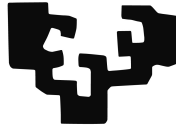


eman ta zabal zazu



Universidad
del País Vasco

Euskal Herriko
Unibertsitatea

Fisikako gradua

Gradu Amaierako Proiektua

Nanoantena Plasmonikoak

Autor

Imanol Uria

2015

Laburpena

Nanoantena plasmonikoak antena optikoak dira, hau da, irrati-uhin edo mikrouhin-antenen moduan, espazioan hedatzen den erradiazio elektromagnetikoa energia lokalizatu bilakatzeko dute eta alderantziz. Hala ere, antena konbentzionalak ez bezala, antena optikoak espektro ikusgai eta infragorrian propietate erresonanteak dituzten egitura isolatuak dira, eta ez dira zirkuitu elektronikoen bidez elikatzen. Erresonantzia plasmoiak baliatuz, antena hauek eremu elektromagnetikoak konfinatzeko eta indartzeko ahalmen handia dute, aplikazio desberdinetarako oso interesgarriak direlarik, hala nola nanoeskalako mikroskopio eta espektroskopia optikoa, eguzki-energiaren transformazioa, zirkuitu optikoak, sentsoreak...

Lan honetan antenarik sinpleena, nanopartikula esferiko metalikoa, aukeratu da antena optikoen oinarriko propietateak aztertzeko. Kasu honetan adierazpen analitikoak (Mie teoria) erabili daitezke argiaren sakabanaketa deskribatzeko, baina antena asimetrikoagoen kasuan metodo numerikoak erabili behar dira ezinbestean. Bukaeran MNPBEM metodoa erabili da dimero-antena baten jokabidea simulatzeko.

Gaien aurkibidea

Laburpena	i
1 Sarrera	1
2 Oinarri teorikoa	5
2.1 Uhin-elektromagnetikoen sakabanaketa: problema orokorra	5
2.2 Druderen eredua eta funtzio dielektrikoa: plasmoiak	7
2.3 Partikula esferiko txiki baten plasmoi-erresonantziak. Hurbilketa kuasi-estatikoa.	10
2.4 Mie sakabanaketa	14
2.4.1 Esfera baten xurgapena eta sakabanaketa	14
2.4.2 Sekzio eragileak	18
3 Emaitzak eta analisisia	21
3.1 Nanopartikula metalikoak	21
3.2 Nanopartikula dielektrikoak	25
3.3 Dimeroa: kalkulu numerikoak MNPBEM erabiliz	30
4 Ondorioak	33
Eranskinak	

A	Mie koefizienteen ebazpena.	A-1
A.1	Esfera baten xurgapena eta sakabanaketa	A-1
A.1.1	Barne eta sakabanatutako eremuak	A-3
B	Simulazioak. Matlab programak	B-1
B.1	Errefrakzio-indizeak	B-1
B.2	Qsca-Qeff kalkulua erradio eta uhin-luzera ezberdinetarako	B-2
B.3	Eremu elektromagnetikoaren banaketa espaziala	B-4
B.4	Eremu elektromagnetikoaren banaketa angeluarra	B-5

Irudien aurkibidea

1.1	<i>Sparkmuseum-en dagoen Hertzen antena. (Jatorria www.sparkmuseum.com)</i>	1
1.2	<i>Espetro elektromagnetikoa eta maiztasun desberdinetan erabiltzen diren antenen lau adibide.</i>	2
1.3	<i>Ezkerrean antena optiko baten eskema [1]. Eskuman gezi berdeak dipolo elektrikoaren norabidea azaltzen du. Esfera grisak $kr = 1$ mugaldea erakusten du, eta eremu hurbila eta urruna banatzen ditu. Koordinatu-sistema esferikoa ere agertzen da, k uhin bektorea izanik [2].</i>	4
2.1	<i>Argiaren sakabanaketaren eskema orokorra</i>	6
2.2	<i>Ag-ren funtzio dielektrikoa Druderen funtzioarekin, (2.12) ekuazioaz kalkulaturik. Urdinez zati erreala eta laranja irudikaria. ($E_p = \hbar\omega_p = 7.44\text{eV}$, $\gamma = 0.062\text{eV}$). Unitate atomikoetan $\hbar = 1$ da, eta hemendik aurrera $E_p = \omega_p$ izango da.</i>	9
2.3	<i>a) Metal bateko plasmioen oszilazioaren eskema. b) Nanopartikula metaliko baten gainazaleko plasmoi lokalizatuen eskema [2].</i>	9
2.4	<i>X-ardatzean polarizatutako uhin lauaz argizatutako partikula esferikoa eta induzitutako momentu dipolarra.</i>	10
2.5	<i>X-ardatzean polarizatutako uhin lauaz argizatutako partikula esferikoan induzituriko eremu elektrikoa. MATLAB programaren bidez egindako grafikoa. ($a = 70\text{ nm}$, $\epsilon_1 = -18$, $\epsilon_2 = 2.25$)</i>	12
2.6	<i>Sakabanaketako sekzio eragile normalizatua uhin-luzeraren funtzioan $a = 120\text{ nm}$-ko Ag esferarako.</i>	13
2.7	<i>Eguzkitik datorren argiaren sakabanaketaren eskema atmosferan.</i>	14

2.8	<i>a</i> erradioko partikula esferiko batean zentratutako koordinatu-sistema esferikoa (r, θ, ϕ). Geziek uhin-bektorearen norazkoa adierazten dute.	15
3.1	Errefrakzio indizea n eta xurgapen koefizientea κ uhin-luzeraren arabera, Ag kasurako Drude funtzioak emandakoa eta esperimentalak (Rakic [3]). $E_p = \hbar\omega_p = 7.44 \text{ eV}$, $\gamma = 0.062 \text{ eV}$	22
3.2	Zilarrezko $a = 10 \text{ nm}$ -ko (ezkerrean) eta $a = 150 \text{ nm}$ -ko (eskuman) nanopartikula esferikoetako sakabanatze sekzio eragilea Druderen ereduarekin lortutako errefrakzio indizeekin.	22
3.3	Erradio ezberdinetako Ag nanopartikula esferikoen a) sakabanaketako sekzio eragile normalizatua eta b) sakabanatze-efizientzia normalizatua Druderen ereduarekin lortutako errefrakzio indizearekin (3.1 irudia).	23
3.4	Zilarrezko 120nm -ko erradiodun nanopartikula esferikoaren sakabanaketako sekzio eragile normalizatua Druderen ereduarekin lortutako errefrakzio indizearekin. Ezkerrean dipolo, kuadrupolo eta hexapolo elektrikoak eta eskuman magnetikoak, baturaz gain (hexapolo magnetikoa ez da ia ikusten oso balio baxuak dituelako).	24
3.5	Zilarrezko 120nm -ko erradiodun nanopartikula esferikoaren kasurako eremu elektrikoaren banaketa (eraso argia ezkerretik) espaziala modo dipolar, kuadrupolar, hexapolar eta oktopolarerako ($686, 425, 340$ eta 296 nm).	24
3.6	Zilarrezko 120 nm -ko erradiodun nanopartikula esferiko baten eremu elektriko (ezkerra) eta magnetikoaren (eskuma) banaketa espaziala dipolo elektrikoaren erresonantzian ($\lambda = 296 \text{ nm}$). Ohartu eremu magnetikoaren intentsitatea askoz ere txikiagoa dela.	25
3.7	Sakabanaketa-banaketa angeluarra $a = 120 \text{ nm}$ -ko Ag esferarentzat. Dipolo a), kuadrupolo b), hexapolo c) eta oktapolo d) modoen ekarpenak (eraso uhina ezkerretik dator).	26
3.8	Nanopartikula dielektriko esferiko baten kasurako sakabanaketako sekzio eragile normalizatua ($a = 150 \text{ nm}$, $n = 2$ eta $k = 0$), uhin-luzera ezberdinetarako.	26
3.9	Erradio ezberdinetako esfera dielektrikoen (Si_3N_4) sakabanatze sekzio eragile normalizatua uhin-luzera ezberdinetarako.	27

