Brewster. La ubicación del ángulo de polarización indica un desfase discontinuo ya que la reflectancia va a cero y cuando volvemos a tener reflectancia, el campo ya está desfasado.

Las expresiones de los coeficientes son complicadas para evaluar [23]. Cuando se evalúan las expresiones, es usualmente deseable ponerlas en la forma:

$$r_s = |r_s| e^{i\phi_s} \quad (2.35)$$

y

$$r_p = |r_p| e^{i\phi_p}. \quad (2.36)$$

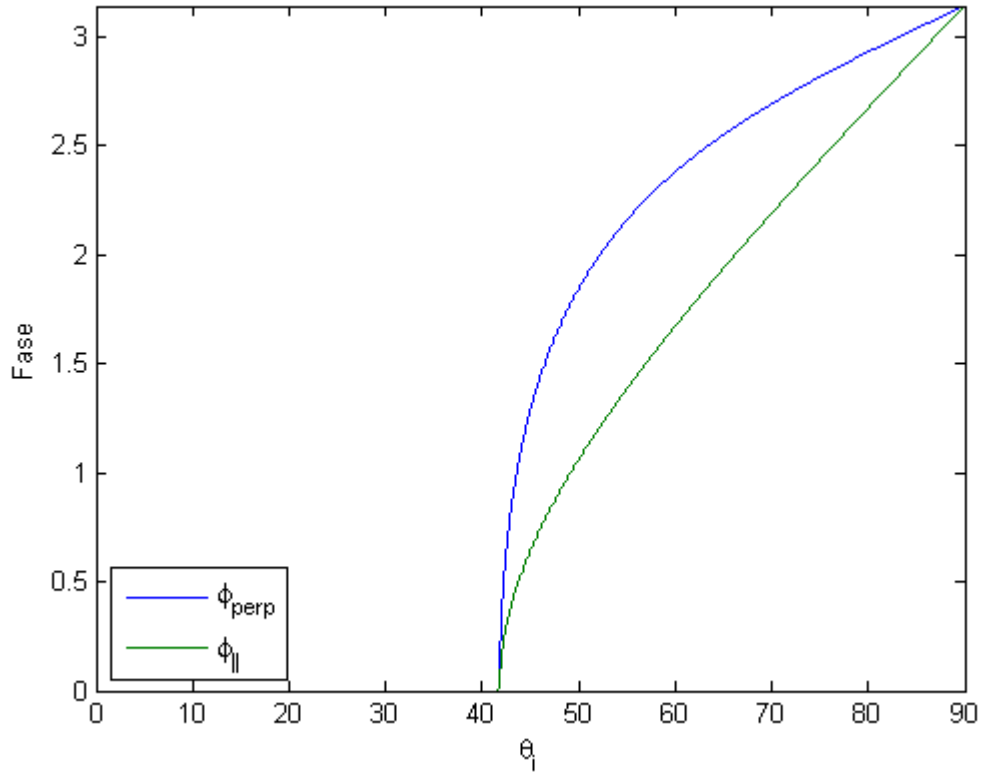


Figura 2.6: Desfasamiento para el caso paralelo y perpendicular como función del ángulo de incidencia, en donde $n_i > n_t$.

Usando las expresiones anteriores podemos ver el comportamiento del desfasamiento para la reflexión interna (figura 2.6).

2.1.3. Ecuaciones de Fresnel en un metal

En esta sección se realizará el análisis para metales, donde el índice de refracción es un número complejo. Para el caso de incidencia normal $\theta_i = 0$ la reflectancia viene dado por:

$$R = \left[\frac{(1 - n)^2 + (n\kappa)^2}{(1 + n)^2 + (n\kappa)^2} \right]. \quad (2.37)$$

Se observa que para medios no absorbentes ($\kappa = 0$), entonces la ecuación 2.37 se reduce a los resultados bien conocidos para dieléctricos. También se observa que para esta condición y para $n = 1$ la reflectividad es cero, como cabría esperar. En la figura 2.7 se muestra las curvas de la reflectancia en función de la absorbancia κ , donde se utilizaron datos de la tabla 2.1. Vemos que para los medios absorbentes con el aumento del coeficiente κ la reflectancia se acerca a la unidad [24, 25].

La reflectancia R_s y R_p se define como:

$$R_s = \left[\frac{(1 - \cos\theta_i)^2 + (n\kappa)^2}{(1 + \cos\theta_i)^2 + (n\kappa)^2} \right] \quad (2.38)$$

y

$$R_p = \left[\frac{(1 - \frac{1}{\cos\theta_i})^2 + (n\kappa)^2}{(1 + \frac{1}{\cos\theta_i})^2 + (n\kappa)^2} \right]. \quad (2.39)$$

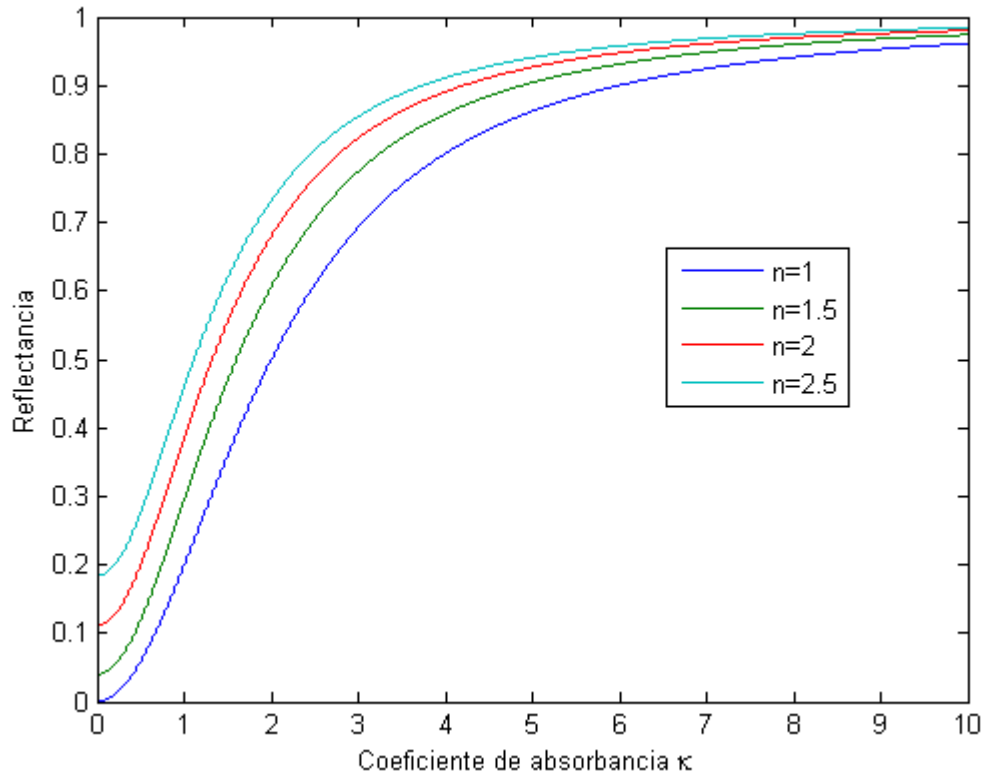


Figura 2.7: Curvas de reflectancia en función del coeficiente de absorción κ [25].

Tabla 2.1: Parámetros ópticos de los metales estudiados [24].

Metal	n	κ
Oro	0.36	7.70
Plata	0.18	20.2
Cobre	0.64	4.08
Platino	2.06	2.06

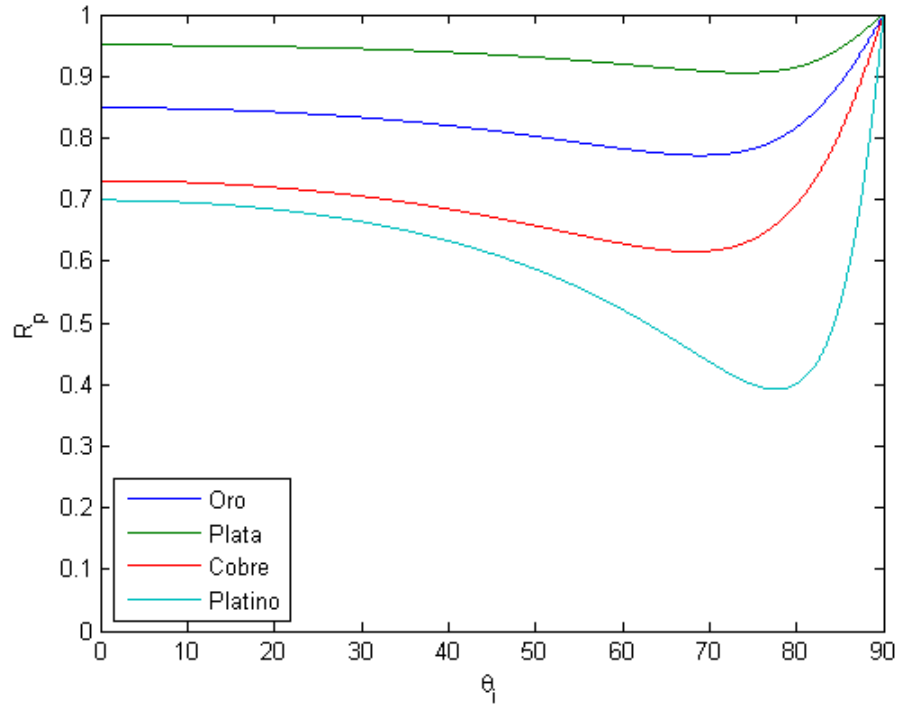


Figura 2.8: Curvas de reflectancia con polarización p para cuatro diferentes materiales absorbentes (metales) [24].

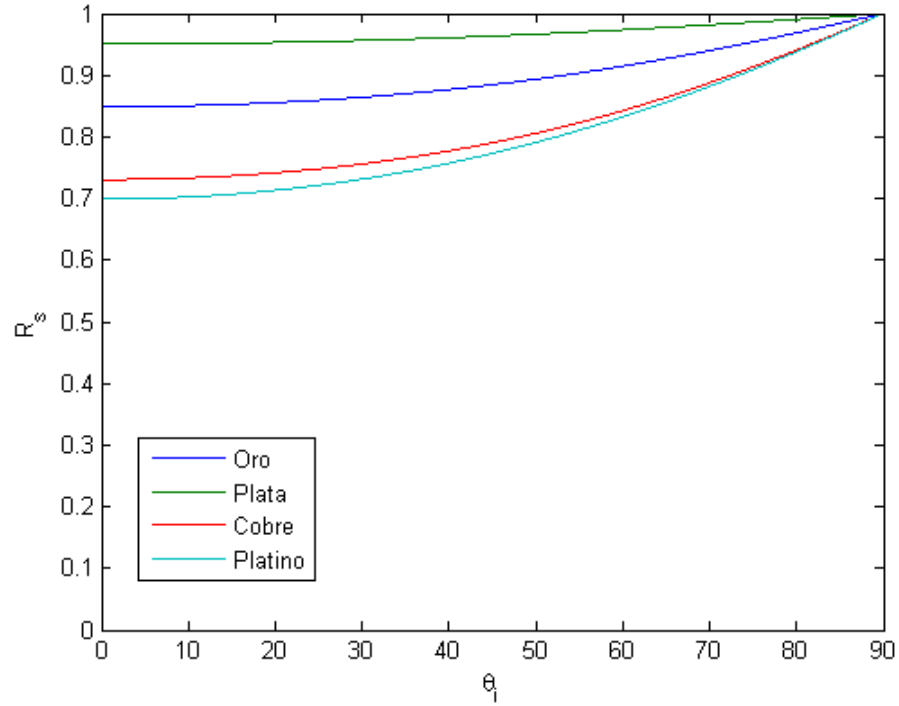


Figura 2.9: Curvas de reflectancia con polarización s para cuatro diferentes materiales absorbentes (metales) [24].

En las figuras 2.8 y 2.9 se muestran gráficas para la reflectividad en función del ángulo de incidencia del oro (Au), plata (Ag), cobre (Cu) y platino (Pt), en el caso de la reflectividad p se observa que tiene un valor mínimo. Este mínimo se denomina el pseudo-ángulo de Brewster, se dice que es “mínimo” porque, a diferencia del ángulo de Brewster para los dieléctricos, la intensidad no va a cero para los metales. En la figura 2.10 se muestra el desfase que existe en una interfase aire-oro.

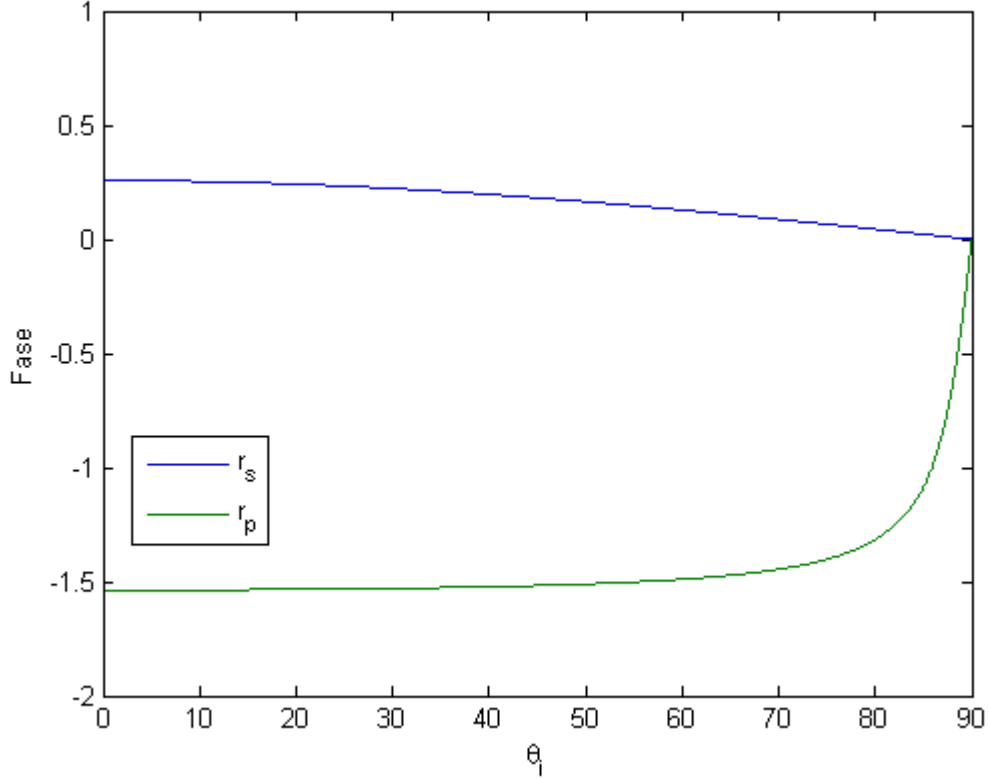


Figura 2.10: Curvas de cambio de fase de la onda de la interfaz aire-oro.

