



Simulación de la respuesta óptica de nanopartículas mediante software libre en la Huasteca Alta

Simulation of the optical response of nanoparticles using free software in the Huasteca Alta region

Omar Wilfrido Vázquez-Estrada¹, Leobardo Mendo-Ostos¹

¹ Tecnológico Nacional de México – ITS de Tantoyuca, Veracruz, México.

Recibido: 21-09-2023

Aceptado: 10-12-2023

Autor corresponsal: omar.vazquez@itsta.edu.mx

Resumen

El estudio de la respuesta óptica de nanoestructuras, como la reflectancia, la transmitancia, la absorción y el esparcimiento de la luz, constituye un área fundamental en la nanofotónica moderna y en el desarrollo de nuevos materiales con propiedades ópticas avanzadas. Sin embargo, la investigación experimental en la escala nanométrica suele requerir laboratorios altamente especializados y equipos de fabricación costosos que no siempre están disponibles en regiones con limitaciones de infraestructura científica. En este contexto, las simulaciones numéricas representan una alternativa viable para explorar y comprender la interacción entre la luz y sistemas nanoestructurados. En este trabajo se presenta una de las primeras iniciativas desarrolladas en la región de la Huasteca Alta, desde el Instituto Tecnológico Superior de Tantoyuca, orientada al estudio computacional de fenómenos ópticos en nanoestructuras mediante el uso de software científico de código abierto. En particular, se simula el espectro de reflectancia y transmitancia de una monocapa de nanopartículas esféricas de oro de 5 nm de radio inmersas en una matriz de agua. Los cálculos se realizan utilizando el método de la Aproximación de Dipolos Discretos implementado en el código DDSCAT y se comparan con simulaciones de referencia obtenidas mediante COMSOL Multiphysics, con el propósito de evaluar el potencial de las herramientas de software libre para el análisis de sistemas nano-ópticos. Los resultados muestran que el uso de plataformas abiertas como DDSCAT, SCUFF-EM, MEEP y Octave permite desarrollar nuevas líneas de investigación facilitando el diseño de experimentos que posteriormente podrían validarse en laboratorios especializados en México o en el extranjero y contribuyendo así al fortalecimiento de la investigación científica en regiones con alta marginación.

Palabras clave: simulaciones ópticas, nanofotónica, nanoestructuras metálicas.

Abstract

The optical response of nanostructured materials, such as reflectance, transmittance, absorption, and scattering, plays a central role in modern nanophotonics, plasmonics, and optical materials engineering. However, experimental research at the nanoscale often requires highly specialized laboratories and expensive fabrication techniques that are rarely available in regions with limited scientific infrastructure. In this context, numerical simulation has become a powerful alternative for exploring the optical behavior of complex nanosystems. This work presents one of the first efforts in the Huasteca Alta region of Mexico, conducted at the Instituto Tecnológico Superior de Tantoyuca, to study nanoscale optical phenomena using open-source computational tools. The study focuses on the simulation of the reflectance and transmittance spectra of a monolayer of gold nanoparticles with a radius of 5 nm

embedded in a water matrix. Numerical calculations are performed using the Discrete Dipole Approximation through the open-source code DDSCAT and are compared with reference simulations obtained using COMSOL Multiphysics. The purpose of this comparison is to evaluate the capabilities of DDSCAT as a robust and accessible computational framework for studying light–matter interaction in nanoparticle systems. The use of open-source scientific software—including DDSCAT, SCUFF-EM, MEEP, and Octave—provides a viable pathway for developing advanced research lines in regions where experimental nanofabrication facilities are not readily available. Furthermore, computational modeling allows researchers to design and propose experiments that can later be validated in specialized laboratories in Mexico or abroad, fostering scientific collaboration and expanding the research capacity of emerging academic institutions.

Keywords: optical simulations, nanophotonics, metallic nanostructures.

Introducción

El estudio de la interacción entre la luz y la materia a escalas nanométricas constituye uno de los pilares de la nanofotónica moderna y del desarrollo de nuevos materiales funcionales con propiedades ópticas avanzadas. En particular, la respuesta óptica de nanoestructuras, se entiende por respuesta óptica a magnitudes como la reflectancia, transmitancia, absorción, extinción y esparcimiento, depende de manera crítica de parámetros físicos como el tamaño y la forma de las partículas, la constante dieléctrica del medio circundante y el arreglo espacial entre las nanoestructuras. En nanopartículas metálicas, y especialmente en nanopartículas de oro, estos efectos dan lugar a resonancias plasmónicas localizadas que permiten manipular la luz a escalas inferiores a la longitud de onda incidente, lo cual ha impulsado numerosas aplicaciones en biosensores, fotónica, medicina, espectroscopía y diseño de metamateriales ópticos (Kelly et al., 2003; Jain et al., 2006; Myroshnychenko et al., 2008; Amendola et al., 2017).

El análisis experimental de estos sistemas requiere con frecuencia infraestructura altamente especializada. La fabricación controlada de nanoestructuras suele implicar técnicas avanzadas de síntesis química, litografía o deposición de capas delgadas, además de métodos de caracterización como microscopía electrónica, espectroscopía óptica o técnicas de esparcimiento de luz. En regiones donde la infraestructura científica se encuentra en proceso de consolidación, estas capacidades experimentales pueden ser limitadas. En este contexto, la simulación electromagnética se ha convertido en una herramienta fundamental para estudiar la respuesta óptica de nanoestructuras, ya que permite analizar configuraciones complejas, explorar la influencia de parámetros físicos y proponer diseños

experimentales antes de su implementación en laboratorio (Yurkin & Hoekstra, 2007; Oskooi et al., 2010; Lalanne et al., 2018).

El desarrollo de software científico de código abierto ha desempeñado un papel clave en la expansión de estas herramientas de simulación. Las plataformas abiertas ofrecen ventajas importantes para la investigación científica, entre las que destacan la accesibilidad, la transparencia metodológica y la reproducibilidad de los resultados. La disponibilidad del código fuente permite examinar los algoritmos utilizados, adaptar los métodos numéricos a problemas específicos y compartir procedimientos computacionales con la comunidad científica. Estas características favorecen el desarrollo colaborativo del conocimiento y reducen las barreras económicas asociadas a licencias de software especializado, lo cual resulta particularmente relevante para instituciones académicas ubicadas en regiones con recursos limitados (Barba, 2022; Fedeli et al., 2019; Ince et al., 2012).