3.10	<i>Nanopartikula dielektriko ($a = 170 \text{ nm}$, $n = 2$, $k = 0$) esferiko baten kasurako sakabanaketako sekzio eragile normalizatua. Ezkerrean dipolo, kuadrupolo, hexapolo eta oktapolo elektrikoak eta eskuman magnetikoak, baturaz gain.</i>	28
3.11	<i>Eremu elektriko eta magnetikoaren banaketak (eraso argia ezkerretik) espaziala kasu dipolar, kuadrupolar, hexapolar eta oktopolarrerako. Ezkerrean eremu elektrikoaren intentsitatea, eskuman magnetikoarena. Maximo nagusien uhin-luzeretarako irudikatu dira biak ($\lambda = 700, 502, 392$ eta 322 nm-etarako). Ezkerreko irudian koloreak saturatu dira modoak argiago ikusteko.</i>	28
3.12	<i>Sakabanaketa banaketa angeluarra $a = 170 \text{ nm}$, $n = 2$-ko esfera dielektrikoarentzat $\lambda = 700 \text{ nm}$-rako. Dipolo magnetikoaren erresonantzia ondo ikusten da.</i>	29
3.13	<i>Sakabanaketa-banaketa angeluarra $a = 170 \text{ nm}$-ko erradioko eta $n = 2$-ko esfera dielektrikoarentzat. Dipolo a), kuadrupolo b), hexapolo c) eta oktapoloa d)(eraso uhina ezkerretik dator).</i>	29
3.14	<i>Sakabanaketako sekzio eragilea $a = 120 \text{ nm}$-ko zilarrezko nanopartikula esferiko batentzako, Druderen funtzioak emandako funtzio dielektrikoa erabiliz.</i>	30
3.15	<i>Sakabanaketako sekzio eragile normalizatua 10 nm-ko tartean banandutako $a = 120 \text{ nm}$-ko zilarrezko bi nanopartikula esferikorentzako (funtzio dielektrikoa Druderen funtzioak emana).</i>	31
3.16	<i>Eremu elektrikoaren intentsitatea 10 nm-ko tartean banandutako $a = 120 \text{ nm}$-ko zilarrezko bi nanopartikula esferikorentzako, funtzio dielektrikoa Druderen funtzioak emana izanik; ezkerrean modo dipolarraren erresonantzia ($\lambda = 843 \text{ nm}$) eta eskuman modo kuadrupolarrarena ($\lambda = 545 \text{ nm}$).</i>	32
3.17	<i>Aurreko irudiko (3.16 irudia) bi esferen arteko zonaldea handituta</i>	32

1. KAPITULUA

Sarrera

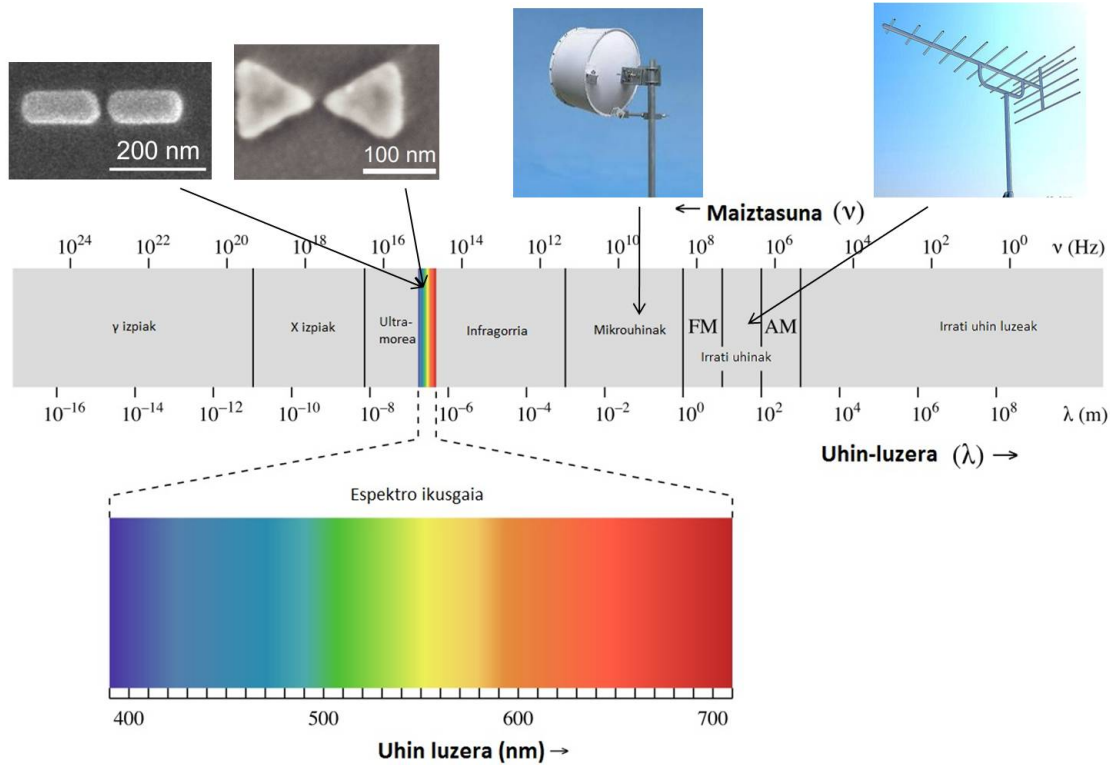
Antenak uhin elektromagnetikoak (EM) igorri zein jasotzeko gailuak dira. Zentzu makroskopikoan antena igorlea energia elektrikoa uhin elektromagnetiko bihurtzen duen gailuari deritzo, eta hargailua aurkako funtzioa egiten duenari. Historian lehen aurrerapausua Hertzek eman zuen XIX. mendearen bukaeran, elkarrengandik bananduta zeuden bi esferetan zehar karga oszilakorrak garraiaraziz lehen erradiazio erabilgarria sortuz (1.1 irudia). Gaur egun oso garrantzitsuak dira antenak, haririk gabeko espazioan informazio kodetua garraiatzea ahalbidetzen baitute. Maiztasun ezberdinetarako erabiltzen diren antenen irudiak 1.2 irudian ikus daitezke.