Puesto que la idea es estudiar las propiedades ópticas de los metales, el modelo clásico más simple que nos proporciona una base para el estudio de los plasmones es el modelo de Drude. Este modelo establece los fundamentos físicos para el análisis en metales. En la sección siguiente se realizará la descripción general del modelo de Drude y para tal fin, se empezará a analizar el comportamiento de un electrón sujeto a un campo eléctrico descrito como un oscilador armónico simple propuesto por el modelo de Lorentz.

2.2. Modelo Oscilador de Lorentz

El oscilador armónico simple es el caso más sencillo, donde solamente se considera una fuerza restablecedora. Las fuerzas que gobiernan el movimiento de la masa son sólo la Ley de Newton y la Ley de Hooke. Poniendo ambos juntos, se obtiene la ecuación para el desplazamiento de la masa con respecto al tiempo desde la posición de equilibrio. Esto se describe con la ley de Hooke: $F(x) = -kx$, donde k es la constante del resorte y x es el desplazamiento desde la posición de equilibrio y usando la segunda ley de Newton [26].

Ahora incluyendo una fuerza externa y una fuerza de amortiguación. El tipo más simple de amortiguación, que se puede tener es linealmente proporcional a la velocidad de la masa (m), siendo la fuerza de la forma $F_{amort} = -m\gamma \frac{dx}{dt}$, donde γ es una constante de amortiguamiento. La fuerza motriz puede ser de cualquier tipo, dependiente o independiente del tiempo y el desplazamiento. Recogiendo todos los términos, en el lado izquierdo todavía tenemos la segunda Ley de Newton, y en el lado derecho tenemos la contribución sumada de todas las fuerzas dada por:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = F_{Ext} + F_{rest} + F_{amort} = F_{ext} - m\gamma \frac{dx}{dt} - m\omega_0^2 x. \quad (2.40)$$

Reordenando la ecuación anterior tenemos:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} + m\gamma \frac{dx}{dt} + m\omega_0^2 x = F_{ext}. \quad (2.41)$$

Si se asume que el núcleo del átomo es mucho más masivo que el electrón, podemos tratar el problema como si el sistema de muelles de electrones estuviera conectado a una masa finita que no se mueve, como se muestra en la figura 2.11 lo que nos permite usar la masa del electrón, $m = 9,11 \times 10^{-31} \text{kg}$. La suposición de que la fuerza de unión se comporta como un resorte es una aproximación justa para cualquier tipo de unión, dado que el desplazamiento es suficientemente pequeño (solo los términos constantes y lineales en la expansión de Taylor son relevantes). El término “amortiguación” en este caso proviene de colisiones internas en el sólido y radiación emitida por el electrón.

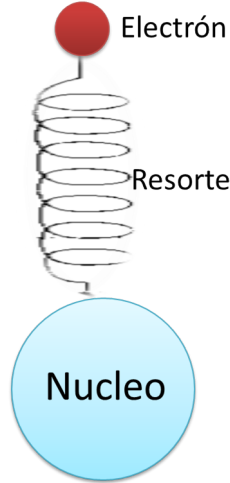


Figura 2.11: Sistema de muelles de electrones [26].

Todo lo que queda para completar la ecuación del oscilador de Lorentz es determinar la fuerza motriz (externa). En el caso de un sólido colocado en un campo eléctrico que varía en el tiempo con la frecuencia angular ω pero independiente del desplazamiento en la dirección x , se obtiene

$$\vec{E}_x(x, \omega) = \vec{E}_{0x}(\omega) \cos(\omega t) = \text{Re}(\vec{E}(\omega) e^{-i\omega t}). \quad (2.42)$$

Con $\vec{E}_{0x}(\omega)$ real e independiente del tiempo, cuando una partícula cargada está en una región donde hay un campo eléctrico experimenta una fuerza igual al producto de su carga por la intensidad del campo eléctrico

$$\vec{F}_{ext} = -e\vec{E}_x. \quad (2.43)$$

Escribiendo la polarización $\vec{P}$ de la siguiente forma

$$\vec{P} = N\delta\vec{x} = Nq(-\vec{x}) = -Nq\vec{x}. \quad (2.44)$$

El vector de polarización es la densidad por volumen de los momentos dipolares, que a su vez se definen simplemente como el producto de la carga y el vector de desplazamiento de la carga negativa a la positiva, es decir, del electrón al núcleo. Se está usando q como la notación para la carga elemental (e), el valor absoluto de la carga del electrón ($e = 1,6 \times 10^{-19}C$).

Obsérvese el signo negativo en la definición, el vector de desplazamiento del sistema de masa de resorte se tomó para señalar al final del resorte (donde se encuentra el electrón). Para mantener la convención de signos, el desplazamiento de dipolo es el opuesto del resorte-desplazamiento de masa,

$$\vec{P} = \varepsilon_0\chi_e\vec{E}. \quad (2.45)$$

La polarización $\vec{P}$ de un material está relacionada con el campo eléctrico aplicado por esta cantidad que llamamos susceptibilidad eléctrica χ_e del material. La aplicación de un campo eléctrico a una amplia gama de materiales hará que los electrones en el material sean desplazados, creando múltiples dipolos de carga positiva/negativa. Cuanto más susceptible sea eléctricamente el material, mayor será el desplazamiento y/o mayor será el número de dipolos creados, tal como se da en la primera definición de la polarización.

Al reescribir la ecuación general del oscilador armónico impulsada por el campo eléctrico en términos del vector de polarización eléctrica $\vec{P}$, desde la primera definición (ecuación 2.41) de la polarización anterior, se sustituye $x(t) = \frac{-P(t)}{Ne}$ quedando la siguiente expresión

$$-\frac{m}{Ne} \frac{d^2P}{dt^2} - \frac{m\gamma}{Ne} \frac{dP}{dt} - \frac{m\omega_0^2}{Ne} P = F_{Ext}, \quad (2.46)$$

o bien

$$\frac{d^2P}{dt^2} + \gamma \frac{dP}{dt} + \omega_0^2 P = -\frac{Ne}{m} F_{Ext}. \quad (2.47)$$

Sustituyendo la expresión de F_{Ext} (ecuación 2.43) en la ecuación anterior tenemos:

$$\frac{d^2P}{dt^2} + \gamma \frac{dP}{dt} + \omega_0^2 P = \frac{Ne^2}{m} E_x. \quad (2.48)$$

Muchos de estos efectos tienen lugar colectivamente. Uno de los efectos colectivos más fundamentales de un plasma es la oscilación del plasma. Para facilitar los cálculos se consideró el centro de masas de los núcleos y el centro de masas de los electrones ya que el movimiento individual de electrones y núcleos son muy caóticos, en equilibrio, coinciden.

Sin embargo, cuando se desplazan unos con respecto a otros, surge una fuerza de Coulomb que intenta restaurar su posición, iniciando un comportamiento oscilatorio. La frecuencia a la que estas oscilaciones resuenan se denomina frecuencia de plasma. Un ejemplo de esto es el plasma existe naturalmente en lo que llamamos la ionosfera ($80km \sim 120km$ sobre la superficie de la Tierra). Allí, la luz UV de las moléculas de aire ionizadas por el Sol.

Hay varias maneras de determinar, o de estimar, la frecuencia del plasma. se utilizara el más simple y conveniente. De la ecuación 2.48 se puede definir esta frecuencia como

$$\omega_p^2 = \frac{Ne^2}{m\varepsilon_0}. \quad (2.49)$$

Recordemos nuestra ecuación diferencial para la polarización(2.48);

$$\frac{d^2 P(\omega, t)}{dt^2} + \gamma \frac{dP(\omega, t)}{dt} + \omega_0^2 P(\omega, t) = \frac{Ne^2}{m} E(\omega, t). \quad (2.50)$$

Se puede reescribir la ecuación sustituyendo la frecuencia de plasma de la siguiente manera

$$\frac{d^2 P(\omega, t)}{dt^2} + \gamma \frac{dP(\omega, t)}{dt} + \omega_0^2 P(\omega, t) = \varepsilon_0 \omega_p^2 E(\omega, t) \quad (2.51)$$

Supongamos que la polarización que resuelve esa ecuación también varía sinusoidalmente y es de la forma

$$P(\omega, t) = P(\omega) \cos(\omega t) = \mathbf{Re}(\tilde{P}(\omega) e^{-i\omega t}), \quad (2.52)$$

ahora la ecuación 2.50 nos queda como

$$\frac{d^2 [\tilde{P}(\omega) e^{-i\omega t}]}{dt^2} + \gamma \frac{d[\tilde{P}(\omega) e^{-i\omega t}]}{dt} + \omega_0^2 \tilde{P}(\omega) e^{-i\omega t} = \varepsilon_0 \omega_p^2 E_{0x} e^{-i\omega t}. \quad (2.53)$$

Tomando las derivadas de los términos exponenciales se tiene

$$(i\omega)^2 \tilde{P}(\omega) e^{-i\omega t} - i\gamma \omega \tilde{P}(\omega) e^{-i\omega t} + \omega_0^2 \tilde{P}(\omega) e^{-i\omega t} = \varepsilon_0 \omega_p^2 E_{0x} e^{-i\omega t} \quad (2.54)$$

Donde las exponenciales se anulan, y resolviendo para la polarización compleja se tiene

$$\tilde{P}(\omega) = \frac{\varepsilon_0 \omega_p^2}{(\omega_0^2 - \omega^2) + i\gamma\omega} E_{0x}. \quad (2.55)$$

Ahora se recuerda la segunda definición de polarización ecuación 2.45:

Introduciendo la permitividad relativa, también llamada constante dieléctrica $\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} = 1 + \chi_e$, donde χ_e es susceptibilidad dieléctrica. Se puede reescribir la definición anterior de polarización (ecuación 2.45) como

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} - 1 \right) \vec{E}. \quad (2.56)$$

Haciendo una ligera modificación para acomodar nuestro complejo resultado, se sustituye el número complejo en lugar de un número real de ε , quedando como

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \left(\frac{\tilde{\varepsilon}}{\varepsilon_0} - 1 \right) \vec{E}_{0x}. \quad (2.57)$$

Esto requiere que χ_e y $P(\omega)$ también sean complejos; de esta forma, podemos llamarlos $\tilde{\chi}_e$ y $\tilde{P}_e$. Combinando esto con el resultado anterior se llega a

$$\frac{\tilde{\varepsilon}}{\varepsilon_0} = 1 - \frac{\omega_p^2}{(\omega_0^2 - \omega^2) + i\gamma\omega}. \quad (2.58)$$

La ecuación anterior muestra que la permitividad depende de la frecuencia del campo eléctrico, además de la frecuencia del plasma y el amortiguamiento (que son propiedades del medio).

Puesto que nuestra permitividad eléctrica es una cantidad compleja, se puede descomponerla en una parte real y una parte imaginaria de la siguiente forma

$$\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} = \varepsilon_r + i\varepsilon_i. \quad (2.59)$$

A partir de esta definición se puede obtener la magnitud y fase de la polarización con respecto al campo eléctrico. Solo se necesita una manipulación algebraica para eliminar el número imaginario del denominador en la ecuación 2.58 quedando de la siguiente forma

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2}, \dots \quad (2.60)$$

y

$$\varepsilon_i(\omega) = \frac{\omega_p^2\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2}. \quad (2.61)$$

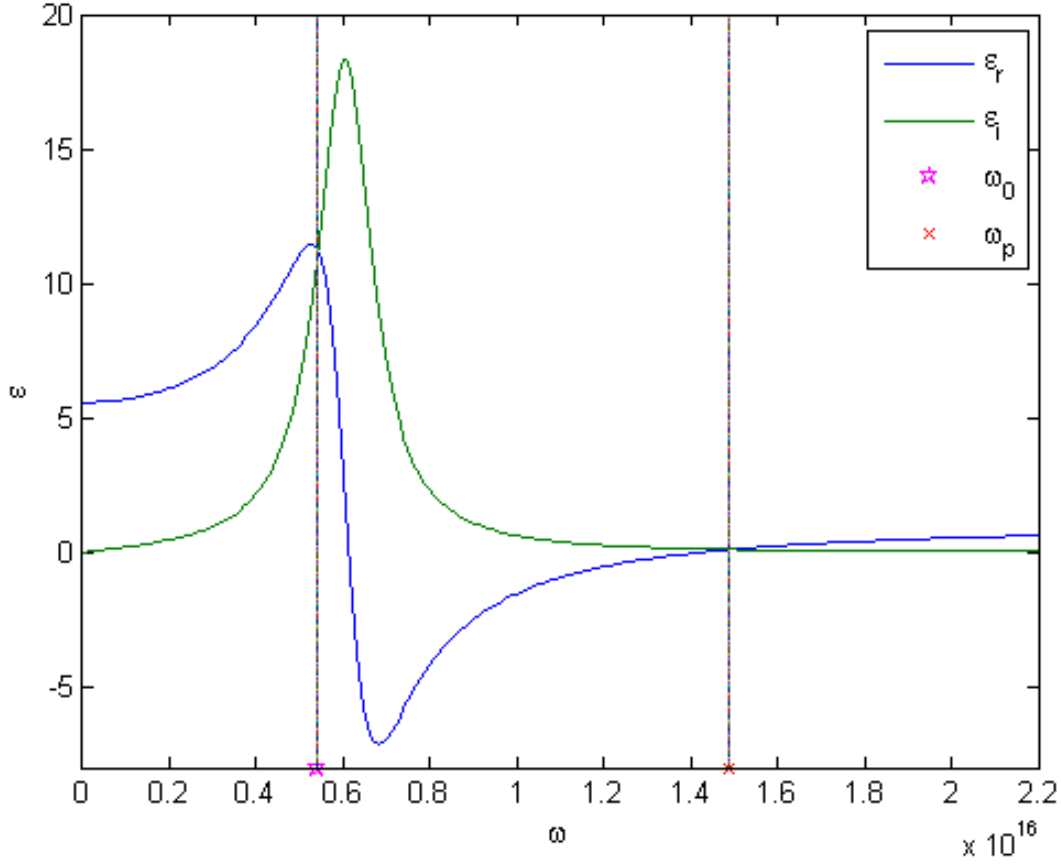


Figura 2.12: Curvas obtenidas para la ionosfera (con $N = 10^{28}$ electrones cm^{-3} , $\omega_p = 1,3 \times 10^{16} rad/s$), $\gamma = 1,519 \times 10^{15} rad/s$ y $\omega_0 = 6,077 \times 10^{15} rad/s$) [26].