Sin embargo, el uso de software libre en simulaciones electromagnéticas también implica ciertos retos técnicos. La precisión de los resultados depende de la correcta discretización espacial, de la convergencia numérica de los métodos empleados y de la selección adecuada de constantes ópticas para los materiales considerados. Además, muchos problemas de nano-óptica requieren malla especialmente ultrafina o simulaciones espectrales amplias, lo que puede demandar recursos computacionales significativos, incluyendo procesadores multinúcleo, grandes cantidades de memoria y acceso a cómputo paralelo. En consecuencia, aunque el software libre democratiza el acceso a herramientas avanzadas de modelado electromagnético, su aprovechamiento efectivo requiere tanto formación especializada en métodos numéricos como infraestructura computacional adecuada.

Entre las herramientas abiertas más utilizadas para estudiar la dispersión electromagnética en nanoestructuras se encuentra DDSCAT, un código basado en la aproximación de dipolos discretos (Discrete Dipole Approximation, DDA). En este método, el objeto dispersor se representa mediante un conjunto de dipolos polarizables distribuidos en una red tridimensional que aproxima el volumen y forma de la partícula. La interacción electromagnética entre estos dipolos permite resolver numéricamente la dispersión de ondas electromagnéticas en partículas de geometría arbitraria. Desde su formulación original, la DDA ha demostrado ser un método robusto y versátil para calcular propiedades ópticas como absorción, esparcimiento y extinción en partículas metálicas y dieléctricas. La implementación DDSCAT desarrollada por Draine y Flatau incorporó mejoras significativas en eficiencia computacional, manejo de geometrías complejas y simulación de arreglos periódicos, lo que ha permitido su aplicación en numerosos estudios de nanopartículas metálicas, agregados coloidales y sistemas nanoparticulados ordenados (Draine & Flatau, 1994, 2008; Yurkin & Hoekstra, 2007; Flatau & Draine, 2012).

Otro enfoque computacional ampliamente utilizado en nano-óptica es el método de elemento de borde (Boundary Element Method, BEM), implementado en herramientas abiertas como SCUFF-EM. Este método reformula las ecuaciones de Maxwell en términos de corrientes superficiales inducidas en las interfaces de los objetos dispersores, lo que permite describir fenómenos de esparcimiento electromagnético utilizando discretizaciones basadas en superficies en lugar de volúmenes completos. Esta formulación puede resultar especialmente eficiente en sistemas donde las propiedades ópticas están dominadas por las interfaces entre materiales, como ocurre en nanopartículas metálicas o nanoestructuras plasmónicas. En años recientes, el BEM se ha utilizado con éxito para estudiar resonancias plasmónicas en nanopartículas de oro de diferentes geometrías, así como para analizar el acoplamiento electromagnético en arreglos de nanopartículas (Reid et al., 2015; Marcheselli et al., 2020).

Por otra parte, el método Finite-Difference Time-Domain (FDTD) constituye una de las técnicas numéricas más utilizadas para resolver las ecuaciones de Maxwell en el dominio temporal. Este método ha sido implementado en el software libre Meep, que permite modelar la propagación de ondas electromagnéticas en medios complejos mediante una discretización espacio-temporal. Entre las principales ventajas del método FDTD se encuentran su flexibilidad para modelar geometrías arbitrarias. Gracias a estas características, Meep se ha convertido en una herramienta ampliamente utilizada en estudios de nanofotónica, guías de onda, cristales fotónicos y estructuras plasmónicas (Oskooi et al., 2010). Además, su versatilidad ha permitido extender estas simulaciones al estudio de sistemas biológicos, donde el modelado computacional del esparcimiento de luz puede aportar información relevante sobre la interacción entre radiación electromagnética y estructuras celulares o tejidos biológicos (Ball & Li, 2024; Yurkin et al., 2005).

Como se mencionó, diversos estudios han demostrado que la respuesta óptica de nanopartículas metálicas depende fuertemente de parámetros como el tamaño de la partícula, la periodicidad del arreglo y el índice de refracción del medio circundante. En particular, en arreglos periódicos de nanopartículas pueden aparecer fenómenos de acoplamiento plasmónico colectivo que modifican de manera significativa las propiedades espectrales del sistema, afectando tanto la posición como la intensidad de las resonancias ópticas observadas en reflectancia o transmitancia (Kelly et al., 2003; Jain et al., 2006; Wang et al., 2012; Lalanne et al., 2018). Desde una perspectiva regional, el desarrollo de capacidades en simulación electromagnética mediante herramientas abiertas representa una oportunidad importante para fortalecer la investigación científica en contextos donde la infraestructura experimental aún se encuentra en proceso de consolidación. En particular, el Instituto Tecnológico Superior de Tantoyuca (ITSTa), ubicado en la región de la Huasteca Alta, busca impulsar nuevas líneas de investigación en física aplicada,

modelado computacional y ciencia de materiales. En una región caracterizada por desafíos socioeconómicos y limitaciones en infraestructura científica avanzada, la adopción de herramientas de simulación basadas en software libre puede constituir un primer paso para integrarse a redes de investigación nacionales e internacionales y fomentar la formación de recursos humanos en áreas emergentes de la ciencia y la ingeniería. En este contexto, el presente trabajo presenta una primera simulación realizada mediante DDSCAT para analizar los espectros de reflectancia y transmitancia en función de la longitud de onda en el intervalo 400–900 nm, correspondientes a una monocapa ordenada cuadrada de nanopartículas esféricas de oro de 5 nm de radio inmersas en agua. Los resultados obtenidos se comparan con simulaciones de referencia realizadas en COMSOL Multiphysics, con el objetivo de evaluar el desempeño del método de dipolos discretos a través de DDSCAT. Esta aproximación no sólo permite explorar el comportamiento espectral del sistema estudiado, sino también ilustrar el potencial del software científico de código abierto como herramienta para desarrollar investigación avanzada en nano-óptica desde instituciones emergentes de educación superior.