1.1 Irudia: *Sparkmuseum-en dagoen Hertz-en antena. (Jatorria www.sparkmuseum.com)*

Perturbazio elektromagnetikoen iturri ezagunena harmonikoki oszilatzen duen dipoloa da, zeina hari baten bidez lotutako bi esfera metalikoren bidez eraiki daitekeen. Hasieran esferetako bat karga negatiboarekin eta bestea positiboarekin jarriz gero, sistema oszilatzen

hasiko da $\omega_0 = 1/\sqrt{LC}$ erresonantzia-maiztasunarekin esponentzialki indargetuz, non L eta C sistemaren induktantzia eta kapazitatea diren hurrenez hurren.



1.2 Irudia: *Espektrua elektromagnetikoa eta maiztasun desberdinetan erabiltzen diren antenen lau adibide.*

Zientzia eta ingeniaria optikoan argia izpilu, leiar edo gailu difraktatzaileen bidez kontrolatu eta bideratu ohi da. Manipulazio hau eremu elektromagnetikoen uhin-izaeran oinarritzen da, eta ez da eraginkorra izaten argiaren uhin-luzerako eskalaren azpian lan egitea difrakzio-muga dela eta. Aldiz, irrati-uhin eta mikrouhinetan antenak eremu elektromagnetikoak manipulatzeko erabiltzen dira era eraginkorren.

Eskuko telefono mugikorretan eta telebistetan antenen bidezko teknologia garrantzi handikoa bada ere, haien parekide optikoa ez da oraindik praktikan existitzen. Hala ere, gaur eguneko nano-optika eta plasmonikako ikerkuntzak *antena optikoen* kontzeptuan interes handia sortu du, irrati-uhin eta mikrouhin antenen teoria maiztasun optikoetara nola bideratu aztertzen ari delarik.

Teknologian antena optikoen ausentzia hauen eskala txikiagatik da batik-bat. Antenek argiaren uhin-luzeraren ordenako dimentsioak izan behar dituzte, 10 nm-tik gorako zehaztasunekin [1].

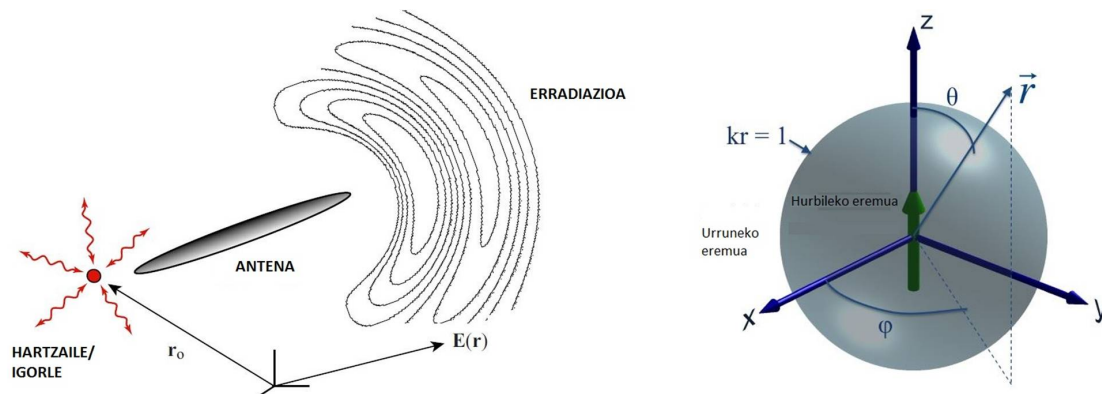
Antenak erresonantzia-maiztasun optikoetan lan egitea nahi izanez gero (1.2 irudia, 400 – 700 nm), L eta C moldatu beharra dago; hori lortzeko, bai L eta bai C , oso txikiak egin behar dira¹, metalaren dimentsioak izugarri txikituz. Baina tarte optikoan erresonantze-ko beste txikitzean metalek jadanik ez dute eroale perfektu bezala jokutzen. Eroankortasun-elektroien eta maiztasun baxu eta altuko uhin EM-en arteko elkarrekintzaren ezberdintasun nagusia elektroien masa finituan datza. Masa efektibo honek elektroiak fase-atzerapenarekin erreakzionatzea dakar maiztasuna handitzean. Jokamolde hau bat dator kanpo-eremu baten menpe malguki bati lotuta oszilatzen duen masaren ereduarekin. Kasu honetan, berriz, indarra coulombiarra da eta indar berreskuratzailea metalaren ioi egonkorrek eragindako ekarpena da. Maiztasun baxuetan elektroiek kitzikapena darraie fase-atzerapenik gabe; maiztasuna handitzean, berriz, oszilazio-anplitudearen handipena erakusten dute fase-atzerapenarekin batera. fase-atzerapena 90° -ra hurbiltzen denean karga-oszilazioaren anplitudea maximora doa eta soilik sistemaren barne-indargetzeak mugaturik dago. Nanopartikula metalikoetan, erresonantzia hau lokalizatutako plasmoin erresonantziari dagokio, zeina metal batzuen kasuan (urrea, zilarra, aluminioa eta kobrea, besteak beste) espektroaren tarte ikusgai (edo gertu) agertu ohi den.

Erresonantzia-maiztasunak ez dira eroale “perfektuetan” agertzen (maiztasun baxuko metaletan), material hauetan definizioz ez baita kitzikapena eta karga erantzunaren artean fase-atzerapenik existitzen.

Aurrerago ikusiko den bezala, antena optikoen gaitasuna dute (i) erradiazio EM-a oso dimentsio txikietan metatzeko eta (ii) iturri lokalizatuetatik eremu urrunean (1.3 irudia) erradiazioa oso modu eraginkorrean askatzeko, beraz oso erabilgarriak izan daitezke nano-materia eta argiaren arteko elkarrekintza baliatzeko. Are gehiago, badakigu zenbat eta maiztasun handiagoa izan, orduan eta informazio gehiago kodetu daitekeela; hori dela eta gaur egun uhin-luzera ikusgaia eta infragorria erabiltzen dira abiadura handiko komunikazio-sareetan. Horretarako garrantzitsuak izango dira nanoantena, erradiazio optiko hori garraiatzeko, hain zuzen ere [4].

Antena hauen aplikazio ezberdinen artean, azpimarratzekoa da adibidez espektroskopia. Plasmoiekin erlazionatutako eremu elektromagnetikoaren konfinazio eta handipena dela eta, oso onuragarriak izan daitezke espektroskopia infragorrian eta Raman espektroskopian, hauen seinaleak eremu elektromagnetikoen intentsitatean oinarritzen baitira. Gaur egun erabiliak *Surface-enhanced Raman scattering (SERS)* (“Gainazaleko Raman sakabanatze hobetua” eta *Surface-enhanced Infrared (IR) Absorption (SEIRA)* (“Infragorriko gainazaleko xurgapen hobetua” dira.