En la figura 2.12 se muestran las curvas de la permitividad real e imaginaria. Para frecuencias bajas cercanas a cero, es decir $\omega \approx 0$ la función dieléctrica compleja se aproxima a cero ($\varepsilon_i \approx 0$), para $\omega \approx \omega_0$ la función dieléctrica queda de la forma $\varepsilon_r(\omega_0) - 1 \approx 0$ y en el caso de altas frecuencias $\omega \rightarrow \infty$ puesto que ω muestra hasta la cuarta potencia en el denominador de ambos ε_r y ε_i se desvanecen.

2.3. Modelo de Drude

En un amplio rango de frecuencias, las propiedades ópticas de los metales permite una explicación por un modelo de plasma, donde un gas de electrones libres de densidad numérica n se mueve contra un fondo fijo de núcleos de iones positivos y cuyo modelo teórico es el más simple para estudiar a los metales; este modelo es conocido como el modelo de Drude. En 1900 Paul Drude propuso un modelo para la conducción eléctrica, el resultado de aplicar la teoría cinética de electrones en un sólido. En los metales los electrones no están unidos a los núcleos Entonces este modelo considera a los electrones de conducción de un metal como un gas homogéneo de electrones inmerso en un potencial positivo uniforme impuesto por los iones inmóviles de la red cristalina. Cabe señalar que este modelo no se tiene en cuenta los detalles del potencial de la red y las interacciones electrón-electrón. En su lugar, simplemente se supone que algunos aspectos de la estructura de la banda se incorporan en la masa óptica efectiva de cada electrón. Los electrones oscilan en respuesta al

campo electromagnético aplicado y su movimiento es amortiguado por colisiones que ocurren con una frecuencia de colisión característica $\gamma = \frac{1}{\tau}$, τ se conoce como tiempo de relajación del gas de electrones libre, que es típicamente del orden de 10^{-14} s, a temperatura ambiente, correspondiente a $\gamma = 100$ THz.

Considerando un cambio particular en el modelo de oscilador de Lorentz; en este enlace metálico, si los electrones no están enlazados, entonces no hay análogo de una fuerza de resorte, es decir, $F_{\text{resorte}} = 0$. Por lo tanto la constante de muelle equivalente asociada con él es igual a 0. Lo interesante es que este modelo tan simple permite predecir de manera bastante aceptable la conductividad eléctrica y térmica de los metales, y además predice la existencia de plasmones [26] [27].

Tomando las ecuaciones 2.41 y 2.43 se obtiene

$$-eE - m\gamma \frac{dx}{dt} = m \frac{d^2x}{dt^2}, \quad (2.62)$$

El primer término a la izquierda es la fuerza impulsora y el segundo es la fuerza restablecedora opuesta. Re-ordenando y reescribiendo en términos de polarización por la ecuación 2.44 se tiene

$$-\frac{m}{Ne} \frac{d^2P}{dt^2} = \frac{m\gamma}{Ne} \frac{dP}{dt} - eE. \quad (2.63)$$

Si se asume una dependencia temporal armónica $E(t) = \mathbf{Re}(E(\omega)e^{-i\omega t})$, una solución particular de esta ecuación que describe la oscilación del electrón es $x(t) = \mathbf{Re}(x(\omega)e^{-i\omega t})$. La amplitud compleja $x(\omega)$ incorpora cualquier cambio de fase entre el campo externo lo que lleva a

$$x(t) = -\frac{e}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)} E(t). \quad (2.64)$$

Los electrones desplazados contribuyen a la polarización macroscópica (ecuación 2.44), dada explícitamente por

$$\vec{P} = -\frac{Ne^2}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)} \vec{E}. \quad (2.65)$$

Sustituyendo esta expresión para $\vec{P}$ en la ecuación 2.4a se obtiene

$$\vec{D} = \epsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega} \right) \vec{E} + \vec{P}, \quad (2.66)$$

donde ω_p^2 es la frecuencia de plasma del gas de electrones libres (ecuación 2.49). Por lo tanto, se llega al resultado deseado, la función dieléctrica del gas de electrones libres

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega}, \quad (2.67)$$

donde los componentes real e imaginario de esta función dieléctrica compleja $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_r(\omega) + i\varepsilon_i(\omega)$ están dados por

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2 \tau^2}{1 + \tau^2 \omega^2} \quad (2.68)$$

y

$$\varepsilon_i(\omega) = \frac{\omega_p^2 \tau}{\omega(1 + \tau^2 \omega^2)}. \quad (2.69)$$

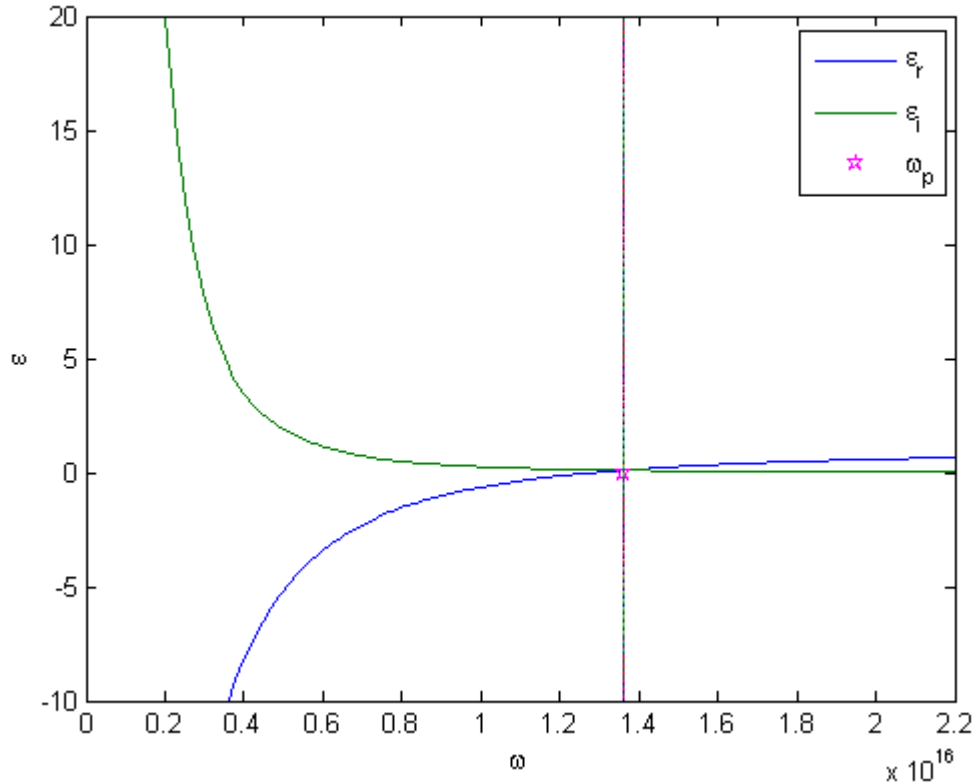


Figura 2.13: Curvas obtenidas experimentalmente para la ionosfera [26].

En la figura 2.13 se muestra las curvas de la permitividad real e imaginaria del modelo de Drude.

De la figura se puede observar que:

- $\omega < \omega_p$. La parte real de la permitividad eléctrica ε es negativa, indicando que la vibración de los electrones está en antifase con la vibración del campo eléctrico; y la reflectividad es grande.
- $\omega > \omega_p$. La permitividad eléctrica ε es positiva, la reflectividad es pequeña y el metal es transparente como un dieléctrico.
- $\omega \approx \omega_p$. Se excitan ondas longitudinales en la superficie del metal llamadas plasmones superficiales.

Capítulo 3

Plasmones

3.1. Teoría

Un plasmón superficial es una onda que se propaga a lo largo de una interfase plana entre un metal y un medio dieléctrico [18]. La naturaleza de los plasmones superficiales radica en la oscilación colectiva de los electrones, caracterizada por la frecuencia de plasma, descrita por el Modelo de Drude. Para determinar las propiedades de los plasmones se aplican las ecuaciones de Maxwell a una interfase plana metal-dieléctrico (figura 3.1).



Figura 3.1: Interfase plana metal-dieléctrico.

De las ecuaciones de Maxwell dada en la sección (2.1.1), tomando las expresiones 2.5c y 2.5d, donde se supone que no hay densidad de carga externa ni densidad de corriente, se tiene:

$$\nabla \times \vec{E} = i\omega\mu_0\vec{H}, \quad (3.1)$$

y

$$\nabla \times \vec{H} = -i\omega\varepsilon_p\vec{E}, \quad (3.2)$$

donde se ha definido una permitividad compleja

$$\varepsilon_p(\vec{r}) = \varepsilon_0\varepsilon_r(\vec{r}) = \varepsilon_0[\varepsilon'_r(\vec{r}) + i\varepsilon''_r(\vec{r})]. \quad (3.3)$$

A su vez se puede demostrar mediante álgebra vectorial la ecuación de onda

$$\nabla^2 \vec{E} - \frac{\varepsilon_p}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0. \quad (3.4)$$

Si se considera al campo eléctrico de la forma $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r})e^{-i\omega t}$ en la ecuación (3.4) se llega a la ecuación de Helmholtz

$$\nabla^2 \vec{E} + k_0^2 \varepsilon_p \vec{E} = 0, \quad (3.5)$$

donde $k_0 = \omega/c$ es el vector de onda en el vacío. Al desarrollar las ecuaciones 3.1 y 3.2, el rotacional es para cualquier campo eléctrico, $\vec{E} = \hat{e}_x \vec{E}_x + \hat{e}_y \vec{E}_y + \hat{e}_z \vec{E}_z$ y campo magnético $\vec{H} = \hat{e}_x \vec{H}_x + \hat{e}_y \vec{H}_y + \hat{e}_z \vec{H}_z$. Al sustituir lo anterior resulta

$$\nabla \times \vec{E} = \begin{vmatrix} \hat{e}_x & \hat{e}_y & \hat{e}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ E_x & E_y & E_z \end{vmatrix} = i\omega\mu_0 (\hat{e}_x \vec{H}_y - \hat{e}_y \vec{H}_x + \hat{e}_z \vec{H}_z),$$

obteniendo lo siguiente

$$\hat{e}_x \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right) - \hat{e}_y \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right) + \hat{e}_z \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) = i\omega\mu_0 (\hat{e}_x H_y + \hat{e}_y H_x + \hat{e}_z H_z).$$

Al separar por componentes resulta

$$H_x = \frac{1}{i\omega\mu_0} \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right), \quad (3.6)$$

$$H_y = \frac{1}{i\omega\mu_0} \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right), \quad (3.7)$$

$$H_z = \frac{1}{i\omega\mu_0} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right). \quad (3.8)$$

Ahora al desarrollar la ecuación 3.2, se tiene

$$\nabla \times \vec{H} = \begin{vmatrix} \hat{e}_x & \hat{e}_y & \hat{e}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ H_x & H_y & H_z \end{vmatrix} = -i\omega\varepsilon_p (\hat{e}_x E_y - \hat{e}_y E_x + \hat{e}_z E_z),$$

desarrollando el determinante, se llega a

$$\hat{e}_x \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right) - \hat{e}_y \left(\frac{\partial H_z}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial z} \right) + \hat{e}_z \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) = -i\omega\varepsilon_p (\hat{e}_x E_y + \hat{e}_y E_x + \hat{e}_z E_z),$$

Por componentes obteniendo

$$E_x = \frac{1}{-i\omega\varepsilon_p} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right),$$

$$E_y = \frac{1}{-i\omega\varepsilon_p} \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right),$$

$$E_z = \frac{1}{-i\omega\varepsilon_p} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right).$$

En resumen, de todos los desarrollos de las ecuaciones de Maxwell se obtiene

$$\begin{aligned}
 E_x &= \frac{1}{-i\omega\varepsilon_p} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right), \\
 E_y &= \frac{1}{-i\omega\varepsilon_p} \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right), \\
 E_z &= \frac{1}{-i\omega\varepsilon_p} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right), \\
 H_x &= \frac{1}{i\omega\mu_0} \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right), \\
 H_y &= \frac{1}{i\omega\mu_0} \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right), \\
 H_z &= \frac{1}{i\omega\mu_0} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right),
 \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} &= 0, \\
 \frac{\partial B_x}{\partial x} + \frac{\partial B_y}{\partial y} + \frac{\partial B_z}{\partial z} &= 0.
 \end{aligned}$$

Estas ecuaciones se deben resolver con las condiciones de frontera del problema definidas para cada caso. Para analizar la propagación del campo en una dimensión, se supone que la permitividad eléctrica ε depende sólo de una coordenada espacial. Donde la onda viaja en la dirección x sin variación perpendicular en el plano y , tal que para el plano $z = 0$ el campo eléctrico se puede describir de la forma $E(x, z) = E(z)e^{i\beta x}$, como se muestra en la figura 3.1. Definiendo a $\beta = k_x$ la constante de propagación de la onda viajera, que corresponde a la componente del vector de onda en la dirección de propagación. Para ondas planas se cumple $\partial/\partial t = -i\omega$ y además por la propagación sólo en x , $\partial/\partial x = i\beta$ y $\partial/\partial y = 0$, se puede llegar a las siguientes ecuaciones:

$$\frac{\partial E_y}{\partial z} = -i\omega\mu_0 H_x, \quad (3.9a)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - i\beta E_z = i\omega\mu_0 H_y, \quad (3.9b)$$

$$i\beta E_y = i\omega\mu_0 H_z, \quad (3.9c)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial z} = i\omega\varepsilon_p E_x, \quad (3.9d)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - i\beta H_z = -i\omega\varepsilon_p E_y, \quad (3.9e)$$

$$i\beta H_y = -i\omega\varepsilon_p E_z. \quad (3.9f)$$

Este sistema de ecuaciones para componentes E_x , E_z y H_y diferentes de cero; es decir, para modos transversales magnéticos (TM) se reduce a

$$E_x = -i \frac{1}{\omega \varepsilon_p} \frac{\partial H_y}{\partial z}, \quad (3.10a)$$

$$E_z = -\frac{\beta}{\omega \varepsilon_p} H_y. \quad (3.10b)$$

Para modos transversales eléctricos (TE), es decir con H_x , H_z y E_y distintos de cero, se obtiene

$$H_x = \frac{i}{\omega \mu_0} \frac{\partial E_y}{\partial z}, \quad (3.11a)$$

$$H_z = \frac{\beta}{\omega \mu_0} E_y. \quad (3.11b)$$

Suponiendo que para la interfase plana metal-dieléctrico en $z > 0$ está presente el dieléctrico de permitividad eléctrica real ε_2 , y para $z < 0$ se tiene un material metálico con permitividad eléctrica ε_1 (figura 3.1), se puede definir a $H_y(z) = A_2 e^{i\beta x} e^{-k_2 z}$. Para $z > 0$, las ecuaciones (3.10) se reescriben como

$$E_x = i A_2 \frac{1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_2} k_2 e^{i\beta x} e^{-k_2 z}, \quad (3.12)$$

$$E_z = -A_2 \frac{\beta}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_2} e^{i\beta x} e^{-k_2 z}. \quad (3.13)$$

Para $z < 0$, $H_y(z) = A_1 e^{i\beta x} e^{k_1 z}$, se obtiene también

$$E_x = -i A_1 \frac{1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_1} k_1 e^{i\beta x} e^{-k_1 z}, \quad (3.14)$$

$$E_z = -A_1 \frac{\beta}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_1} e^{i\beta x} e^{-k_1 z}, \quad (3.15)$$

donde $k_1 = k_{z1}$ y $k_2 = k_{z2}$ son las componentes del vector de onda perpendicular a la interfase.