Materiales y métodos

Simulación de la respuesta óptica mediante DDSCAT

La respuesta óptica de una monocapa periódica de nanopartículas metálicas se simuló utilizando el código abierto DDSCAT 7.3, una implementación del método de la aproximación de dipolos discretos (DDA) para el cálculo numérico de esparcimiento electromagnético. En este enfoque, el objeto dispersor continuo se reemplaza por un conjunto finito de dipolos polarizables distribuidos sobre una red cúbica tridimensional, de modo que la interacción electromagnética entre los dipolos puede resolverse de manera autoconsistente para una onda plana incidente. Una vez obtenida la solución del sistema lineal que describe el campo eléctrico en cada dipolo, es posible calcular propiedades ópticas como absorción, esparcimiento y extinción, así como coeficientes de reflexión y transmisión para arreglos periódicos de partículas (Draine & Flatau, 1994; Yurkin & Hoekstra, 2007).

Las simulaciones realizadas en este trabajo corresponden a una monocapa ordenada de nanopartículas esféricas de oro de radio 5 nm, inmersas en un medio homogéneo de agua con un índice de refracción de 1.33. Cada nanopartícula fue representada mediante una discretización volumétrica en dipolos definida en el archivo shape.dat (véase la Fig. 1), el cual contiene las coordenadas tridimensionales de los dipolos que aproximan el volumen de la partícula dentro de una celda unitaria

periódica (Target Unit Cell, TUC). Esta celda unitaria se replica posteriormente en dos direcciones espaciales, permitiendo modelar un arreglo periódico bidimensional que representa una monocapa extensa de nanopartículas mediante una única celda representativa del sistema (Draine & Flatau, 2008). El radio efectivo de la nanopartícula se fijó en $a_{eff} = 0.005 \mu m$

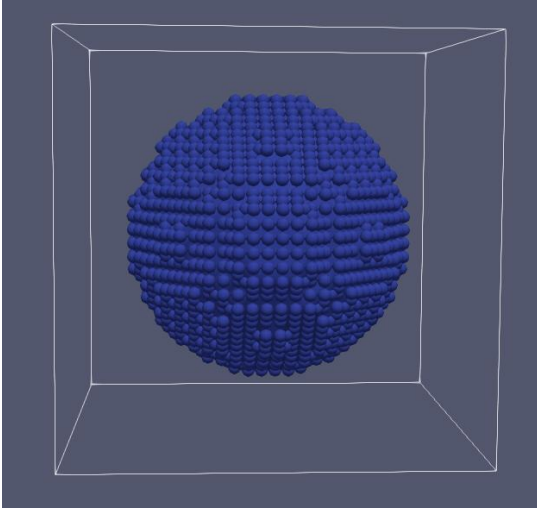


Figura 1. Representación de la discretización de una nanopartícula esférica de oro utilizada en las simulaciones mediante el método de la aproximación de dipolos discretos (DDA). La esfera de radio efectivo $a_{eff} = 5 \text{ nm}$ se aproxima mediante un conjunto de dipolos polarizables distribuidos sobre una red cúbica regular dentro de la celda unitaria (Target Unit Cell, TUC). Esta celda se replica periódicamente en las direcciones laterales para modelar una monocapa ordenada de nanopartículas inmersas en agua. La discretización volumétrica permite resolver la interacción electromagnética entre los dipolos y calcular la respuesta óptica del sistema mediante el código DDSCAT (Draine & Flatau, 1994, 2008; Yurkin & Hoekstra, 2007).

lo que corresponde a nanopartículas de oro de radio 5 nm. La discretización de la esfera se realizó utilizando 4224 dipolos, distribuidos sobre una red cúbica regular con espaciamiento d , ver Fig. 1. Este espaciamiento se relaciona con el radio efectivo mediante la expresión siguiente (Ec. 1)

$$a_{eff} = \left(\frac{3Nd^3}{4\pi} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad \text{Ec. (1)}$$

la cual permite determinar el tamaño físico del blanco a partir del número de dipolos que lo representan (Draine & Flatau, 1994). En el caso de la discretización empleada, el valor obtenido para el espaciamiento entre dipolos es del orden de 1 nm, lo que proporciona una resolución espacial adecuada para representar la geometría esférica de la nanopartícula. La validez del método DDA depende de que el parámetro adimensional (Ec. 2)

$$|m|kd, \quad \text{Ec. (2)}$$

sea suficientemente pequeño, donde m es el índice de refracción complejo del material, $k = 2\pi/\lambda$ es el número de onda y d es el espaciamiento entre dipolos. Un criterio ampliamente aceptado establece que $|m|kd < 1$ garantiza resultados fiables para las secciones eficaces totales, mientras que valores menores a 0.5 proporcionan mayor precisión en las propiedades angulares de dispersión (Yurkin & Hoekstra, 2007). En el intervalo espectral considerado en este trabajo, comprendido entre 400 y 900 nm, el valor máximo de $|m|kd$ permanece dentro del rango recomendado lo que asegura la validez numérica de la discretización utilizada. Con el objetivo de estudiar el efecto de la densidad superficial de nanopartículas sobre la respuesta óptica del sistema, se consideraron dos configuraciones periódicas caracterizadas por fracciones de cubierta superficial del 1 % y 15 %. Estas configuraciones se implementaron modificando la periodicidad lateral del arreglo cuadrado definido en los archivos de entrada `ddscat.par` y `ddscat.par`, respectivamente. La fracción de cubierta de una red cuadrada de partículas monodispersas puede expresarse como se muestra en la Ec. 3

$$\phi = \frac{\pi r^2}{p^2}, \quad \text{Ec. (3)}$$

donde r es el radio de la nanopartícula y p es la periodicidad del arreglo. A partir de esta relación se obtienen periodicidades aproximadas de 89 nm para la fracción de cubierta del 1 % y 23 nm para la configuración del 15 %. De esta manera, el tamaño de la partícula se mantiene constante mientras que la separación interpartícula se modifica, lo que permite analizar el efecto del acoplamiento electromagnético entre nanopartículas dentro del arreglo periódico. Las propiedades ópticas del material se describieron mediante la función dieléctrica del oro evaporado Jhonson & Chrsty (Johnson & Christy, 1972), mientras que el medio circundante se modeló como agua con un índice de refracción constante de 1.33. DDSCAT permite incorporar de forma directa el índice de refracción del medio que rodea la nanopartícula (comúnmente denominada la matriz), de modo que todas las magnitudes ópticas calculadas corresponden al sistema inmerso en dicho medio (Draine & Flatau, 2008).