¹ λ uhin-luzera 600 nm inguru izateko $LC \approx 10^{-31} s^2$



1.3 Irudia: Ezkerrean antena optiko baten eskema [1]. Eskuman gezi berdeak dipolo elektrikoaren norabidea azaltzen du. Esfera grisak $kr = 1$ mugaldea erakusten du, eta eremu hurbila eta urruna banatzen ditu. Koordinatu-sistema esferikoa ere agertzen da, k uhin bektorea izanik [2].

Beste aplikazio garrantzitsu bat hurbileko-eremuko mikroskopia optikoa da. Nanopartikula metalikoen eremu hurbilaren erantzuna lortzeko teknika egokiena *Scattering-type near-field optical microscopy (SNOM)* (“sakabanaketako eremu hurbileko mikroskopia optikoa”) da; teknika optiko honekin difrakzio-muga gainditzen da gainazaleko plasmioen konfinatzeko gaitasunagatik.

Antenak aztertzerako orduan, beharrezkoa izango da partikula edo partikula sortek argiztatutakoan sakabanatutako eta xurgatutako erradiazioa aztertzea. Orokorrean sakabanatutako (“*scattered*”) eta xurgatutako erradiazioak ez dira uniformeak izango, norabide eta zonaldearen arabera aldatu egingo dira [2].

Hurrengo kapituluan uhin EM-en sakabanaketaren teoria aztertuko da eta partikula esferikoen kasuan aplikatuko da. Bide batez, plasmioen kontzeptua aztertuko da.

Hirugarren kapituluan MATLAB plataforman egindako programekin lortutako emaitzak erakutsi eta eztabaidatuko dira nanopartikula metaliko zein dielektrikoen kasuan. Bukarant MNPBEM toolbox erabiliz dimero baterako kalkulaturako sakabanaketa aurkeztuko da. Azkenik lanaren ondorio garrantzitsuenak deskribatuko dira.

2. KAPITULUA

Oinarri teorikoa

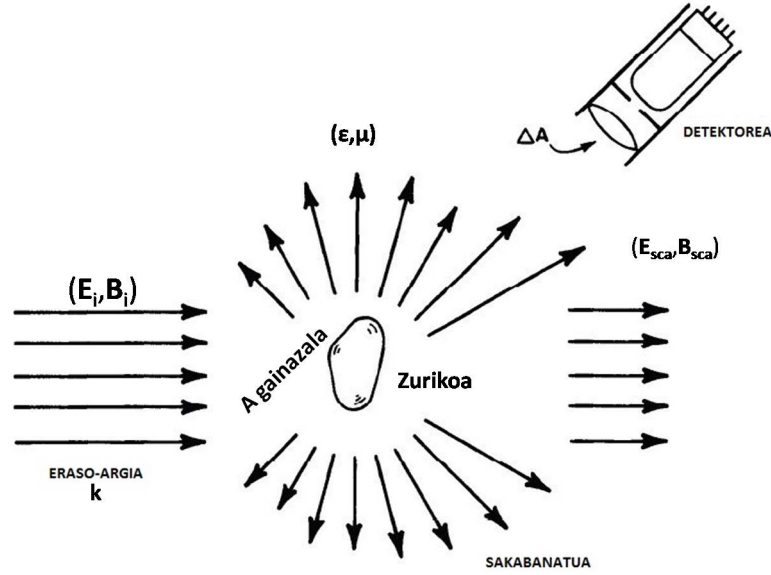
Antena plasmonikoekin hasi baino lehen zenbait kontzeptu aztertu beharra dago. Sarreran aipatu den moduan, antenen portaera aztertu ahal izateko partikula edo partikula multzo bat uhin elektromagnetikoekin erasotzen denean gertatzen diren sakabanaketa eta xurgapena aztertu beharko dira.

2.1 Uhin-elektromagnetikoen sakabanaketa: problema orokorra

Sakabanaketako fenomenoaren azterketan eraso-argiaren eremu elektriko eta magnetikoek objektu finitu batekin elkarrekintza dutenean indusitzen diren aldaketak kalkulatu dira. Hasteko 2.1 irudiko sistema aztertuko dugu ikuspuntu orokor batetik. Eraso-uhina uhin laua dela, $(\mathbf{E}_i, \mathbf{B}_i)$ eremuekin eta (ϵ, μ) permitibitate eta iragazkortasuna duen ingurunean hedatzen dela suposatuko dugu.

Demagun zurikoak A azalera duela (berdin dio eiteak) eta (ϵ_z, μ_z) permitibitatea eta iragazkortasuna. Sakabanatutako eremuak $(\mathbf{E}_{sca}, \mathbf{B}_{sca})$ objektu sakabanatzailetik kanpora hedatzen dira, eta urrunean aztertzen dira. Beraz espazioko puntu guztietan (A gainazaletik kanpo) eremu totalak definizioz ondorengoak dira:

$$\mathbf{E}_{tot} = \mathbf{E}_i + \mathbf{E}_{sca} \quad \mathbf{B}_{tot} = \mathbf{B}_i + \mathbf{B}_{sca}, \quad (2.1)$$



2.1 Irudia: Argiaren sakabanaketaren eskema orokorra

non $(\mathbf{E}_{tot}, \mathbf{B}_{tot})$ kanpoko eremu elektromagnetikoa den eta $(\mathbf{E}_i, \mathbf{B}_i)$ eraso eremu elektromagnetikoa.

Objektu sakabanatzailea, orokorrean, iraungikorra da eta eraso-uhinaren energia zati bat xurgatzen du. Energiaren kontserbazioa Poynting bektorearen bidez adierazten da:

$$\mathbf{S}_{tot} = \mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{sca} + \mathbf{S}_{ext}, \quad (2.2)$$

non $\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} \text{Re}(\mathbf{E}_i \times \mathbf{H}_i^*)$ eta $\mathbf{S}_{sca} = \frac{1}{2} \text{Re}(\mathbf{E}_{sca} \times \mathbf{H}_{sca}^*)$ erasoko eta sakabanaketako Poynting bektorearen denborarekiko batazbestekoak diren eta potentzia EM-aren jariora adierazten duten. $\mathbf{S}_{tot} = \frac{1}{2} \text{Re}(\mathbf{E}_{tot} \times \mathbf{H}_{tot}^*)$ gaiak sisteman hedatzen den energia osoa adierazten du, eta $\mathbf{S}_{ext} = \frac{1}{2} \text{Re}(\mathbf{E}_i \times \mathbf{H}_{sca}^* + \mathbf{E}_{sca} \times \mathbf{H}_i^*)$ gaia eraso-eremuek sakabanatutako eremuekin duten interferentziaren ondorio da.