Para que se cumpla la condición de continuidad de H_y y $\varepsilon_i E_z$ ($i = 1, 2$) en la interfase, debe suceder que $A_1 = A_2$. Utilizando $\nabla \times \vec{H} = \partial \vec{D} / \partial t$ junto con la ecuación 3.12 se llega a las siguientes expresiones

$$k_1 H_{y1} = \varepsilon_1 E_{x1}, \quad (3.16)$$

$$k_2 H_{y2} = -\varepsilon_2 E_{x2}. \quad (3.17)$$

Despejando E_{xi} ($i = 1, 2$) y por las condiciones de continuidad: $E_{x1} = E_{x2}$ y $H_{y1} = H_{y2}$ se obtiene la relación

$$\frac{k_{z1}}{\varepsilon_1} + \frac{k_{z2}}{\varepsilon_2} = 0. \quad (3.18)$$

La expresión de H_y tiene que además satisfacer la ecuación de onda para TM, obteniendo lo siguiente:

$$\frac{\partial^2 H_y}{\partial z^2} + (k_0^2 \varepsilon + \beta^2) H_y = 0, \quad (3.19)$$

produciendo

$$k_{z1} = \beta^2 + k_0^2 \varepsilon_1, \quad (3.20a)$$

$$k_{z2} = \beta^2 + k_0^2 \varepsilon_2. \quad (3.20b)$$

Combinando las ecuaciones (3.18) y 3.20 se llega a la *relación de dispersión de los plasmones que se propagan en una interfase* entre los dos medios. La relación de dispersión conecta la longitud de onda con el vector de onda, su frecuencia y se expresa de la siguiente manera:

$$\beta = k_0 \left(\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \right)^{1/2} \quad (3.21)$$

o

$$k^2 = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}. \quad (3.22)$$

Utilizando la ecuación anterior, se pueden obtener las curvas de dispersión. En la figura 3.2 se observa que para valores bajos de k_x , la relación de dispersión es lineal. A medida que k_x aumenta, la relación de dispersión se va curvando hasta alcanzar un valor límite llamado “frecuencia de plasma superficial”.

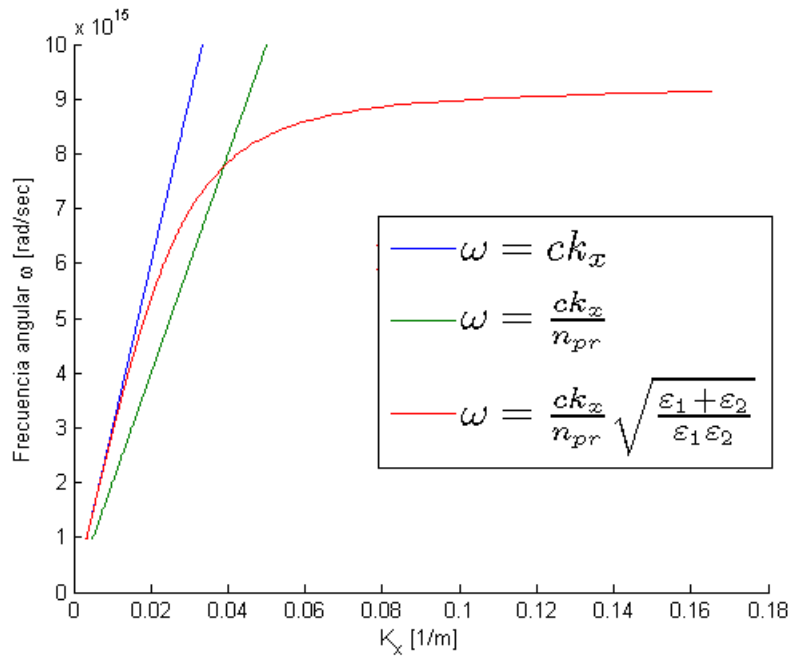


Figura 3.2: Las curvas de la relación de dispersión para SP (línea roja), luz en el aire (línea azul) y luz en un medio dieléctrico (línea verde) [26].

Se observa que la curva de dispersión del plasmón superficial cruza con la línea recta (verde) que pasa por un medio dieléctrico con un índice de refracción n_{pr} (prisma). Sin embargo, la curva de dispersión del plasmón superficial no cruza con la línea recta (azul) del aire. Por lo tanto, los SP no pueden ser excitados directamente por la luz que se propaga del aire a un medio metálico.

Análogamente para modos TE se puede definir un campo de la forma $E_y(z) = A_2 e^{i\beta x} e^{-k_2 z}$.

Para $z > 0$, las ecuaciones de los modos TE se reescriben como

$$H_x = -iA_2 \frac{1}{\omega\mu} k_2 e^{i\beta x} e^{-k_2 z}, \quad (3.23)$$

$$H_z = A_2 \frac{\beta}{\omega\mu} e^{i\beta x} e^{-k_2 z}. \quad (3.24)$$

Para $z < 0$, $E_y(z) = A_1 e^{i\beta x} e^{k_1 z}$, se obtiene también

$$H_x = iA_1 \frac{1}{\omega\mu} k_1 e^{i\beta x} e^{-k_1 z}, \quad (3.25)$$

$$H_z = A_1 \frac{\beta}{\omega\mu} e^{i\beta x} e^{-k_1 z}, \quad (3.26)$$

Aplicando la ecuación de continuidad, se obtiene que

$$E_{1y} = E_{2y} = A_1 e^{i\beta x} e^{-k_1 z} = A_2 e^{i\beta x} e^{-k_2 z} \quad (3.27)$$

para $z = 0$ resulta

$$A_1 = A_2 \quad (3.28)$$

ademas

$$H_{2x} = E_{1x} = -iA_2 \frac{1}{\omega\mu} k_2 e^{i\beta x} e^{-k_2 z} = iA_1 \frac{1}{\omega\mu} k_1 e^{i\beta x} e^{-k_1 z} \quad (3.29)$$

donde se se obtiene lo siguiente

$$A_1(k_1 + k_2) = 0, \quad (3.30)$$

$$A_2(k_1 + k_2) = 0 \quad (3.31)$$

dado que se busca $k_1 \neq k_2$, entonces se deduce que $A_1 = A_2 = 0$. Esto indica que no pueden existir Plasmones Superficiales en Modos TE, por tanto solo pueden existir los SP para modos TM (E_x , E_z y $H_y \neq 0$, figura 3.3).

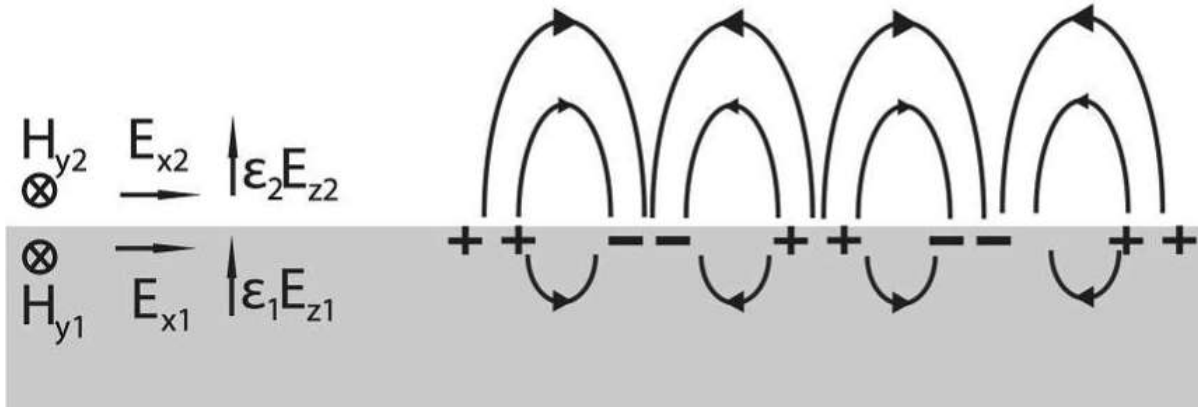


Figura 3.3: Plasmón superficial formado en una interfase metal-dieléctrico.

3.2. Modelo multicapas

En esta sección se hablará de los modelos ópticos de Kretschmann empezando por el modelo de 3 capas para facilitar la comprensión del modelo de N capas. En la actualidad existen instrumentos SPR que puede describirse mediante una simple configuración basada en prismas. Las dos configuraciones básicas son descritas por Kretschmann-Raether y Otto [10], [9]. El arreglo óptico de Kretschmann-Raether (figura 3.4), se coloca una muestra en contacto con una fina película de metal depositada sobre un prisma de alto índice de refracción. Un haz de luz incidente sobre la película metálica (lado de prisma) con un ángulo incidente mayor que el ángulo crítico en el cual una onda evanescente resultante emerge de la película metálica en el lado de la muestra.

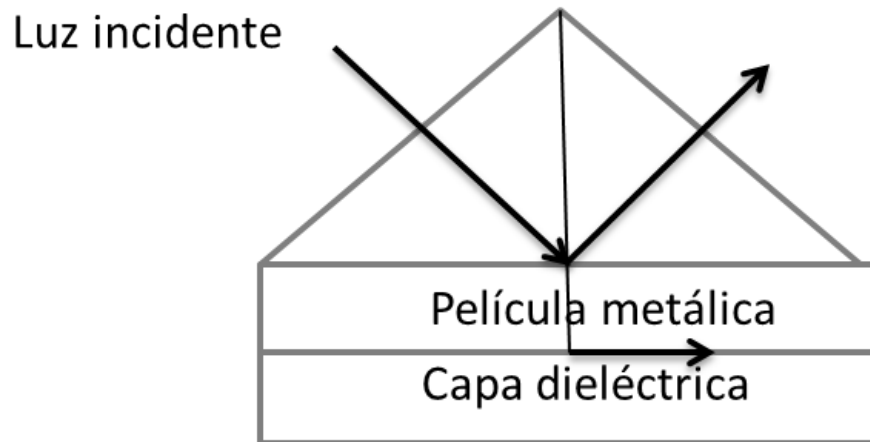


Figura 3.4: Arreglo óptico de Kretschmann-Reather [28].

Cuando el número de onda de la onda evanescente coincide con el del plasmón superficial en el límite de la muestra de metal, el plasmón superficial es excitado resonantemente por la onda evanescente. El número de onda del plasmón de superficie depende del índice de refracción como puede determinarse observando la condición de SPR. Dado que el índice de refracción depende de la concentración de las especies contenidas en la muestra, es posible el análisis cuantitativo basado en el índice de refracción.

En la práctica, la distribución angular de la reflectancia en la frontera prisma-metal, se mide variando el ángulo de incidencia (θ). Como el número de onda de la onda evanescente varía con los cambios en θ , hay un ángulo en el que el número de onda de la onda evanescente y el del plasmón superficial están en resonancia.

Cuando un plasmón superficial es excitado por la onda evanescente, una fracción de la energía de la onda evanescente es absorbida por el plasmón superficial. Así la energía reflejada en el prisma disminuye a valores cercanos a cero. En consecuencia, se observa una zona de mayor absorción debido a la excitación del plasmón de superficie en las curvas $R - \theta$. La concentración de una especie química se puede determinar desde la posición de la caída de la reflectancia. La precisión con que se puede determinar esto desempeña un papel importante en lo que se refiere a la cuestión de la falsa detección.

La excitación del plasmón de superficie por la luz basada en el método del acoplador de reflexión total atenuada (ATR) ha sido tratada en detalle por Yamamoto [23]. Las componentes x y z del vector de onda en el prisma están dadas por:

$$K_x^{pr} = \sqrt{\varepsilon_{pr}} \frac{\omega}{c} \sin \theta_{pr} = n_{pr} \frac{\omega}{c} \sin \theta_{pr}, \quad (3.32)$$

y

$$K_z^{pr} = \sqrt{\varepsilon_{pr}} \frac{\omega}{c} \sin \theta_{pr} = n_{pr} \frac{\omega}{c} \sin \theta_{pr}. \quad (3.33)$$

La condición de resonancia de la luz en el prisma (pr) con el plasmón de superficie (sp) en la interfase metal-aire (configuración de Kretschman) es

$$K_x^{pr} = K_x^{sp}, \quad (3.34)$$

es decir

$$\sqrt{\varepsilon_{pr}} \frac{\omega}{c} \sin \theta_{pr} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}}. \quad (3.35)$$

Sobre la base de estas relaciones básicas, consideraremos un sistema de 3 capas, 4 capas y generalizando a N-capas.