Los espectros ópticos se calcularon en el intervalo de longitudes de onda comprendido entre 400 y 900 nm, utilizando 100 puntos espectrales uniformemente distribuidos. Este rango cubre la región visible y parte del infrarrojo cercano, donde se localizan las resonancias plasmónicas características de nanopartículas de oro (Kelly et al., 2003; Jain et al., 2006). Para cada longitud de onda, DDSCAT resolvió el sistema de ecuaciones lineales asociado a la interacción dipolar mediante el solucionador iterativo PBCGS2, optimizado para estructuras periódicas. Las operaciones de multiplicación matriz-vector se aceleraron mediante el algoritmo de transformada rápida de Fourier GPFAFT, mientras que las

polarizabilidades dipolares se calcularon utilizando el esquema GKDLDR, basado en la relación de dispersión de red (Lattice Dispersion Relation), ampliamente utilizado por su estabilidad numérica en simulaciones DDA (Yurkin & Hoekstra, 2007). La onda incidente se definió propagándose a lo largo del eje x del sistema de referencia del blanco, con dos polarizaciones lineales ortogonales. Se consideró una única orientación geométrica del arreglo periódico, lo que corresponde físicamente a incidencia normal sobre la monocapa de nanopartículas. En el caso de blancos doblemente periódicos, DDSCAT calcula los coeficientes de reflexión y transmisión asociados a cada orden de difracción del arreglo. En este trabajo se seleccionó únicamente el orden especular $(M, N) = (0, 0)$, correspondiente a la reflexión y transmisión especular del sistema. A partir de estos coeficientes se obtuvieron los espectros de reflectancia $R(\lambda)$ y la transmitancia $T(\lambda)$. Este procedimiento permitió obtener los espectros ópticos completos de la monocapa de nanopartículas de oro en función de la longitud de onda, así como analizar el efecto de la fracción de cubierta superficial sobre las propiedades de reflexión y transmisión del arreglo periódico.

Simulación de la respuesta óptica mediante COMSOL Multiphysics

Como referencia para evaluar los resultados obtenidos con DDSCAT, la respuesta óptica de la monocapa periódica de nanopartículas se simuló también mediante el método de elemento finito implementado en COMSOL Multiphysics 6.0, utilizando la interfaz de física Ondas electromagnéticas, dominio de la frecuencia. El modelo se construyó a partir de una celda unitaria tridimensional compuesta por un dominio dieléctrico de agua que contiene una nanopartícula esférica de oro ubicada en el centro geométrico de la celda, ver Fig. 2. La geometría se definió en unidades de nanómetros y se generó mediante dos entidades básicas: un bloque rectangular, que representa el medio circundante y la celda periódica de simulación, y una esfera, que representa la nanopartícula metálica de Oro. Ambas entidades se integraron mediante una operación de unión geométrica, véase Fig. 2.

La nanopartícula se modeló con un radio de 5 nm, mientras que el medio circundante se tomó como agua con índice de refracción constante de 1.33. En la configuración correspondiente a la fracción de cubierta superficial del 1 %, la longitud lateral de la celda cuadrada se fijó en $p = 8.8623 \times 10^{-8}$ m, es decir, aproximadamente 88.62 nm, valor consistente para una red cuadrada de nanopartículas esféricas de radio 5 nm. Para la fracción de cubierta del 15 %, la longitud lateral de la celda se redujo a $p = 2.2882 \times 10^{-8}$ m, es decir, aproximadamente 22.88 nm, con el propósito de aumentar la densidad superficial de partículas manteniendo constante el tamaño de la esfera. En ambos casos, la altura del

dominio se fijó en $H = 1000 \text{ nm}$, mientras que el parámetro $l_0 = 500 \text{ nm}$ se utilizó como referencia geométrica central del dominio. Esta elección permite disponer de espacio suficiente en la dirección de propagación para definir la excitación, la transmisión y la recolección de campos sin interferencia inmediata con la partícula o con las fronteras externas de la celda. La fracción de cubierta ϕ del arreglo cuadrado se relacionó con el radio de la nanopartícula y con el período lateral p mediante la expresión (3) de donde se obtuvieron los valores de la longitud lateral utilizados en ambas configuraciones. De este modo, el modelo de COMSOL reproduce el mismo sistema físico estudiado con DDSCAT: una monocapa periódica cuadrada de nanopartículas esféricas de oro de radio 5 nm inmersas en agua, variando únicamente la periodicidad lateral para modificar el acoplamiento electromagnético entre partículas.

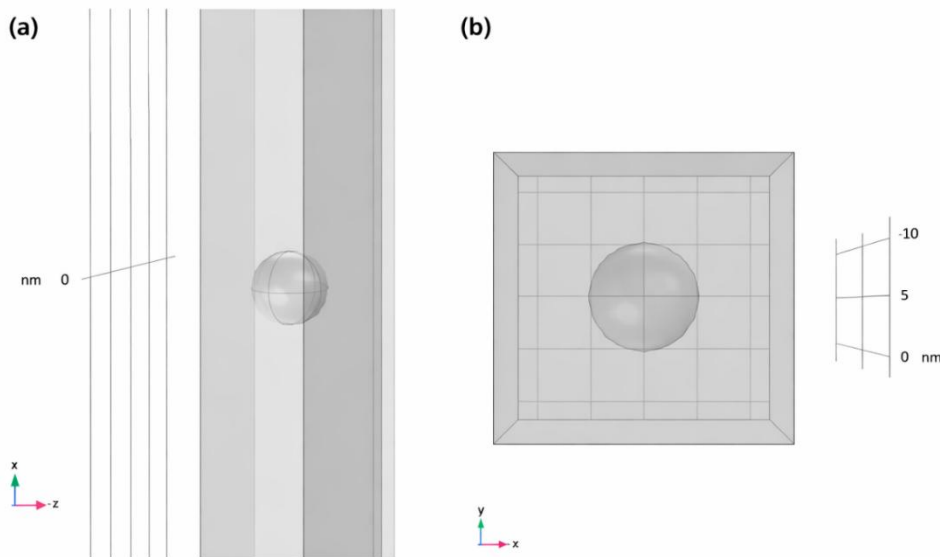


Figura 2. Representación de la celda unitaria utilizada en COMSOL Multiphysics para modelar un arreglo periódico de nanopartículas de Oro inmersas en Agua. (a) Vista lateral mostrando el dominio de la matriz rodeando la nanopartícula y la nanopartícula esférica. (b) Vista superior que ilustra la nanopartícula y la longitud de la celda.