Xurgatutako potentzia A gainazalean zehar sartzen den Poynting bektorea (\mathbf{S}_{tot}) integratuz lor daiteke:

$$P_{abs} = - \oint_A \mathbf{S}_{tot} \cdot \hat{n} da, \quad (2.3)$$

non \hat{n} A gainazalarekiko kanporakako bektore normala den eta da gainazal zati diferentziala. Sakabanatutako potentzia, A gainazalaren eta infinituaren artean iturririk ez dagoen

nez, Poynting bektorearen kanporazko osagaia integratuz kalkula daiteke era berean:

$$P_{sca} = \oint_A \mathbf{S}_{sca} \cdot \hat{n} da. \quad (2.4)$$

Bestalde uhin erasotzailea uhin laua denean $\oint_A \mathbf{S}_i \cdot \hat{n} da = 0$ denez, energiaren kontserbazioagatik $P_{ext} = P_{abs} + P_{sca}$ dela ondorioztatzen da, $P_{ext} = -\oint_A \mathbf{S}_{ext} \cdot \hat{n} da$ interferentzia gaiak sakabanaketa-prozesuan emandako potentzia iraungitzea izanik. Beraz hauxe da sakabanaketa eta xurgapenaren bidez energia erasotzailari kendutako.

Komenigarria da formula hauek eraso fluxuaren independenteak izatea; horretarako, uhin-lau baten azalera-unitateko potentzia $I_0 = E_0^2 \epsilon_0 \epsilon \omega / 2k = |S_i|$ baldin bada [5], E_0 eremu elektrikoaren intentsitatea, ϵ_0 hutsaren permitibitatea eta k uhin-lauaren uhin-bektorea izanik, xurgapen, sakabanatze eta suntsipen sekzio eragileak honela definitzen dira, hurrenez hurren:

$$\sigma_{abs} = \frac{P_{abs}}{I_0} \quad (2.5)$$

$$\sigma_{sca} = \frac{P_{sca}}{I_0} \quad (2.6)$$

$$\sigma_{ext} = \sigma_{abs} + \sigma_{sca} = \frac{P_{ext}}{I_0}. \quad (2.7)$$

Sekzio eragileen dimentsioa, beraz, azalerarena da. Izan ere, σ_{ext} sekzioak eremu EM-ek partikularekiko interakzioan nabaritzen duten azalera eraginkor osoa adierazten du.

Ohartu sekzio eragileak kalkulatzeko ez dugula objektu sakabanatzailearen barneko eremuen beharrik. Are gehiago, definizioek eraso eta sakabanaketa eremuak baino ez dituzte kontuan hartzen [5].

2.2 Druderen eredua eta funtzio dielektrikoa: plasmoiak

Objektu baten xurgapena eta sakabanaketa haren erantzun optikoarekin erlazionatuta daude. Maiztasun-banda zabalera batzuetarako, metalen propietate optikoak *plasma eredua*-rekin azal daitezke. Eredu honetan n dentsitate zenbakidun elektroigas askea geldi da goen ioi positiboz osatutako zonaldean higitzen da. Metal alkalinoetan hau ultramorean gertatzen da, metal nobleetan maiztasun optikoetan gertatzen den bitartean. Maiztasun

handiagoetarako materialaren banda elektronikoen arteko trantsizioek ekarpena dute erantzun dielektrikoan, eredu sinple hau baliagarri ez delarik. Plasma ereduaren sare-egituraren potentziala eta elektroiei elkarrekintza ez dira kontuan hartzen. Elektroiek kanpo EM baten menpe oszilatzen dutela, ioi positiboekin talka eginez, onartzen da. Elektroiek batek pairaturiko bi talkaren arteko batazbesteko denbora τ erlaxazio-denbora bezala ezagutzen da, eta talka-maiztasuna $\gamma = 1/\tau$.

Plasma gunean \mathbf{E} kanpo-eremuaren menpe dagoen elektroien baten higidura-ekuazioa honako eran adieraz daiteke:

$$\ddot{\mathbf{x}} + m\gamma\dot{\mathbf{x}} = -e\mathbf{E}, \quad (2.8)$$

non x elektroien desplazamendua eta m eta e elektroien masa eta karga diren hurrenez hurren. Denborarekiko menpekotasun harmonikoa onartuz gero $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t}$ eremua-erentzat (ω maiztasuna izanik), $\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_0 e^{-i\omega t}$ moduko soluzio partikularra saia dezakegu elektroien oszilazioak deskribatzeko. Hau aurreko ekuazioan sartuz emaitza hau lortzen da:

$$\mathbf{x}(t) = \frac{e}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)} \mathbf{E}(t). \quad (2.9)$$

Desplazaturako elektroiek $\mathbf{P} = -nex$ polarizazio makroskopikoa sortzen dute, esplizituki:

$$\mathbf{P} = -\frac{ne^2}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)} \mathbf{E}. \quad (2.10)$$

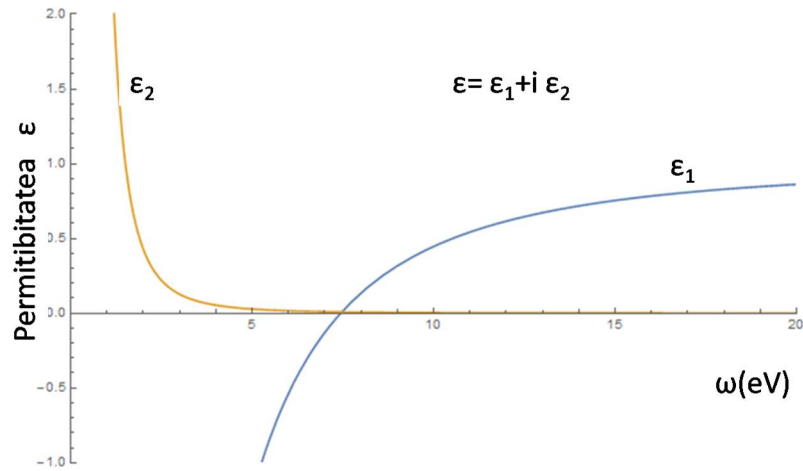
Adierazpen hau $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$ ekuazioan ordezkatuz:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega}\right) \mathbf{E}, \quad (2.11)$$

non $\omega_p^2 = \frac{ne^2}{\epsilon_0 m}$ eta ω_p elektroien gas askearen *plasma maiztasuna* den. Horrenbestez nahi genuen emaitzara iritsi gara, elektroien gas askearen funtzio dielektrikora, hain zuzen:

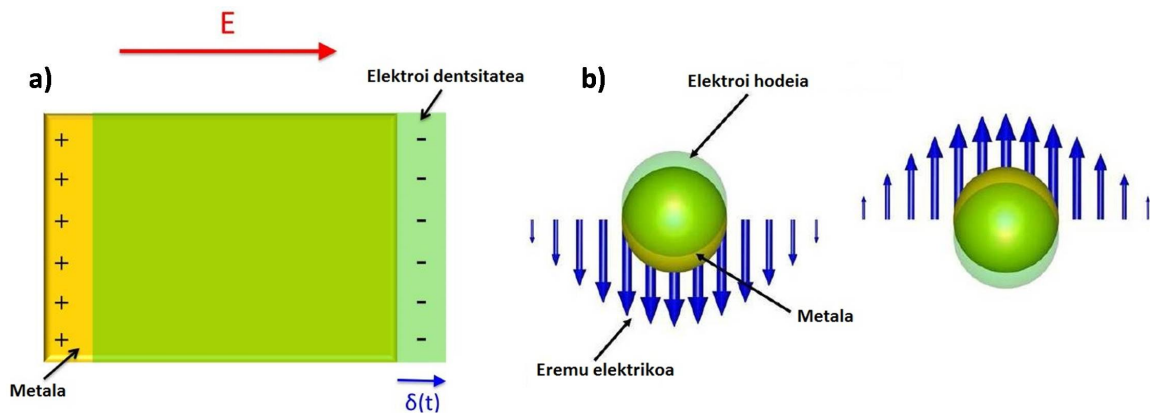
$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega}. \quad (2.12)$$

Adierazpen hau egokia da zenbait metal aztertzeko, eta Druderen funtzio dielektrikoa izenez ezaguna da [6].