3.2.1. Modelo de 3 capas

La reflectividad r_{pr12} puede ser dada por las ecuaciones de Fresnel del sistema de prisma-metal (capa de aire) [28] [29]. La reflexión total del modelo de tres capas para la polarización p está dada por:

$$R = |r_{pr12}^p|^2 = \left| \frac{r_{pr1}^p + r_{12}^p e^{2ikz_1 d_1}}{1 + r_{pr1}^p r_{12}^p e^{2ikz_1 d_1}} \right|^2, \quad (3.36)$$

donde

$$r_{ik}^p = \frac{n_k \cos \theta_i - n_i \cos \theta_k}{n_k \cos \theta_i + n_i \cos \theta_k}, \quad (3.37)$$

$$r_{12}^p = \frac{\left[\sqrt{\varepsilon_1 - n_{pr}^2 \frac{\sin^2 \theta_i}{\varepsilon_1}} - \sqrt{n_2^2 - n_{pr}^2 \frac{\sin^2 \theta_{pr}}{n_2^2}} \right]}{\left[\sqrt{\varepsilon_1 - n_{pr}^2 \frac{\sin^2 \theta_i}{\varepsilon_1}} + \sqrt{n_2^2 - n_{pr}^2 \frac{\sin^2 \theta_{pr}}{n_2^2}} \right]}, \quad (3.38)$$

$$Factor\ de\ fase = kz_1 d_1 = k_1 d_1 \cos \theta_1 = \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right) d_1 \sqrt{\varepsilon_1 - n_{pr}^2 \sin^2 \theta_{pr}}. \quad (3.39)$$

3.2.2. Modelo de 4 capas

Se describe un sistema de cuatro capas (figura 3.5) en el que se añade una capa dieléctrica adicional entre el prisma y el metal de la geometría convencional de Krestchmann.

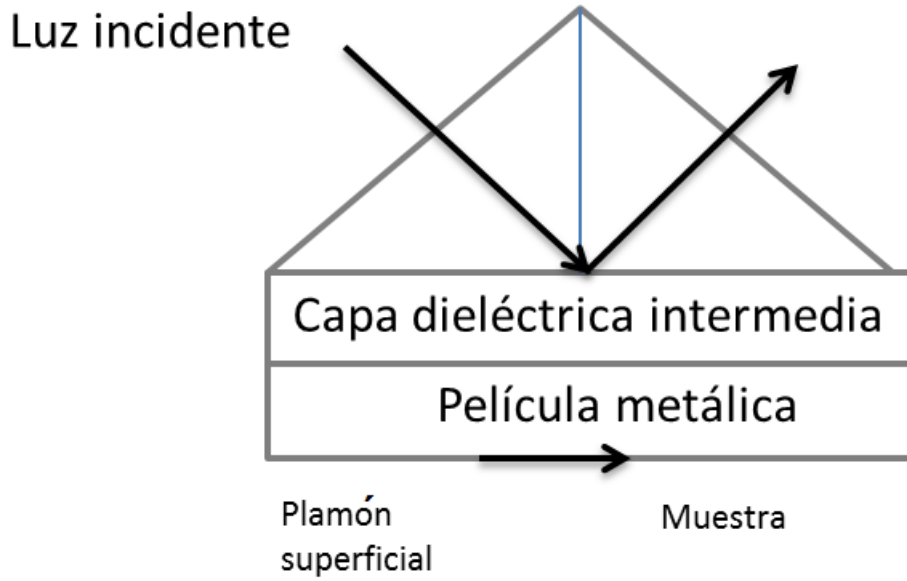


Figura 3.5: Arreglo óptico de Kretschmann-Reather para 4 capas [30].

Para la capa del prisma inicial,

$$q_0 = \frac{\cos \theta_{pr}}{n_{pr}}, \quad (3.40)$$

y para la capa dieléctrica intermedia,

$$q_1 = \sqrt{\frac{(\varepsilon_1 - n_{pr}^2 \sin^2 \theta_{pr})}{\varepsilon_1}}, \quad (3.41)$$

$$\beta_1 = \frac{2\pi}{\lambda} d_1 \sqrt{(\varepsilon_1 - n_{pr}^2 \sin^2 \theta_{pr})}, \quad (3.42)$$

$$M_1 = \begin{pmatrix} \cos \beta_1 & -i \frac{\sin \beta_1}{q_1} \\ -i q_1 \sin \beta_1 & \cos \beta_1 \end{pmatrix}. \quad (3.43)$$

Usando la ley de Snell

$$n_{pr} \sin \theta_{pr} = n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2 \quad (3.44)$$

y

$$\cos \theta_2 = \sqrt{\frac{(n_2^2 - n_{pr}^2 \sin^2 \theta_{pr})}{n_2}}. \quad (3.45)$$

Para la capa metálica

$$q_2 = \sqrt{\frac{(n_2^2 - n_{pr}^2 \sin^2 \theta_{pr})}{n_2^2}}, \quad (3.46)$$

$$\beta_2 = \frac{2\pi}{\lambda} d_2 \sqrt{(n_2^2 - n_{pr}^2 \sin^2 \theta_{pr})} \quad (3.47)$$

y

$$M_2 = \begin{pmatrix} \cos \beta_2 & -i \frac{\sin \beta_2}{q_2} \\ -i q_2 \sin \beta_2 & \cos \beta_2 \end{pmatrix}. \quad (3.48)$$

La matriz característica M de las capas delgadas planas está dada por

$$M = M_1 * M_2 = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}, \quad (3.49)$$

y donde sus elementos son

$$M_{11} = \cos \beta_1 \cos \beta_2 - \left(\frac{q_2}{q_1} \right) \sin \beta_1 \sin \beta_2, \quad (3.50)$$

$$M_{12} = -i \left(\frac{\cos \beta_1 \sin \beta_2}{q_2} + \frac{\sin \beta_1 \cos \beta_2}{q_1} \right), \quad (3.51)$$

$$M_{12} = -i (\cos \beta_1 \sin \beta_2 q_2 + \sin \beta_1 \cos \beta_2 q_1) \quad (3.52)$$

y

$$M_{22} = \cos \beta_1 \cos \beta_2 - \left(\frac{q_1}{q_2} \right) \sin \beta_1 \sin \beta_2. \quad (3.53)$$

Para la capa de la muestra

$$q_3 = \sqrt{\frac{(n_3^2 - n_{pr}^2 \sin^2 \theta_{pr})}{n_3}}. \quad (3.54)$$

Los coeficientes de Fresnel de la última capa en términos de los parámetros de las capas interiores son calculados con la ecuación

$$r^p = \frac{(M_{11} + M_{12} q_3) q_0 - (M_{21} + M_{22} q_3)}{(M_{11} + M_{12} q_3) q_0 + (M_{21} + M_{22} q_3)}, \quad (3.55)$$

donde

$$R = |r^p|^2. \quad (3.56)$$

3.2.3. Modelo de N capas

Esto se puede generalizar para un modelo de N capas [31], utilizando la matriz característica para la polarización p para la k -ésima capa dada por

$$M_k = \begin{pmatrix} \cos \beta_k & -i \frac{\sin \beta_k}{q_k} \\ -i q_k \sin \beta_k & \cos \beta_k \end{pmatrix}, \quad (3.57)$$

donde

$$q_k = \sqrt{\left(\frac{\mu_k}{\varepsilon_k}\right)} \cos \theta_k, \quad (3.58)$$

y con $\mu_k = 1$. La ecuación anterior se escribe como

$$q_k = \sqrt{\left(\frac{\mu_k}{\varepsilon_k}\right)} \cos \theta_k = \sqrt{\frac{(\varepsilon_k - n_1^2 \sin^2 \theta_1)}{\varepsilon_k}}, \quad (3.59)$$

y

$$\beta_k = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) n_k \cos \theta_k (z_k - z_{k-1}) = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) (z_k - z_{k-1}) \sqrt{(\varepsilon_k - n_1^2 \sin^2 \theta_1)}. \quad (3.60)$$

El coeficiente de reflexión para la onda p (TM) está dado por

$$r^p = \frac{(M_{11} + M_{12}q_N)q_1 - (M_{21} + M_{22}q_N)}{(M_{11} + M_{12}q_N)q_0 + (M_{21} + M_{22}q_N)}, \quad (3.61)$$

donde

$$M_{ij} = \left(\prod_{k=2}^{N-1} M_k \right)_{ij}, \quad i, j = 1, 2. \quad (3.62)$$

Capítulo 4

Modelación

Las curvas SPR se han simulado para la geometría de Kretschmann para la estructura multicapa usando las fórmulas de Fresnel y la teoría de la reflexión múltiple, la interfase vidrio-metal se ilumina con el haz de láser en condiciones de reflexión total. En estas condiciones, el campo evanescente de la luz incidente se propaga a través de la película metálica que busca la interfase metal-dieléctrico. Para un cierto ángulo de incidencia, la relación de dispersión es coincidente con la de los SP y estos son excitados. De esta manera, se puede medir la reflectividad frente al ángulo incidente, obteniéndose las curvas SPR. Para tal propósito, se han tomado datos reportados en la referencia [8] .

Se implementó un algoritmo en MATLAB para generar las curvas para el caso de 3 y 4 capas usando distintos índices de refracción. En la figura 4.1 se muestra un arreglo de 3 capas donde se observa la distribución angular de la reflectancia de una película metálica delgada de oro en contacto con la muestra (en este caso aire). Se observa una caída abrupta de la reflectancia, debido a la excitación de SPR. Este descenso se encuentra en el rango comprendido entre $36,5^\circ$ a $37,5^\circ$. Esta caída es producto de la interferencia destructiva en la interfase oro-aire, consecuencia directa de la excitación de un SPR en esta misma frontera y la radiación incidente en la interfase prisma-oro. El índice de refracción de la muestra puede determinarse por el ángulo de caída, y de esta forma la muestra puede ser identificada por el ángulo SPR.

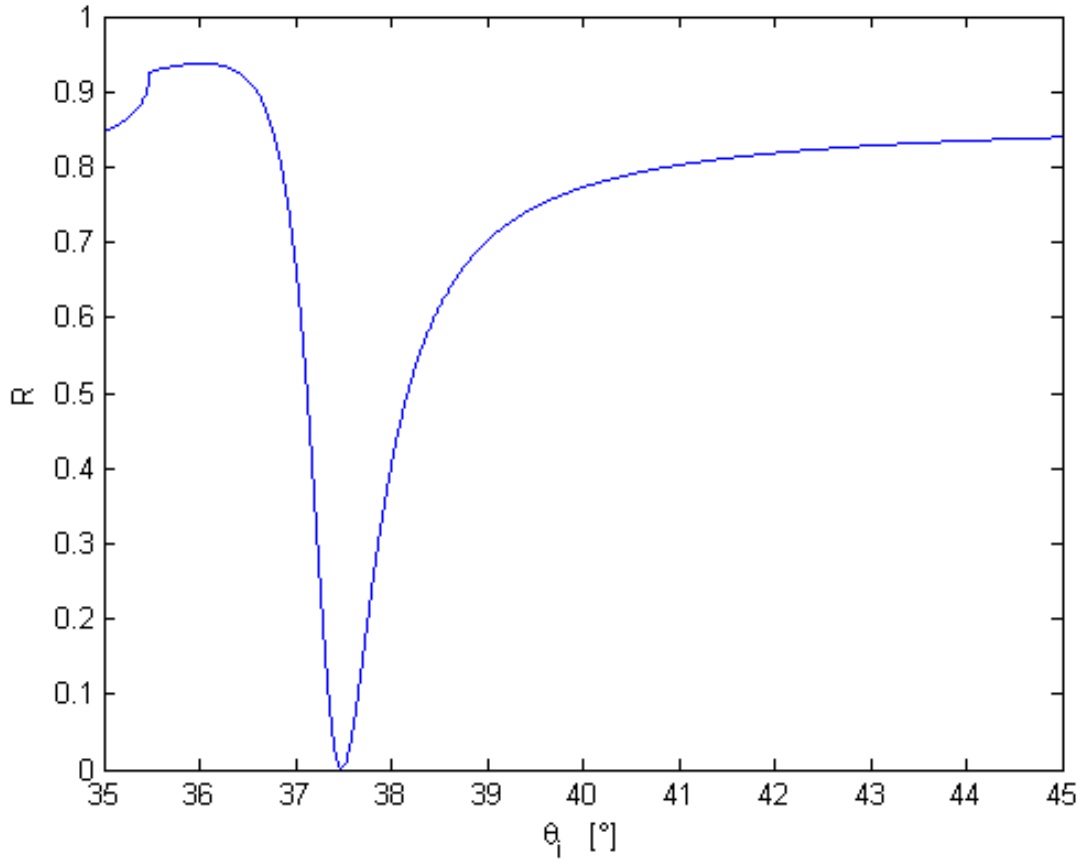


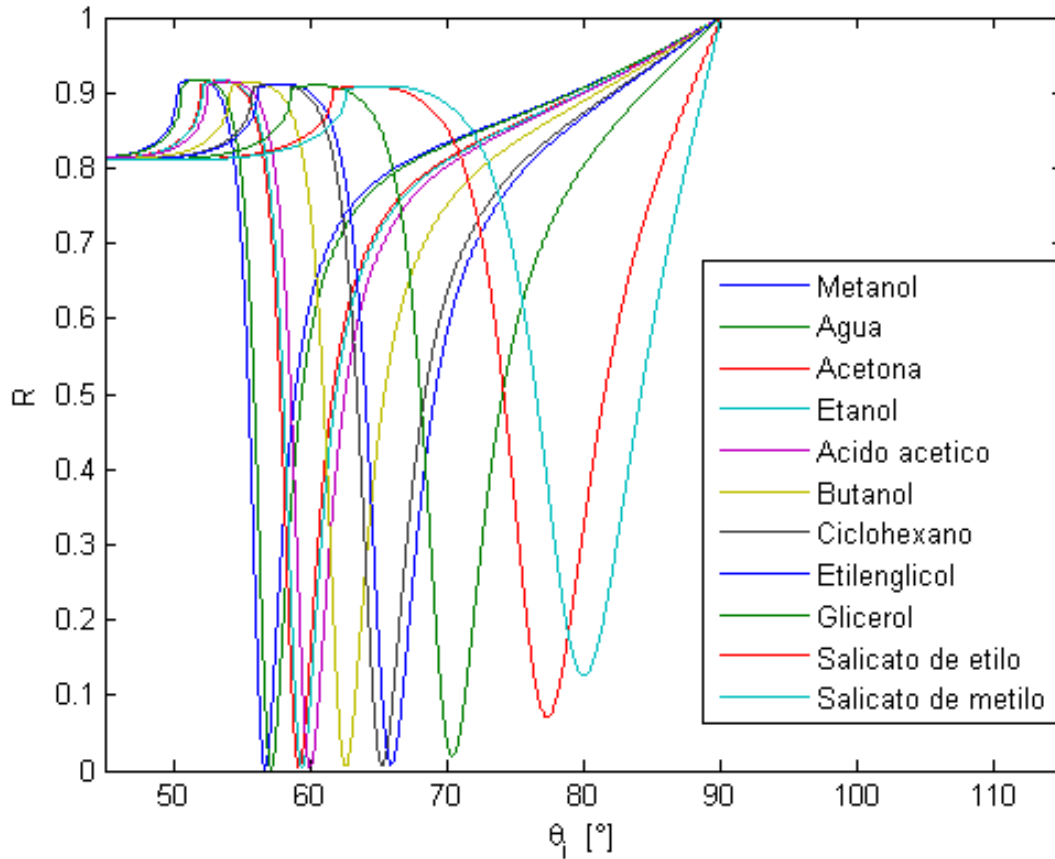
Figura 4.1: Una curva SPR típica para la polarización p para un sistema de tres capas. Parámetros utilizados: un prisma de vidrio SF10 ($n_{pr} = 1,723$), película de oro ($n_1 = 0,1726 + 3,4218i$, $d_2 = 50\text{nm}$), aire ($n = 1$) y una longitud de onda de 633nm .