En la definición de materiales, el dominio esférico se asignó a Au (Johnson and Christy 1972: n, k 0.188–1.937), es decir, se utilizó en COMSOL una función óptica tabulada para el oro basada en los datos experimentales de Johnson y Christy. El resto del dominio se asignó al material agua, de modo que la partícula metálica quedó embebida completamente en una matriz dieléctrica homogénea. Esta configuración asegura correspondencia física con el modelo implementado en DDSCAT, donde igualmente se consideró oro inmerso en agua. La excitación electromagnética se planteó en el dominio de la frecuencia mediante un campo eléctrico incidente de amplitud $E_0 = 1 \text{ V/m}$, con ángulo de incidencia inicial $\theta_i = 0^\circ$, lo que corresponde a incidencia normal sobre la monocapa (dirección

especular del haz incidente). El intervalo espectral considerado fue de 400 a 900 nm, de manera consistente con el rango simulado en DDSCAT, con el fin de comparar directamente los espectros de reflectancia y transmitancia obtenidos con ambos enfoques numéricos

Desde el punto de vista electromagnético, el modelo incluyó dos puertos, identificados como Puerto 1 y Puerto 2, junto con dos condiciones periódicas laterales. Esta estructura del modelo indica que la propagación de la onda se resolvió a lo largo de la dirección longitudinal de la celda, mientras que las caras laterales se acoplaron mediante periodicidad para reproducir un arreglo infinito en dos dimensiones. En este esquema, un puerto actúa como superficie de entrada del haz incidente y el otro como superficie de salida, permitiendo determinar las fracciones de potencia reflejada y transmitida a partir de las amplitudes de los modos electromagnéticos en cada extremo del dominio. La presencia de condiciones periódicas laterales resulta esencial para representar una monocapa infinita de partículas sin necesidad de modelar explícitamente múltiples celdas. En términos físicos, esta estrategia equivale a resolver la interacción de una onda plana con una red cuadrada infinita de nanopartículas metálicas, dentro de una formulación de elemento finito en frecuencia. A partir de la solución compleja del campo eléctrico en cada longitud de onda, COMSOL permite obtener magnitudes derivadas como transmitancia y reflectancia espectral. En este trabajo, el modelo se utilizó como referencia numérica para comparar con los resultados obtenidos mediante DDSCAT, particularmente en la posición, forma y amplitud de los espectros $R(\lambda)$ y $T(\lambda)$ para dos fracciones de cubierta a 1% y a 15%.

En la configuración correspondiente al 1 % de fracción de cubierta, el período lateral grande implica un acoplamiento electromagnético relativamente débil entre nanopartículas, de modo que la respuesta óptica está más dominada por la nanopartícula individual y por el medio circundante. En contraste, en la configuración del 15 %, la reducción del período lateral incrementa la proximidad entre partículas y, por consiguiente, intensifica el acoplamiento entre plasmones localizados, lo que puede modificar tanto la reflectancia como la transmitancia espectral del arreglo. Esta comparación entre dos densidades superficiales permite analizar de forma directa el efecto de la periodicidad sobre la respuesta óptica colectiva del sistema.

Resultados y discusión

En esta sección se presentan y analizan los resultados obtenidos para la respuesta óptica espectral de una monocapa periódica de nanopartículas esféricas de oro de radio 5 nm inmersas en una matriz de agua. El estudio se realizó mediante dos enfoques numéricos distintos: el método de elemento finito,

implementado en COMSOL Multiphysics, y la aproximación de dipolos discretos (DDA), implementada en el código abierto DDSCAT. Con el propósito de evaluar la consistencia entre ambos métodos y analizar el efecto de la densidad superficial de nanopartículas, se consideraron dos configuraciones caracterizadas por fracciones de cubierta del 1 % y 15 %.

En las figuras (3) y (4) se muestran los espectros de reflectancia y transmitancia, respectivamente, para una monocapa con partículas de Oro a una fracción de cubierta del 1%. Las dos simulaciones, realizadas en COMSOL y DDSCAT, muestran el mismo comportamiento espectral general, lo cual es un resultado importante porque indica que ambos enfoques numéricos describen de manera consistente la respuesta óptica del sistema. En ambos casos se observa una región resonante en la parte visible del espectro, centrada alrededor de 520–536 nm, que corresponde a la resonancia plasmónica localizada de superficie de las nanopartículas esféricas de oro inmersas en agua. Esta resonancia se manifiesta de forma complementaria en ambas magnitudes: en la reflectancia aparece como un máximo, mientras que en la transmitancia se observa como un mínimo.

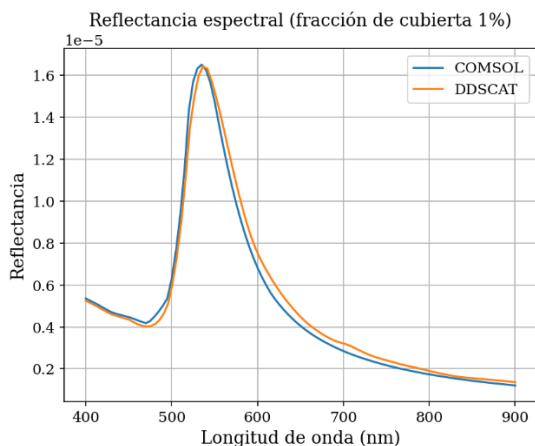


Figura 3. Reflectancia espectral (COMSOL vs DDSCAT).