2.2 Irudia: Ag-ren funtzio dielektrikoa Druderen funtzioarekin, (2.12) ekuazioaz kalkulaturik. Ur-dinez zati erreala eta laranja irudikaria. ($E_p = \hbar\omega_p = 7.44\text{eV}$, $\gamma = 0.062\text{eV}$). Unitate atomikoetan $\hbar = 1$ da, eta hemendik aurrera $E_p = \omega_p$ izango da.

Elektroi-gas idealaren kasuan, $\gamma = 0$ eginez, $\omega = \omega_p$ denean funtzio dielektrikoa $\epsilon(\omega) = 0$ da eta elektroien luzerako oszilazio kolektiboak gertatzen dira, plasmoiak deiturikoak (ikus 2.3 irudia). Oszilazio hauek objektu baten bolumenenean (bolumeneko plasmoiak) zein gainazalean gerta daitezke (gainazaleko plasmoiak). Gainazal lau infinituaren kasuan $\omega_p/\sqrt{2}$ maiztasunean gertatzen dira. Partikula metaliko itxi batean gertatzen diren oszilazioak gainazaleko plasmoi lokalizatuak (LSPs, *Localized Surface Plasmons*) deitzen dira (ikus 2.3 b) irudia).



2.3 Irudia: a) Metal bateko plasmoiaren oszilazioaren eskema. b) Nanopartikula metaliko baten gainazaleko plasmoi lokalizatuen eskema [2].

Bukatzeko, funtzio dielektrikoa $\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2$ osagai erreal eta konplexuan bananduz gero

(ikus 2.2 irudia), eta errefrakzio-indize konplexua $\tilde{n} = n + i\kappa$ bada, bien arteko erlazioak $\varepsilon = \tilde{n}^2$ -k ematen digu, n errefrakzio-indizea eta κ iraungitze-koefizientea izanik.

Azpimarratzekoa da material baten plasma-maiztasunaren gainetik, $\omega > \omega_p$, $\varepsilon > 0$ dela eta n erreala dela. Beraz gardena da, elektro-plasman uhin elektromagnetikoak (argia) hedatzen dira. Maiztasun horren azpitik, $\omega < \omega_p$, berriz $\varepsilon < 0$ eta n irudikaria da, eta uhin EM-ak iraungitzen dira metal perfektuetan bezala.

2.3 Partikula esferiko txiki baten plasmoi-erresonantziak.

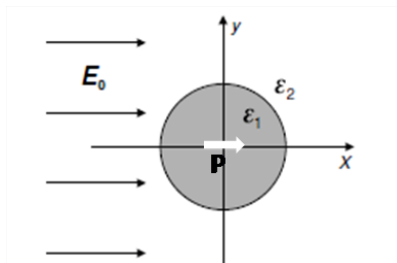
Hurbilketa kuasi-estatikoa.

Kasu konplikatuagoak aztertzen hasi aurretik komeni da analitikoki ebazgarriak diren kasuak aztertzea ideiak finkatzeko. Horretarako kasu kuasi-estatikoa kontsideratuko dugu, non eremuen atzerapena nulutzat hartzen den. Hau da, suposatzen da objektuaren puntu guztiek aldiberean erreakzionatzen dutela edozein eraso (kitzikapen) eremuren aurrean. Hurbilpen hau objektuaren tamaina karakteristikoa argiaren uhin-luzera baino askoz txikiagoa denean erabilgarria da soilik. Kasu kuasi-estatikoan Helmholtzen ekuazioa Laplazeren ekuaziora laburbiltzen da, zein askoz errazagoa den ebazteko. Limite honetan eremu elektrikoa $\mathbf{E} = -\nabla\phi$ bezala adierazten da. Gainera potentzialak Laplazeren ekuazioa,

$$\nabla^2\phi = 0, \quad (2.13)$$

bete behar du, eta baita ondoren aipatuko diren materialen muga-baldintzak.

Kontsidera dezagun a erradioko esfera, jatorrian zentratua. Problemaren geometria 2.4 irudian erakusten da.



2.4 Irudia: *X-ardatzean polarizatutako uhin lauaz argizatutako partikula esferikoa eta induzitutako momentu dipolarra.*

Problema hau ebazteko koordinatu esferikoekin (r, θ, φ) lan egingo dugu, eta orduan Laplaceren ekuazioa honakoa izango da:

$$\frac{1}{r^2 \sin \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \Phi(r, \theta, \varphi) = 0. \quad (2.14)$$

Honen soluzioak

$$\Phi(r, \theta, \varphi) = \sum_{l,m} b_{l,m} \Phi_{l,m}(r, \theta, \varphi) \quad (2.15)$$

modukoak izango dira. Hemen $b_{l,m}$ koefizienteak mugalde-baldintzek emandakoak dira, eta $\Phi_{l,m}$

$$\Phi_{l,m} = \begin{Bmatrix} r^l \\ r^{-l-1} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} P_l^m(\cos \theta) \\ Q_l^m(\cos \theta) \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} e^{im\varphi} \\ e^{-im\varphi} \end{Bmatrix}, \quad (2.16)$$

non $P_l^m(\cos \theta)$ eta $Q_l^m(\cos \theta)$ Legendreren funtzioak diren. Bestalde 2.16 ekuazioetan divergentziak ekidin behar dira, bai jatorrian eta bai distantzia infinituetan, problema partikular honi dagokion kasurako. Esferaren gainazalean, eremu elektrikoaren osagai tangential eta desplazamendu-bektorearen osagai normalaren jarraitasunetik hurrengo bi baldintzak lortzen ditugu:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial \Phi_1}{\partial \theta} \right]_{r=a} &= \left[\frac{\partial \Phi_2}{\partial \theta} \right]_{r=a}, \\ \varepsilon_1 \left[\frac{\partial \Phi_1}{\partial r} \right]_{r=a} &= \varepsilon_2 \left[\frac{\partial \Phi_2}{\partial r} \right]_{r=a}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