4.1. Simulación para 3 capas de muestras químicas y biológicas

En esta sección se realizan el estudio numérico para el modelo de 3 capas, utilizando la geometría de Kretschmann (figura 3.4) para un prisma SF10 con una fina película delgada de oro y diferentes muestras químicas. Se usaron los valores de índice de refracción de la tabla 4.1 donde se obtuvieron las curvas de la figura 4.2. Los datos analizados fueron obtenidos en la referencia [8]. Utilizando el ángulo SPR y la ecuación 3.35 se puede calcular el índice de refracción de la sustancia estudiada.

Tabla 4.1: Parámetros ópticos para diferentes tipos de muestras químicas del ojo humano [8].

Muestra	Índice de refracción	Ángulo SPR
Metanol	1.32634	56.7
Acetona	1.35781	59.3
Etanol	1.36042	59.3
Ácido acético	1.3677	59.92
Butanol	1.3971	62.55
Ciclohexano	1.42491	65.33
Etilenglicol	1.43141	66.12
Glicerol	1.47060	70.8
Salicilato de etilo	1.51668	78.45
Salicilato de metilo	1.53031	81.45

**Figura 4.2:** Curvas SPR de 3 capas de sustancias químicas. Parámetros utilizados: un prisma de vidrio SF10 ($n_{pr} = 1,723$), película de oro ($n_1 = 0,1726 + 3,4218i$, $d = 50\text{nm}$) y una longitud de onda de 633nm.

En la figura 4.2 se muestra las curvas de la reflectancia vs. el ángulo de incidencia de varias muestras químicas. Se observa que para algunas muestras, sus curvas presentan una caída de la reflectancia que no llegan a un valor mínimo (cero). Esto se debe a que el grosor de la película metálica no es óptimo.

Similarmente empleando el sistema de 3 capas se utilizó un prisma de vidrio SF10 con una fina película de oro y diferentes muestras biológicas. La figura 4.3 muestra curvas SPR correspondientes a la reflectancia vs. el ángulo de incidencia para muestras de diferentes partes biológicas del ojo humano. La Tabla 4.2 muestra los parámetros ópticos para diferentes muestras del ojo.

Tabla 4.2: Parámetros ópticos tales como el ángulo SPR e índice de refracción para diferentes tipos de muestras de ojo humano [8].

Muestra	Índice de refracción	Ángulo SPR
humor acuoso y humor vítreo	1.336	57.4
Superficie superior del Estroma	1.373	60.45
Superficie inferior del Estroma	1.38	61.1
Lente de contacto (lens crystallin)	1.396	62.55
Epitelio corneal (Capa de Estroma)	1.401	63

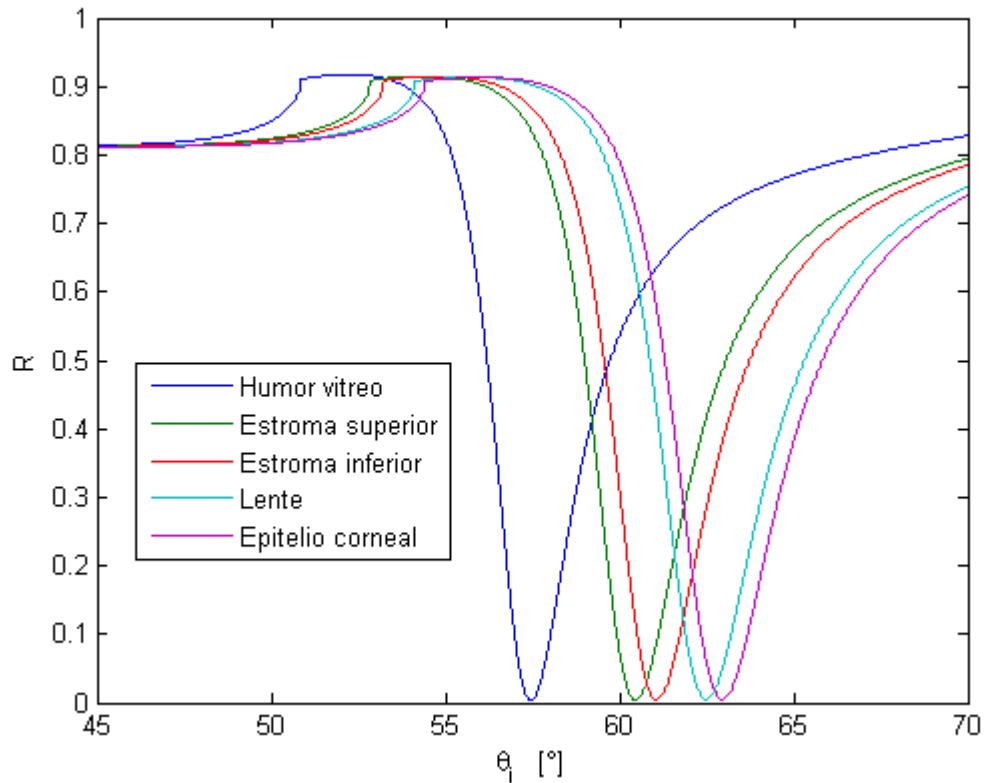


Figura 4.3: Curvas SPR de 3 capas para diferentes componentes del ojo humano. Parámetros utilizados: un prisma de vidrio SF10 ($n_{pr} = 1,723$), película de oro ($n_1 = 0,1726 + 3,4218i$, $d = 50\text{nm}$) y una longitud de onda de 633nm .

En la figura 4.3 se observan caídas de la reflectancia que corresponden a la absorción cuya distribución angular de reflectancia es debido a la excitación de SPR. El índice de refracción de las muestras puede determinarse por el ángulo SPR. El desplazamiento de las caídas de la reflectancia

corresponde a la variación del índice de refracción de las muestras. En consecuencia, se puede observar que los cambios de orden (magnitud) en el índice de refracción de las muestras introducen un desplazamiento apreciable de la posición de la resonancia, sin alteración de la forma de la caída de la reflectancia.

4.2. Simulación para 4 capas

Para el sistema de cuatro capas se añade una capa dieléctrica adicional de MgF_2 (Fluoruro de Magnesio) entre el prisma y el metal de la geometría convencional de Krestschmann 3.5. Nuestros resultados de simulación con una capa intermedia se muestran en la figura 4.4, y los datos fueron tomados de la tabla 4.2.

En la figura 4.5 se muestra la simulación que fue realizada utilizando una capa de Fluoruro de Magnesio (MgF_2) con un índice de refracción de 1,38 y un espesor de 450 nm. Como se puede ver en las figuras 4.4 y 4.5 el ancho de la curva de la caída de la reflectancia es menor que para un sistema de 3 capas, esto permite mayor precisión en las mediciones.

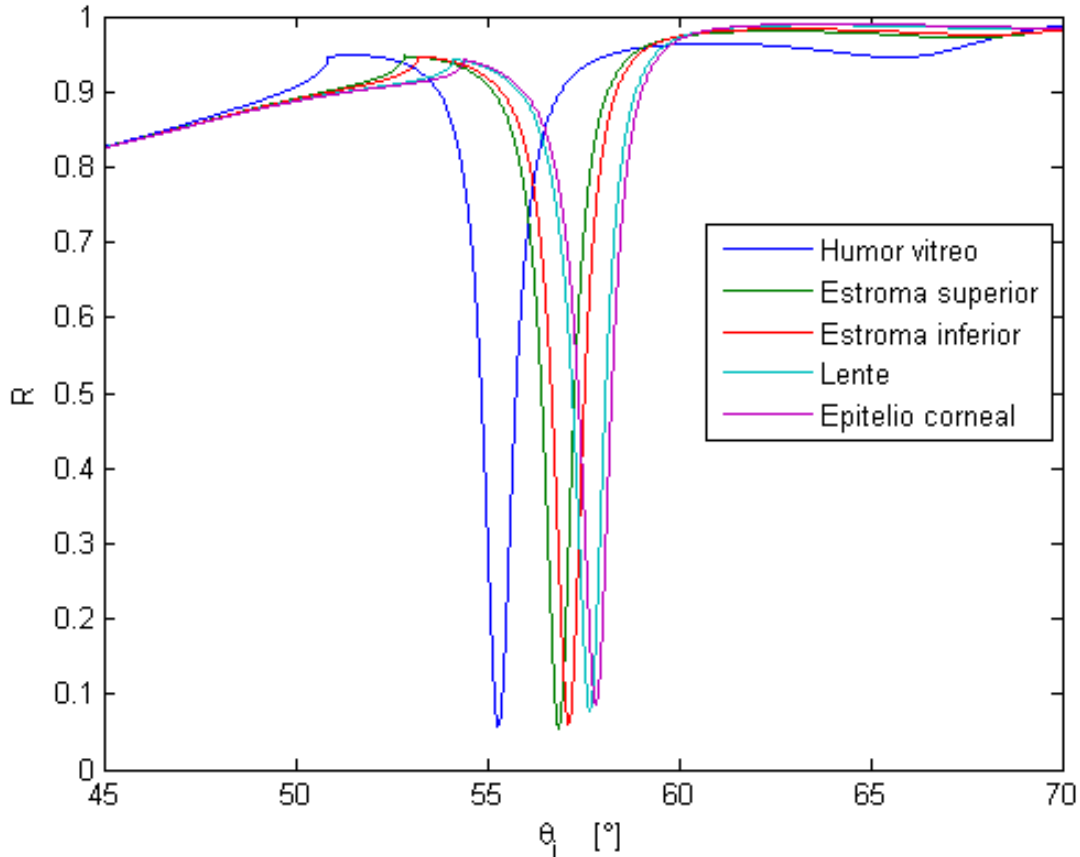


Figura 4.4: Curvas SPR de 4 capas de diferentes muestras biológicas del ojo. Parámetros utilizado: un prisma de vidrio SF10 ($n_{pr} = 1,723$), capa dieléctrica MgF_2 ($n_2 = 1,38$, $d = 450\text{nm}$), película de oro ($n_1 = 0,1726 + 3,4218i$, $d = 50\text{nm}$) y una longitud de onda de 633 nm.

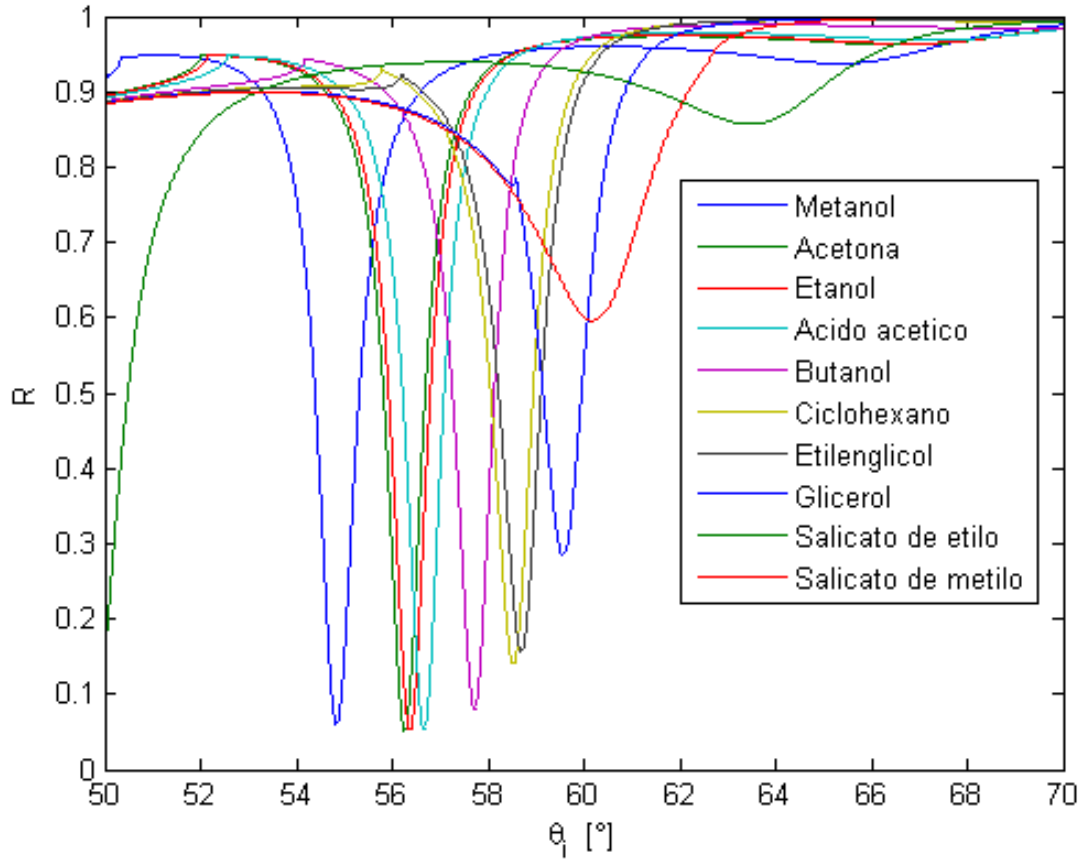


Figura 4.5: Curvas SPR de 4 capas para diferentes muestras químicas del ojo. Parámetros utilizados: un prisma de vidrio SF10 ($n_{pr} = 1,723$), capa dieléctrica MgF_2 ($n_2 = 1,38$, $d = 450\text{nm}$), película de oro ($n_1 = 0,1726 + 3,4218i$, $d = 50\text{nm}$) y una longitud de onda de 633nm .

4.3. Optimización de parámetros ópticos

Las observaciones basadas en un sólo parámetro no son suficientes para una medición más precisa de las muestras biológicas y químicas. Los parámetros de la longitud de onda, el espesor del dieléctrico y de la capa metálica son de utilidad para realizar mediciones con mayor resolución. La variación de la reflectancia con la longitud de onda de la luz desempeña un papel importante a este respecto y lo mismo se observa para las muestras de ojo humano. En la figura 4.6 se presentan las curvas SPR para un ángulo de incidente fijo que se sitúa entre el intervalo de los respectivos ángulos de SPR, donde se encuentran las caídas de la reflectancia.