En la curva de reflectancia, el máximo se localiza en 535.0 nm para COMSOL y en 536.36 nm para DDSCAT, con valores muy próximos, del orden de 1.65×10^{-5} y 1.64×10^{-5} , respectivamente. Esta coincidencia en la posición espectral del pico es especialmente relevante, ya que muestra que ambos métodos capturan de forma muy similar la condición resonante del sistema, véase Fig. 3. La diferencia entre ambas longitudes de onda es de apenas ≈ 1.4 nm, lo cual puede considerarse excelente concordancia para dos metodologías numéricas distintas. En la transmitancia ocurre el comportamiento complementario. El mínimo se encuentra en 520.0 nm para COMSOL y en 521.21 nm para DDSCAT, con valores de aproximadamente 0.99358 y 0.99352, respectivamente. Nuevamente, la coincidencia es muy buena. Esto confirma que la energía incidente interactúa con mayor intensidad con la monocapa en

esa región espectral, produciendo una disminución de la potencia transmitida y, al mismo tiempo, un incremento de la respuesta resonante del sistema.

Otro aspecto importante es que, aunque la posición de la resonancia coincide muy bien, existen pequeñas diferencias en la forma y amplitud de las curvas, sobre todo después de la resonancia, aproximadamente entre 550 y 700 nm. En esa región, DDSCAT tiende a predecir una reflectancia ligeramente mayor y una transmitancia ligeramente menor que COMSOL. La máxima diferencia absoluta en transmitancia ocurre cerca de 550 nm y es de alrededor de 8.4×10^{-4} , mientras que en reflectancia las discrepancias son mucho menores en valor absoluto. Estas diferencias son razonables y físicamente esperables, ya que ambos métodos resuelven el problema electromagnético con formulaciones distintas: COMSOL utiliza una discretización continua por elemento finito del dominio, mientras que DDSCAT reemplaza la nanopartícula por un arreglo finito de dipolos polarizables. Por ello, pequeñas variaciones en la discretización geométrica, en el tratamiento de la periodicidad o en la representación del material pueden reflejarse en la amplitud de las curvas, aun cuando la física principal quede correctamente descrita. Desde el punto de vista energético, las curvas sugieren que la monocapa con 1 % de fracción de cubierta es un sistema altamente transmisivo en todo el intervalo espectral analizado. La transmitancia permanece muy cercana a la unidad y la reflectancia es extremadamente pequeña en todo el rango de 400 a 900 nm. Esto indica que, para esta densidad superficial baja, la monocapa actúa como una perturbación óptica débil sobre la propagación de la luz. Sin embargo, la presencia de una resonancia bien definida demuestra que incluso una cobertura superficial reducida conserva la firma plasmónica característica del oro nanoestructurado.

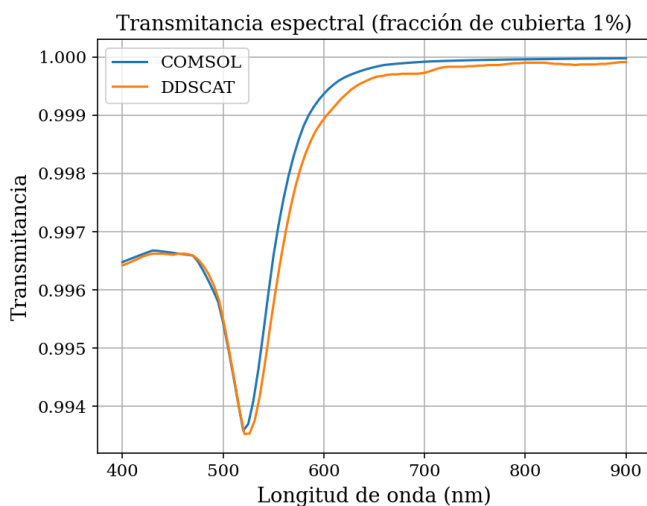


Figura 4. Transmitancia espectral (COMSOL vs DDSCAT).

En las figuras (5) y (6) se muestran los espectros de reflectancia y transmitancia, respectivamente, para una monocapa con partículas de Oro a una fracción de cubierta del 15%. Como en el caso anterior, tanto COMSOL como DDSCAT vuelven a reproducir el mismo comportamiento espectral global, lo cual confirma que ambos métodos describen de manera consistente la respuesta óptica del sistema aun cuando la interacción entre partículas se vuelve más intensa. En ambas simulaciones aparece una resonancia bien definida en la región visible, asociada a la resonancia plasmónica localizada de superficie de las nanopartículas de oro inmersas en agua. Esta resonancia se manifiesta nuevamente como un máximo en la reflectancia y un mínimo en la transmitancia, pero ahora con una intensidad mucho mayor que en la configuración de 1 %.

En la reflectancia, el máximo ocurre en 540.0 nm para COMSOL y en 541.41 nm para DDSCAT, con valores de aproximadamente 0.00407 y 0.00397, respectivamente. La diferencia en posición espectral es de apenas ≈ 1.4 nm, lo cual representa una concordancia muy buena entre ambos métodos. Además, comparado con el caso de 1 %, la reflectancia máxima aumenta de manera muy importante: pasa de valores del orden de 10^{-5} a valores del orden de 10^{-3} . Este incremento de más de dos órdenes de magnitud indica que, al reducir la separación entre partículas, el arreglo adquiere una respuesta colectiva mucho más intensa frente al campo incidente.

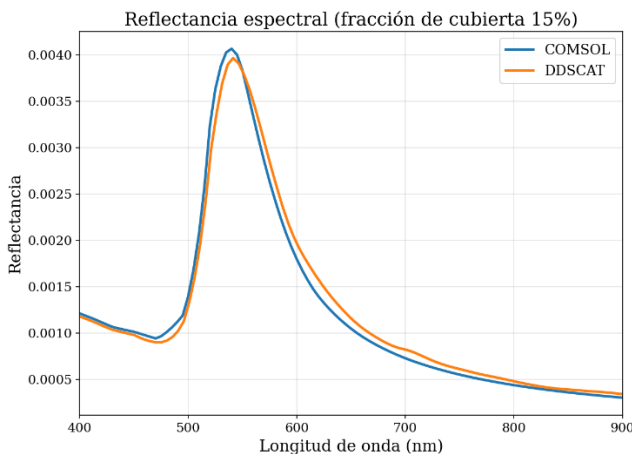


Figura 5. Reflectancia espectral (COMSOL vs DDSCAT).