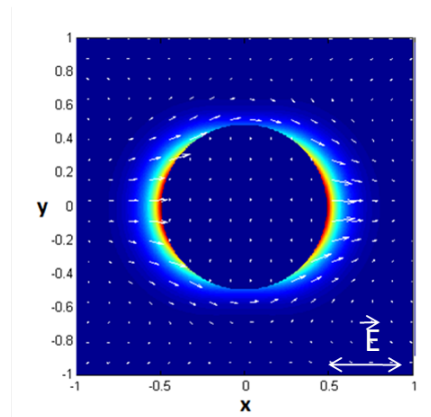
Hemen Φ_1 esferaren barrualdeko potentziala da eta $\Phi_2 = \Phi_{sca} + \Phi_0$ esferaren kanpoaldekoa, eraso potentzialaren (Φ_0) eta potentzial sakabanatuaren (Φ_{sca}) baturaren berdina dena. Eremu elektriko erasotzailea, 2.4 irudian azaltzen den bezala, homogenea eta x norabidekoa dela suposa daiteke. Ondorioz, $\Phi_0 = -E_0 x = -E_0 r P_1^0(\cos \theta)$ izango da. Mugalde baldintzak ebaluatuz gero hurrengoa lortzen da:

$$\begin{aligned}\Phi_1 &= -E_0 \frac{3\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2} r \cos\theta, \\ \Phi_2 &= -E_0 r \cos\theta + E_0 \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2} a^3 \frac{\cos\theta}{r^2}.\end{aligned}\quad (2.18)$$

Hemen garrantzitsua da ohartzea eremua φ angelu azimutalarekiko independentea dela, eremu elektrikoaren noranzkoak baldintzatutako simetriarengatik. Azkenik, eremu elektrikoa $\mathbf{E} = -\nabla\Phi$ -ren bidez kalkulatu daiteke, eta emaitza ondorengoa da:

$$\mathbf{E}_1 = E_0 \frac{3\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2} (\cos\theta \mathbf{n}_r - \sin\theta \mathbf{n}_\theta) = E_0 \frac{3\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2} \mathbf{n}_x \quad (2.19)$$

$$\mathbf{E}_2 = E_0 (\cos\theta \mathbf{n}_r - \sin\theta \mathbf{n}_\theta) + \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2} \frac{a^3}{r^3} E_0 (2\cos\theta \mathbf{n}_r + \sin\theta \mathbf{n}_\theta). \quad (2.20)$$



2.5 Irudia: *X*-ardatzean polarizatutako uhin lauaz argizatutako partikula esferikoan induzituriko eremu elektrikoa. *MATLAB* programaren bidez egindako grafikoa. ($a = 70 \text{ nm}$, $\varepsilon_1 = -18$, $\varepsilon_2 = 2.25$)

Soluzioan interesgarria da azpimarratzea partikularen barruan eremu elektrikoa homogeneoa dela, 2.5 irudian ikus daitekeen bezala. Partikula metalikoentzako ez da eremu handirik itxaroten, jakina baita eremu elektromagnetikoak esponentzialki ahultzen direla metaletan; Partikula metalikoen jokabidea ulertzeko $\varepsilon_1 \rightarrow \infty$ egin dezakegu eta orduan $E_1 \rightarrow 0$. Beste ondorio interesgarri bat sakabanatutako eremua (2.20 ekuazioko bigarren batugaia) esferaren zentroan kokaturiko $\boldsymbol{\mu}$ dipolo batek sortzen duenaren berdina dela da. Kanpoko \mathbf{E}_0 eremuak induzituriko dipoloa da, eta bere balioa $\boldsymbol{\mu} = \varepsilon_2 \alpha(\omega) \mathbf{E}_0$ da, non α polarizabilitatea den, eta gure kasuan

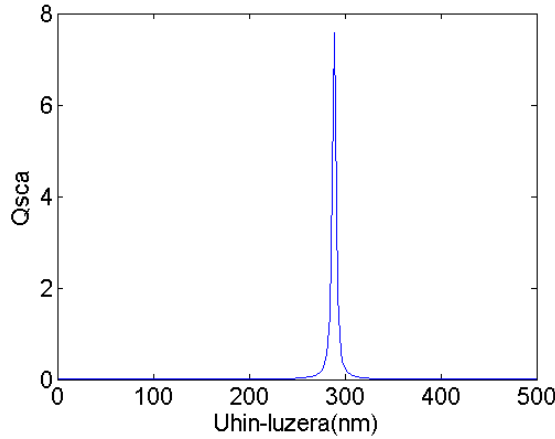
$$\alpha(\omega) = 4\pi\epsilon_0 a^3 \frac{\epsilon_1(\omega) - \epsilon_2}{\epsilon_1(\omega) + 2\epsilon_2} \quad (2.21)$$

balio duen. Hemen ikusi daiteke $\epsilon_1(\omega)/\epsilon_2 = -2$ kasurako polarizabilitatea maximoa izan-go dela eta plasmoi-erresonantzia edukiko dugula; $\epsilon_1(\omega) = \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$ eta $\epsilon_2 = 1$ kontsideratuz $\omega_p/\sqrt{3}$ maiztasunean gertatzen da. Azkenik sakabanaketako sekzio eragilea esferaren dipoloak erradiatutako potentzia osoa zati uhin lauaren intentsitatea eginez lortzen da [6]:

$$\sigma_{sca} = \frac{k^4}{6\pi\epsilon_0^2} |\alpha(\omega)|^2, \quad (2.22)$$

non, k esferaren kanpoaldeko uhin-bektorea den.

Sakabanatze-eraginkortasuna edo sakabanaketako sekzio eragile normalizatua horrela defini daiteke: $Q_{sca} = \sigma_{sca}/(\pi a^2)$. Hau 2.6 irudian ageri da, Ag esferarentzat funtzio dielektrikoa Druderen ereduaren bitartez emandakoa erabiliz $E_p = 7.44$ eV, $\gamma = 0.062$ eV izanik [3].

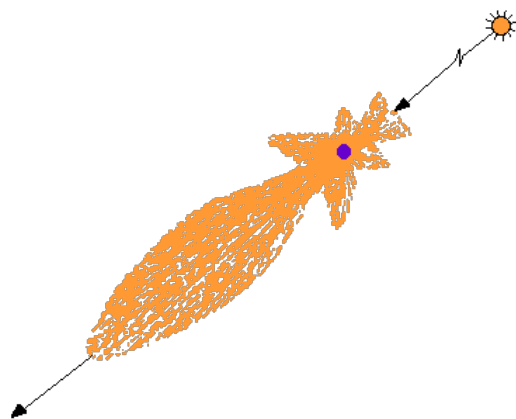


2.6 Irudia: Sakabanaketako sekzio eragile normalizatua uhin-luzeraren funtzioan $a = 120$ nm-ko Ag esferarako.

Ikusten denez hurbilketa kuasi-estatikoan sakabanaketako sekzio eragileak maximo bakarra du. Hurrengo kapituluko emaitzetan ikusiko da hurbilketa honetatik kanpo hori ez dela beteko, espektro aberatsagoa agertuko da.