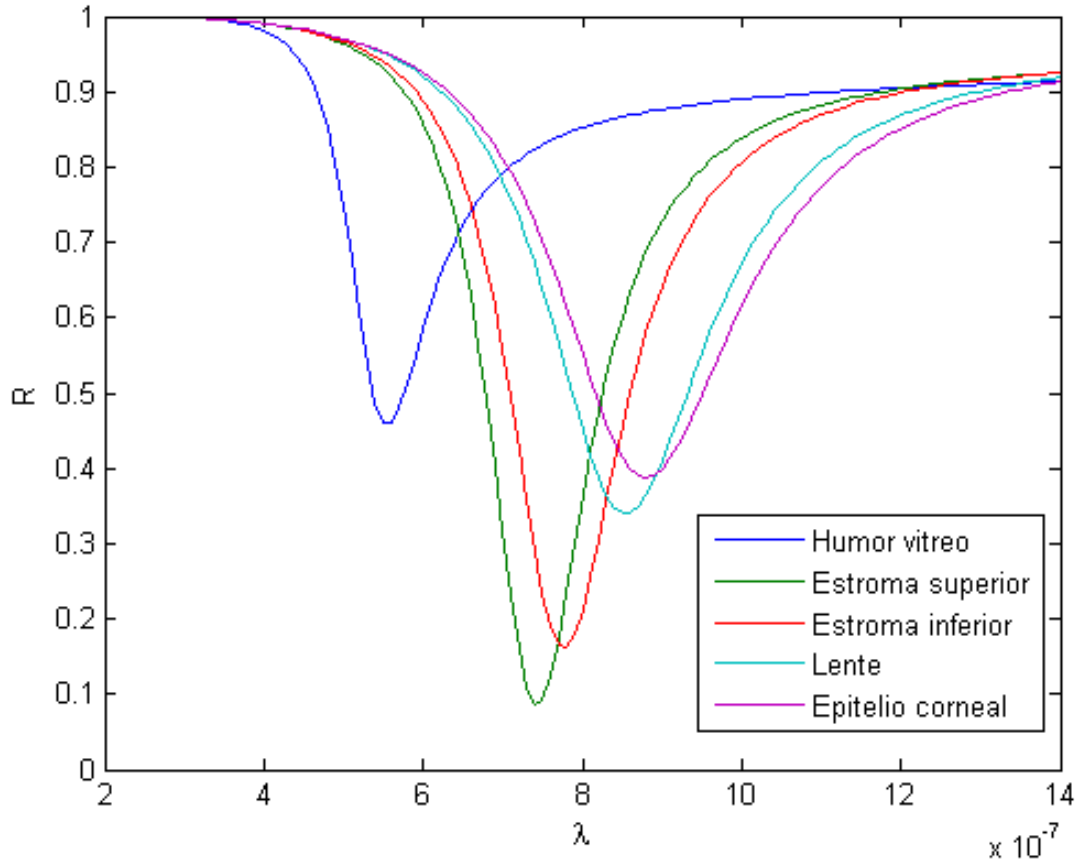


Figura 4.6: Dependencia de curvas SPR con la longitud de onda. Parámetros utilizados: un prisma de vidrio SF10 ($n_{pr} = 1,723$), capa dieléctrica MgF_2 ($n_2 = 1,38$, $d = 450\text{nm}$), película de oro ($n_1 = 0,1726 + 3,4218i$, $d = 50\text{nm}$) a un ángulo de 56° .

En la Figura 4.7 se muestra la variación de las curvas SPR con ángulo de incidencia para diferentes espesores de la capa intermedia. Aunque el ángulo de SPR correspondiente a la inmersión en la reflectancia no varía, esta curva desempeña un papel importante en la elección del espesor óptimo de la capa dieléctrica intermedia para aumentar la sensibilidad de la medición.

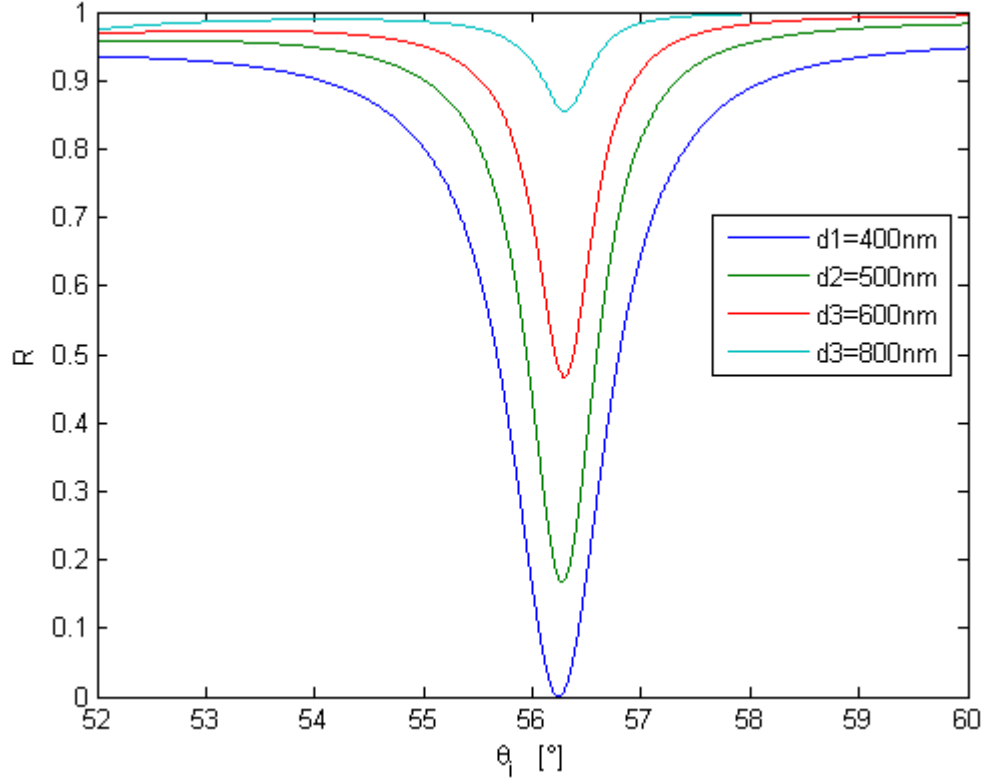


Figura 4.7: Dependencia de curvas SPR con el espesor de la capa dieléctrica. Parámetros utilizados: un prisma de vidrio SF10 ($n_{pr} = 1,723$), capa dieléctrica MgF_2 ($n_2 = 1,38$), película de oro ($n_1 = 0,1726 + 3,4218i$, $d = 50\text{nm}$) y una longitud de onda de 633nm para una muestra de acetona.

La posición de los valores mínimos de la reflectancia correspondientes al ángulo de resonancia, son una medida del plasmón superficial, ya no depende simplemente por el límite dieléctrico-metal porque está además perturbada por la presencia del prisma de acoplamiento.

A medida que aumenta el espesor, la perturbación por el prisma disminuye y la resonancia se mueve a la posición correspondiente a los dos medios plasmónicos de superficie y también se estrecha. Si se desea un óptimo rendimiento, es decir, lograr un 100 % de acoplamiento, entonces para la radiación visible, la separación debe ser del orden de 400 nm . Tras ajustar el grosor de la capa dieléctrica intermedia, Es posible conseguir que la intensidad reflejada sea prácticamente nula para cualquier longitud de onda del rango visible.

Además, la elección del espesor de la capa metálica tiene también cierta importancia, como se muestra en la figura 4.8, en la que se representa la reflectancia frente al ángulo para diferentes espesores de la película de oro para una muestra particular en la misma configuración de cuatro niveles.

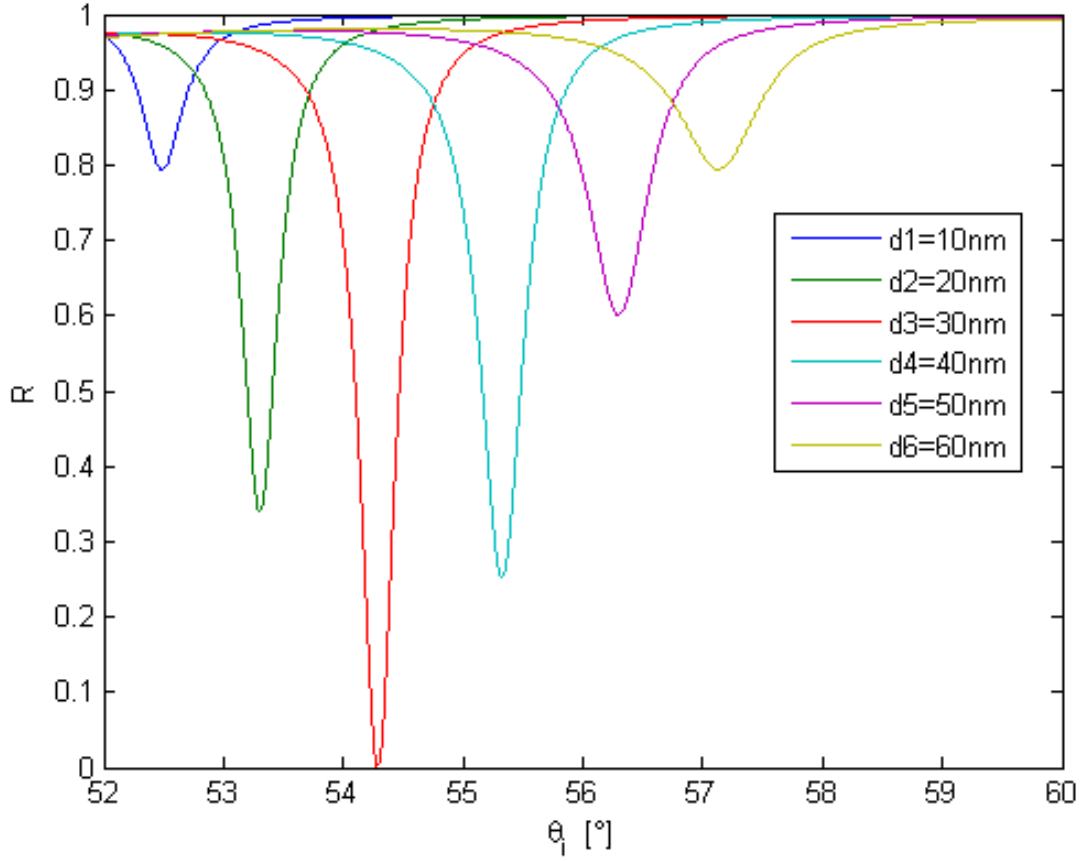


Figura 4.8: Dependencia de curvas SPR con el espesor de la película metálica. Parámetros utilizados: un prisma de vidrio SF10 ($n_{pr} = 1,723$), capa dieléctrica MgF_2 ($n_2 = 1,38$, $d = 450\text{nm}$) y una longitud de onda de 633nm para una muestra de humor vítreo.

La figura 4.8 muestra los espectros de SPR para películas de Au con diferentes espesores. Se puede observar la dependencia de las curvas SPR con el espesor de película de Au. Para las películas más gruesas, la transmisión del campo evanescente de la luz incidente disminuye exponencialmente a través de la película metálica que conduce a un campo electromagnético débil en la interfase metal-dieléctrico, mientras que las películas que son demasiado finas se observan resonancia reducida debido al amortiguamiento SPR y no hay ninguna posibilidad de excitarlos eficazmente.

4.4. Modelación de un sensor SPR para detectar la bacteria E. Coli

Finalmente, en esta sección se reproducen los datos reportados en el trabajo de H. Baccar et al. [14], donde se propone el desarrollo de dos biosensores de bacterias basados en la técnica de resonancia de plasmones superficiales (SPR). El primer sensor que se reporta utiliza un sustrato de oro funcionalizado y el segundo implementa nanopartículas de oro inmovilizadas. En este trabajo de tesis sólo se considera la primera propuesta; una película delgada de oro para la detección de

la bacteria *E. Coli*. El esquema modelado se basó en la figura 1.3 y nuevamente se incluye en esta sección, en la figura 4.9, para fines prácticos.

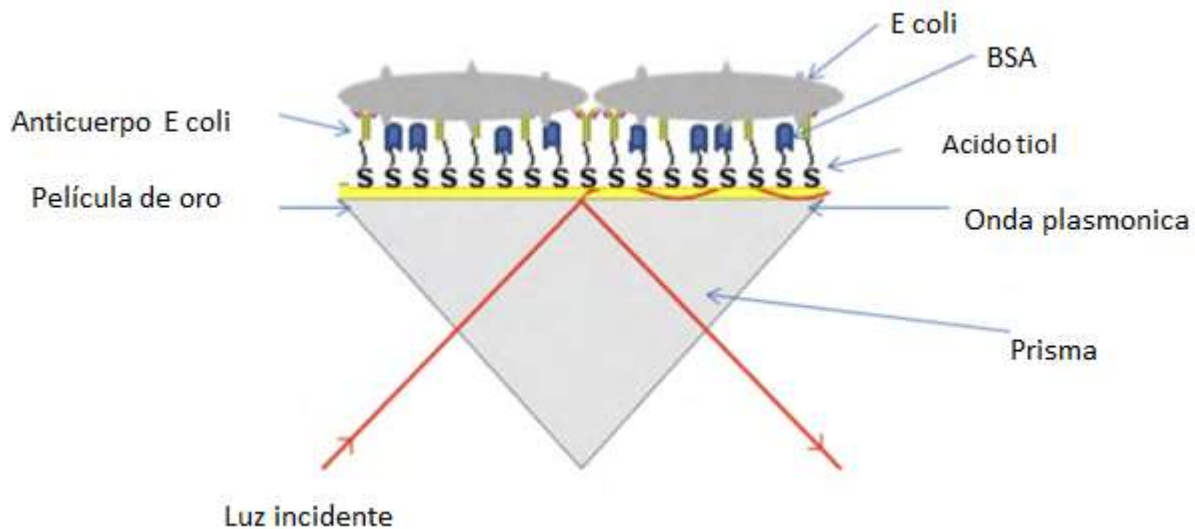


Figura 4.9: Esquema del biosensor SPR [14].