En la transmitancia se observa el comportamiento complementario. El mínimo aparece en 525.0 nm para COMSOL y en 526.26 nm para DDSCAT, con valores cercanos a 0.89940 y 0.89917, respectivamente. Esta coincidencia vuelve a ser excelente. A diferencia del caso de baja cobertura, donde la transmitancia permanecía muy próxima a la unidad, aquí la monocapa introduce una atenuación óptica mucho más marcada alrededor de la resonancia. Esto significa que una fracción considerable de la energía

incidente deja de transmitirse en la región resonante debido al aumento de absorción y esparcimiento inducido por la interacción entre nanopartículas.

Un resultado particularmente importante es que la respuesta del sistema con 15 % de fracción de cubierta ya no corresponde a una perturbación débil del medio, sino a una monocapa con una firma óptica colectiva claramente observable. El aumento de la cobertura superficial reduce la distancia entre partículas y fortalece el acoplamiento electromagnético interpartícula, lo que intensifica la respuesta plasmónica del arreglo. En otras palabras, mientras que en el caso del 1 % predominaba el comportamiento casi independiente de las nanopartículas, en el 15 % comienza a manifestarse de manera mucho más evidente el carácter cooperativo de la monocapa periódica.

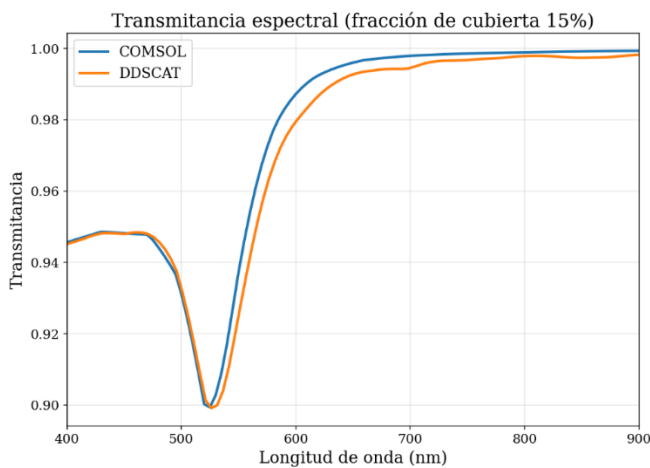


Figura 6. Reflectancia espectral (COMSOL vs DDSCAT).

También es relevante notar que, aunque la posición de la resonancia coincide muy bien en ambos métodos, existen diferencias más apreciables en la forma de las curvas después de la resonancia, especialmente entre 550 y 650 nm. En esa región, DDSCAT predice una reflectancia ligeramente menor en la vecindad inmediata del pico, pero una cola espectral algo más alta a longitudes de onda mayores; de forma consistente, también predice una recuperación más lenta de la transmitancia. La discrepancia máxima en transmitancia ocurre cerca de 555 nm y es de aproximadamente 0.0127, mientras que en reflectancia la diferencia máxima es mucho menor, alrededor de 3.8×10^{-4} , cerca de 520 nm. Estas diferencias son razonables y pueden atribuirse a la distinta naturaleza de ambos enfoques numéricos: cuando la fracción de cubierta aumenta y el acoplamiento entre partículas se vuelve más fuerte, estas diferencias de formulación tienden a reflejarse con mayor claridad en la amplitud y anchura de las curvas.

En conjunto, estos resultados indican que la monocapa con 15 % de fracción de cubierta presenta una respuesta óptica mucho más intensa que la correspondiente al 1 %, tanto en reflectancia como en

transmitancia. Al mismo tiempo, la buena coincidencia entre COMSOL y DDSCAT en la posición de los extremos espectrales confirma que el método DDA es capaz de reproducir adecuadamente la física principal del sistema incluso en un régimen donde el acoplamiento colectivo entre partículas comienza a ser importante. Las discrepancias observadas en amplitud no cambian la interpretación global del fenómeno, sino que aportan información valiosa sobre las diferencias entre ambos enfoques numéricos cuando se modelan arreglos periódicos más densos.

Conclusiones

En este trabajo se investigó la respuesta óptica de una monocapa periódica de nanopartículas esféricas de oro de radio 5 nm inmersas en agua mediante dos enfoques numéricos diferentes: el método de elemento finito implementado en COMSOL Multiphysics y la aproximación de dipolos discretos implementada en el código abierto DDSCAT. El análisis se realizó en el intervalo espectral de 400 a 900 nm para dos configuraciones geométricas caracterizadas por fracciones de cubierta superficial del 1 % y 15 %, lo que permitió explorar el efecto de la densidad de nanopartículas en la respuesta óptica del sistema. Los resultados obtenidos muestran que ambos métodos reproducen de manera consistente las características espectrales fundamentales asociadas a la resonancia plasmónica localizada de superficie de las nanopartículas de oro. En particular, se observa una excelente concordancia entre COMSOL y DDSCAT en la posición espectral del máximo de reflectancia y del mínimo de transmitancia, con diferencias del orden de uno o dos nanómetros. Esta coincidencia confirma que el método DDA implementado en DDSCAT es capaz de capturar adecuadamente la física dominante del sistema, incluso cuando se modelan arreglos periódicos de nanopartículas. El estudio también pone de manifiesto el papel fundamental de la fracción de cubierta superficial en la respuesta óptica colectiva de la monocapa. Para la configuración con 1 % de cobertura, el sistema presenta una reflectancia extremadamente baja y una transmitancia cercana a la unidad en todo el intervalo espectral, lo que indica que la monocapa actúa como una perturbación óptica débil dominada por la respuesta de nanopartículas prácticamente aisladas. En contraste, al aumentar la cobertura al 15 %, la reflectancia aumenta en varios órdenes de magnitud y la transmitancia presenta una disminución notable en la región resonante. Este comportamiento se atribuye al acoplamiento electromagnético entre nanopartículas vecinas, el cual intensifica la respuesta plasmónica y conduce a una interacción más fuerte con la radiación incidente. Las pequeñas discrepancias observadas entre las curvas obtenidas con COMSOL y DDSCAT se manifiestan principalmente en la amplitud y en la anchura de las resonancias, mientras que la posición espectral se mantiene prácticamente inalterada. Estas diferencias pueden explicarse por la naturaleza distinta de