El sistema propuesto consiste en un substrato de oro que fue funcionalizado con ácido tiol para permitir un adecuado ensamble. Como sistema receptor se utiliza el anticuerpo “goat polyclonal IgG” que solo permite anclarse a la bacteria *E. Coli*. Además como medio de referencia se utiliza la proteína albúmina de suero bovino (BSA) y la bacteria analizada fue *E. Coli* K12 (gran negativa). La forma en la que se han preparado todos los reactivos y la metodología implementada se describen en detalle en la referencia [14].

Para realizar un seguimiento del crecimiento de una biopelícula, es común generar una curva de calibración para analizar las variaciones de la reflectancia en función de la concentración de la biopelícula estudiada. La determinación de los parámetros de la biopelícula como la concentración, el índice de refracción y el espesor son obtenidos utilizando algún software de modelación donde se realiza un ajuste con datos teóricos. En este trabajo se han tomado los datos reportados en la referencia [14] para la reproducción de las curvas SPR en función de la concentración de bacterias. El espesor de la película de oro es de 48,6 nm con una constante dieléctrica de $-16,67 + i2,32$. El espesor del material compuesto por el ácido tiol y el anticuerpo más la proteína BSA fue de 7nm. La película biológica formada por la bacteria *E. Coli* se reporta con un espesor de $0,8\mu m$.

En la figura 4.10 se muestran las curvas SPR para diferentes concentraciones de la bacteria *E. Coli* en un rango angular de 63° a 67° donde se encuentra el pico de absorción. Se aprecia que hay un aumento del ángulo de resonancia o acoplamiento debido al reconocimiento específico de las bacterias con el anticuerpo. Los cambios del ángulo de resonancia se han relacionado con las concentraciones de la bacteria reportadas en ufc/mL (unidad formadora de colonias por mililitro).

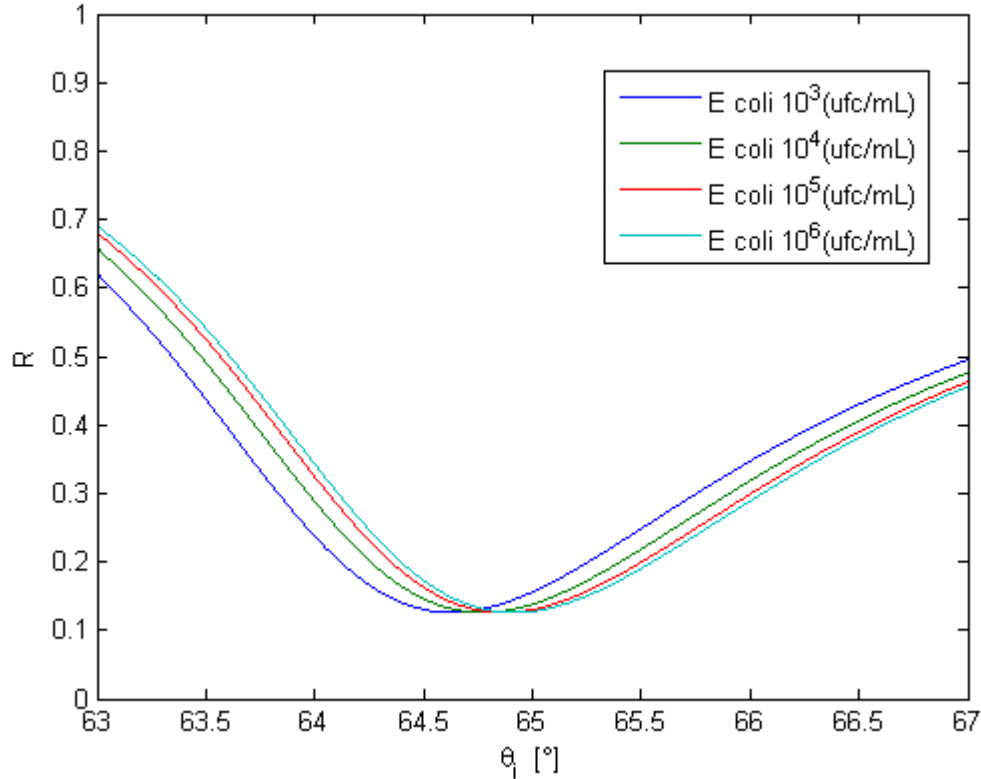


Figura 4.10: Curvas SPR para diferentes concentraciones de la bacteria E.Coli. Parámetros utilizados: película de oro película de oro ($\varepsilon = -16,67 + 2,32i$, $d = 48,6\text{nm}$), una capa de ácido tiol ($\varepsilon = 2,308$, $d = 1,14\text{nm}$), una capa de anticuerpos + BSA ($\varepsilon = 2,25$, $d = 7\text{nm}$) y una longitud de onda de 650 nm.

De las curvas de la figura anterior, se puede medir el ángulo de acoplamiento para relacionarlo con el índice de refracción de las diferentes concentraciones. Esto podría servir como una curva de calibración para proponer un sensor que mida en tiempo real la cinética de la formación de una biopelícula. En la tabla 4.3 se presentan los datos usados.

Tabla 4.3: Índice de refracción de diferentes concentraciones de una biopelícula de E. Coli. [14].

Concentración ufc/mL	Índice de refracción
10^3	1,3515
10^4	1,3530
10^5	1,3540
10^6	1,3545

De acuerdo a los datos reportados en la referencia [14], se observa que existen diferencias con los datos que se reportan en éste trabajo. El análisis que se ha utilizado en este trabajo fue hecho para un modelo de 4 capas, y en la referencia estudiada, el sistema es mucho más complejo. En la referencia [14], para la determinación de los parámetros como el índice de refracción que permite determinar la concentración en la biopelícula, fueron realizados por medio de un software comercial de modelado (Winpall). En este trabajo de tesis, se logro obtener datos cercanos a los reportados en la referencia [14] utilizando programas desarrollados con Matlab. Sin embargo para poder lograr datos más precisos, es necesario entender el análisis a sistemas mayores a 4 capas.

Capítulo 5

Conclusiones

- Se determinaron las condiciones necesarias para el confinamiento de la onda en la interfaz dieléctrico-metal a través de la solución de las ecuaciones de Maxwell. Usando el modelo de Drude, se estableció y analizó el concepto de función dieléctrica, el cual permite determinar la respuesta de los metales ante campos electromagnéticos a fin de ser utilizados para la excitación de un SPR. Como la permitividad depende de la frecuencia, se observó que para $\omega < \omega_p$ la parte real de la permitividad eléctrica es negativa lo que nos indica que la reflectividad es grande, para $\omega > \omega_p$ la permitividad eléctrica es positiva lo que indica que se tiene una reflectividad menor y que el metal se comporta como un dieléctrico y para el caso de $\omega \approx \omega_p$ los electrones se excitan en forma de ondas longitudinales en la superficie del metal formando plasmones superficiales.
- Se analizaron los vectores de onda permitidos para la propagación, los cuales fueron encontrados a través de la relación de dispersión. Esta última relación permite establecer los parámetros ópticos (longitud de onda y permitividad dieléctrica) para la excitación del plasmón. Además se llegó a la relación que debe existir sobre la permitividad dieléctrica de la interfase metal-dieléctrico, lo cual para el dieléctrico debe ser mayor que cero y para el metal menor que cero, también debe cumplir que $-\varepsilon_m > \varepsilon_d$.
- La configuración de Kretschmann establece que para lograr la excitación de SPR se puede utilizar un prisma con índice de refracción mayor a la del dieléctrico intermedio. Y bajo la condición de reflexión total interna se genera una onda evanescente el cual permite la propagación del plasmón.
- Usando datos experimentales reportados en la literatura, se implementaron códigos en MatLab para la simulación de diferentes configuraciones y parámetros ópticos, dicho análisis nos muestra que la configuración de 4 capas presenta mayor resolución, debido a que el ancho angular de la caída de la reflectancia es menor a la de un sistema de tres capas, permitiendo a su vez mediciones más precisas.
- Además, se estudió el efecto de la variación de la longitud de onda, el grosor de la película metálica y del dieléctrico. Los resultados obtenidos sugieren que modificando los parámetros ópticos, permiten proponer y diseñar un sistema experimental a base de resonancia de plasmones superficiales para el análisis de sustancias químicas y biológicas.

- Finalmente, se utilizó un modelo de 4 capas para la determinación de la concentración de una biopelícula formada por bacterias *E. Coli*. Los datos analizados fueron tomados de la literatura donde reportan medidas experimentales realizadas con previa calibración. Los datos obtenidos con el modelo de 4 capas que se ha desarrollado en éste trabajo de tesis, permite reproducir curvas SPR y localizar el índice de refracción que depende de la concentración de la bacteria. Los resultados son aproximados a los de la referencia estudiada pero se puede lograr datos más precisos, ampliando a sistemas mayores a 4 capas.

Bibliografía

- [1] Nardo Ramírez Frómeta. Biosensores: Un acercamiento a la resonancia del plasmon superficial. *Revista CENIC. Ciencias Biológicas*, 36, 2005.
- [2] Nuria Peña García. *Biosensores amperométricos compósitos basados en peroxidasa: aplicación a la determinación de analitos de interés en alimentos mediante electrodos bienzimáticos y multienzimáticos: memoria presentada para optar al grado de Doctor*. [Universidad Complutense], Servicio de Publicaciones, 2005.
- [3] Borja Sepúlveda Martínez, Francisco Prieto, Ana Calle Martín, and Laura M Lechuga. Prototipo de biosensor óptico basado en la resonancia de plasmón superficial con sistema de referencia. 2001.
- [4] Antonio García-Marín, José M Abad, Eduardo Ruiz, Encarnación Lorenzo, Juan Piqueras, and José L Pau. Glutathione immunosensing platform based on total internal reflection ellipsometry enhanced by functionalized gold nanoparticles. *Analytical chemistry*, 86(10):4969–4976, 2014.
- [5] William L Barnes, Alain Dereux, and Thomas W Ebbesen. Surface plasmon subwavelength optics. *Nature*, 424(6950):824–830, 2003.
- [6] Francisco J García Vidal and Luis Martín Moreno. Plasmones superficiales. *Investigación y ciencia*, page 67, 2008.
- [7] Anatoly V Zayats, Igor I Smolyaninov, and Alexei A Maradudin. Nano-optics of surface plasmon polaritons. *Physics reports*, 408(3):131–314, 2005.
- [8] Mahua Bera and Mina Ray. Precise detection and signature of biological/chemical samples based on surface plasmon resonance (spr). *Journal of Optics*, 38(4):232–248, 2009.
- [9] Andreas Otto. Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection. *Zeitschrift für Physik*, 216(4):398–410, 1968.
- [10] Erwin Kretschmann and Heinz Raether. Notizen: radiative decay of non radiative surface plasmons excited by light. *Zeitschrift für Naturforschung A*, 23(12):2135–2136, 1968.
- [11] AF Collings and Frank Caruso. Biosensors: recent advances. *Reports on Progress in Physics*, 60(11):1397, 1997.
- [12] Jin Zhong Zhang. Biomedical applications of shape-controlled plasmonic nanostructures: a case study of hollow gold nanospheres for photothermal ablation therapy of cancer. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 1(4):686–695, 2010.

-
- [13] Harry A Atwater. The promise of plasmonics. *Scientific American*, 296(4):56–62, 2007.
- [14] H Baccar, MB Mejri, I Hafaiedh, T Ktari, M Aouni, and A Abdelghani. Surface plasmon resonance immunosensor for bacteria detection. *Talanta*, 82(2):810–814, 2010.
- [15] Shiyang He, Zhirui Guo, Yu Zhang, Song Zhang, Jing Wang, and Ning Gu. Biosynthesis of gold nanoparticles using the bacteria *rhodospseudomonas capsulata*. *Materials Letters*, 61(18):3984–3987, 2007.
- [16] Rita Maalouf, Chantal Fournier-Wirth, Joliette Coste, Hanna Chebib, Youssef Saïkali, Olivier Vittori, Abdelhamid Errachid, Jean-Pierre Cloarec, Claude Martelet, and Nicole Jaffrezic-Renault. Label-free detection of bacteria by electrochemical impedance spectroscopy: comparison to surface plasmon resonance. *Analytical chemistry*, 79(13):4879–4886, 2007.
- [17] Yoshihisa Amano and Quan Cheng. Detection of influenza virus: traditional approaches and development of biosensors. *Analytical and bioanalytical chemistry*, 381(1):156–164, 2005.
- [18] Stefan Alexander Maier. *Plasmonics: fundamentals and applications*. Springer Science & Business Media, 2007.
- [19] Harry A Atwater, Stefan Maier, Albert Polman, Jennifer A Dionne, and Luke Sweatlock. The new “p–n junction”: plasmonics enables photonic access to the nanoworld. *MRS bulletin*, 30(05):385–389, 2005.
- [20] S Pillai and MA Green. Plasmonics for photovoltaic applications. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 94(9):1481–1486, 2010.
- [21] Diego Martín Martín, Alejandro Datas Medina, and Carlos Algora del Valle. Energía solar termofotovoltaica. *Anales de Ingeniería Técnica Informática de Sistemas*, 2:105–124, 2008.
- [22] E Hecht and A Zajac. *Óptica*, 3 a edi, 1986.
- [23] Masahiro Yamamoto. Surface plasmon resonance (spr) theory: tutorial. *Rev Polarogr*, 48:209–237, 2002.
- [24] Dennis H Goldstein. *Polarized light*. CRC press, 2016.
- [25] Edward Collett. *Field guide to polarization*. SPIE Bellingham, WA, 2005.
- [26] IF Almog, MS Bradley, and V Bulovic. The lorentz oscillator and its applications. *Massachusetts Institute of Technology*, 2011.
- [27] Fernando D Stefani. Técnicas basadas en la resonancia de plasmones superficiales. detección y estudio de reacciones de hibridización de adn en superficies. *Trabajo de seminario. Universidad Nacional de General San Martín. Comisión Nacional De Energía Atómica. Instituto De Tecnología. Ingeniería en Materiales. Argentina*, 2001.
- [28] Masahiro Yamamoto. Surface plasmon resonance (spr) theory: Tutorial.
- [29] Kazuyoshi Kurihara and Koji Suzuki. Theoretical understanding of an absorption-based surface plasmon resonance sensor based on kretschmann’s theory. *Analytical chemistry*, 74(3):696–701, 2002.
-

- [30] Sergiy Patskovsky, Andrei V Kabashin, Michel Meunier, and John HT Luong. Silicon-based surface plasmon resonance sensing with two surface plasmon polariton modes. *Applied optics*, 42(34):6905–6909, 2003.
- [31] Wilford N Hansen. Electric fields produced by the propagation of plane coherent electromagnetic radiation in a stratified medium. *JOSA*, 58(3):380–390, 1968.