ambos métodos numéricos: COMSOL resuelve las ecuaciones de Maxwell mediante una discretización continua del dominio, mientras que DDSCAT representa la partícula mediante un conjunto discreto de dipolos polarizables. A pesar de estas diferencias metodológicas, los resultados muestran una concordancia suficientemente buena para considerar a DDSCAT como una herramienta confiable para el estudio de sistemas nanoestructurados periódicos. Más allá de los resultados específicos obtenidos, este trabajo demuestra el potencial del software científico libre como una plataforma viable para desarrollar investigación en nanofotónica en contextos donde la infraestructura experimental es limitada. La posibilidad de realizar simulaciones avanzadas mediante herramientas abiertas como DDSCAT permite explorar fenómenos ópticos complejos, generar predicciones cuantitativas y proponer experimentos que pueden posteriormente validarse en laboratorios especializados. En este sentido, el presente estudio constituye uno de los primeros esfuerzos orientados a introducir este tipo de herramientas de simulación en el ámbito académico de la Huasteca Alta, particularmente en el Instituto Tecnológico Superior de Tantoyuca, abriendo la puerta a nuevas líneas de investigación en el estudio de la interacción entre la luz y la materia a escala nanométrica.

Referencias bibliográficas

- Amendola, V., Pilot, R., Frasconi, M., Maragò, O. M., & Iatì, M. A. (2017). Surface plasmon resonance in gold nanoparticles: A review. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 29(20), 203002. <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa60f3>
- Ball, J. M., & Li, W. (2024). Using high-resolution microscopy data to generate realistic structures for electromagnetic FDTD simulations. *Nature Protocols*. <https://doi.org/10.1038/s41596-023-00947-z>
- Barba, L. A. (2022). Defining the role of open source software in research reproducibility. *Computer*, 55(8), 40–48. <https://doi.org/10.1109/MC.2022.3177133>
- Draine, B. T., & Flatau, P. J. (1994). Discrete-dipole approximation for scattering calculations. *Journal of the Optical Society of America A*, 11(4), 1491–1499. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.11.001491>
- Draine, B. T., & Flatau, P. J. (2008). Discrete-dipole approximation for periodic targets: Theory and tests. *Journal of the Optical Society of America A*, 25(11), 2693–2703. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.25.002693>
- Fedeli, A., Montecucco, C., & Gragnani, G. L. (2019). Open-source software for electromagnetic scattering simulation. *Electronics*, 8(12), 1506. <https://doi.org/10.3390/electronics8121506>
- Flatau, P. J., & Draine, B. T. (2012). Fast near-field calculations in the discrete dipole approximation. *Optics Express*, 20(2), 1247–1252. <https://doi.org/10.1364/OE.20.001247>

- Ince, D. C., Hatton, L., & Graham-Cumming, J. (2012). The case for open computer programs. *Nature*, 482, 485–488. <https://doi.org/10.1038/nature10836>
- Jain, P. K., Lee, K. S., El-Sayed, I. H., & El-Sayed, M. A. (2006). Calculated absorption and scattering properties of gold nanoparticles. *Journal of Physical Chemistry B*, 110, 7238–7248. <https://doi.org/10.1021/jp057170o>
- Kelly, K. L., Coronado, E., Zhao, L. L., & Schatz, G. C. (2003). Optical properties of metal nanoparticles. *Journal of Physical Chemistry B*, 107, 668–677. <https://doi.org/10.1021/jp026731y>
- Lalanne, P., Yan, W., Vynck, K., Sauvan, C., & Hugonin, J.-P. (2018). Light interaction with photonic and plasmonic resonances. *Laser & Photonics Reviews*, 12(5), 1700113. <https://doi.org/10.1002/lpor.201700113>
- Marcheselli, J., Chateau, D., Lerouge, F., et al. (2020). Simulating plasmon resonances of gold nanoparticles with boundary element methods. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 16, 3807–3815. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.0c00269>
- Myroshnychenko, V., Rodríguez-Fernández, J., Pastoriza-Santos, I., et al. (2008). Modelling the optical response of gold nanoparticles. *Chemical Society Reviews*, 37, 1792–1805. <https://doi.org/10.1039/B711486A>
- Oskooi, A. F., Roundy, D., Ibanescu, M., et al. (2010). Meep: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method. *Computer Physics Communications*, 181, 687–702. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2009.11.008>
- Reid, M. T. H., White, J., & Johnson, S. G. (2015). Efficient evaluation of Galerkin integrals in boundary element computations. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 63, 195–209. <https://doi.org/10.1109/TAP.2014.2367492>
- Wang, X., Gogol, P., Cambri, E., & Palant, B. (2012). Near- and far-field plasmon coupling in gold nanoparticle arrays. *Journal of Physical Chemistry C*, 116, 24741–24747. <https://doi.org/10.1021/jp306292r>
- Yurkin, M. A., & Hoekstra, A. G. (2007). The discrete dipole approximation: An overview. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 106, 558–589. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2007.01.034>
- Yurkin, M. A., Semyanov, K. A., Tarasov, P. A., et al. (2005). Experimental and theoretical study of light scattering by red blood cells. *Applied Optics*, 44, 5249–5256. <https://doi.org/10.1364/AO.44.005249>

COMSOL Multiphysics®. (2022). COMSOL Multiphysics Reference Manual (Version 6.0). COMSOL AB.

Johnson, P. B., & Christy, R. W. (1972). Optical constants of the noble metals. *Physical Review B*, 6(12), 4370–4379. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.6.4370>