2.4 Mie sakabanaketa

Gure atmosferan dauden partikulen dimentsioak ez dira arbuiagarriak erradiazioaren uhin-luzeraren aldean. Hauen propietate sakabanatzaileak haien tamaina, forma edo errefrakzio-indizearen zati erreal eta irudikariaren menpekoak dira. Partikula esferikoen sakabanaketaren lehen teoria osoa Gustav Mie (1908) garatu zuen; honen arabera, sakabanaketa aurreraka gertatzen da gehienbat. Gainera, partikularen tamaina handituz doan heinean, sakabanaketa are aurrerakagoa da. Partikulak argi erasotzailearen uhin-luzera baino handiagoak diren kasuko sakabanaketa tipikoa 2.7 irudian ikus daiteke.



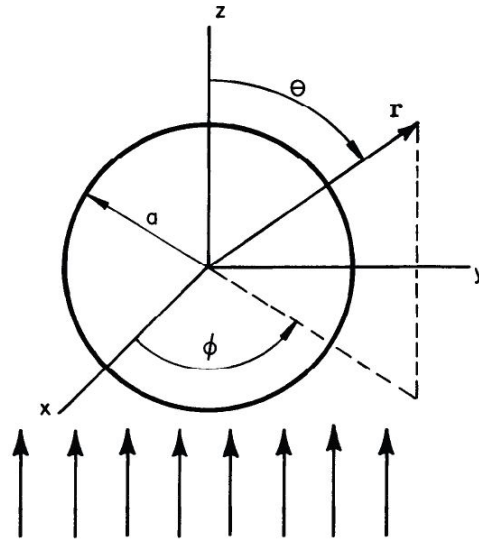
2.7 Irudia: Eguzkitik datorren argiaren sakabanaketaren eskema atmosferan.

Mie teoria Maxwell-en ekuazioetan oinarritzen da, hauetatik koordenatu esferikoetan uhin-ekuazio bektoriala lor daitekeelarik. Aldagaien banantzea erabiliz uhin erasokotzailearen eremu elektriko eta magnetikoa funtzio berezien bidez adieraz daitezke.

Mie-ren soluzioa duela urte asko publikatu zen arren, honen aplikazioek garapen konputazionala izan arte itxaron behar izan dute, honek ahalbidetzen baitu teorian agertzen diren funtzio eta koefiziente guztiak numerikoki ebatzea.

2.4.1 Esfera baten xurgapena eta sakabanaketa

Uhin elektromagnetiko lau, monokromatiko batek partikula esferiko homogeen batekin duen elkarrekintza aztertzeko Maxwellen ekuazioen Mie soluzioak erabiliko ditugu. Mie teoriak esfera homogeenak sakabanatutako eta xurgatutako barne eta kanpo-eremuak ematen ditu.



2.8 Irudia: a erradioko partikula esferiko batean zentratutako koordenatu-sistema esferikoa (r, θ, ϕ). Geziek uhin-bektorearen norazkoa adierazten dute.

Uhin erasotzailearen eremu elektromagnetikoa $(\mathbf{E}_i, \mathbf{H}_i)e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)}$ da, \mathbf{k} uhin bektorea eta ω maiztasuna izanik. Ingurune isotropiko, homogeen eta lineal batean eremu elektromagnetikoak, (\mathbf{E}, \mathbf{H}) -k, uhin-ekuazioa bete behar du,

$$\nabla^2 \mathbf{E} + k^2 \mathbf{E} = 0, \quad \nabla^2 \mathbf{H} + k^2 \mathbf{H} = 0, \quad (2.23)$$

non $k^2 = \omega^2 \epsilon \mu$ eta ϵ eta μ ingurunearen permitibitatea eta iragazkortasuna diren. Gainera iturririk ez dagoen puntuetan:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{H} = 0. \quad (2.24)$$

Horrez gain \mathbf{E} eta \mathbf{H} ez dira independenteak,

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu\mathbf{H}, \quad \nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\epsilon\mathbf{E} \quad (2.25)$$

erlazioak betetzen dituzte.

Zurikoa esferikoa den kasuan eremuak \mathbf{M} eta \mathbf{N} bektore-funtzioen (Besselen funtzioen eta Legendreren polinomioen funtzioak) bidez adieraz daitezke, eta aurreko ekuazioak osagai esferikoetan ebatz daitezke \mathbf{A} eraskinean deskribatzen den bezala. Uhina z norabidean hedatu dela eta eremu elektrikoa x norabidean polarizatua dela suposatuko dugu (ikus

2.8 irudia). Eremu erasotzaileak ($\mathbf{E}_i, \mathbf{H}_i$), sakabanatuak ($\mathbf{E}_{sca}, \mathbf{H}_{sca}$) eta esferaren barnekoak ($\mathbf{E}_1, \mathbf{H}_1$) A eraskinean emanda datoz (A.7, A.8, A.13 eta A.10 ekuazioek emanak, hurrenez hurren):

$$\mathbf{E}_i = E_0 \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} (\mathbf{M}_{oln}^{(1)} - i\mathbf{N}_{eln}^{(1)})$$

$$\mathbf{H}_i = \frac{-k}{\omega\mu} E_0 \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} (\mathbf{M}_{eln}^{(1)} + i\mathbf{N}_{oln}^{(1)})$$

$$\mathbf{E}_{sca} = \sum_{n=1}^{\infty} E_n (ia_n \mathbf{N}_{eln}^{(3)} - b_n \mathbf{M}_{oln}^{(3)})$$

$$\mathbf{H}_{sca} = \frac{k_1}{\omega\mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (ib_n \mathbf{N}_{oln}^{(3)} + a_n \mathbf{M}_{eln}^{(1)})$$

$$\mathbf{E}_1 = \sum_{n=1}^{\infty} E_n (c_n \mathbf{M}_{oln}^{(1)} - id_n \mathbf{N}_{eln}^{(1)})$$

$$\mathbf{H}_1 = \frac{-k_1}{\omega\mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (d_n \mathbf{M}_{eln}^{(1)} + ic_n \mathbf{N}_{oln}^{(1)})$$

Sakabanaketa eta barne-eremuetan agertzen diren a_n, b_n, c_n eta d_n koefizienteak eremuen ondoko mugalde-baldintzak esferaren gainazalean ($r = a$) erabiliz lortzen dira:

$$\begin{aligned} E_{i\theta} + E_{s\theta} &= E_{1\theta}, & E_{i\phi} + E_{s\phi} &= E_{1\phi} \\ H_{i\theta} + H_{s\theta} &= H_{1\theta}, & H_{i\phi} + H_{s\phi} &= H_{1\phi}. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Hemendik ondoko lau ekuazioak lortzen dira:

$$j_n(mx)c_n + h_n^{(1)}(x)b_n = j_n, \quad (2.27)$$

$$\mu [mxj_n(mx)]' c_n + \mu_1 [xh_n^{(1)}(x)]' b_n = \mu_1 [xj_n(x)]', \quad (2.28)$$

$$\mu m j_n(mx)d_n + \mu_1 h_n^{(1)}(x)a_n = \mu_1 j_n(x), \quad (2.29)$$

$$(mxj_n(mx))d_n + m[xh_n^{(1)}(x)]' a_n = m[xj_n(x)]', \quad (2.30)$$

non $j_n(x)$ eta $h_n(x)$ Bessel-en eta Hankel-en funtzio esferiko bereziak diren, eta azen-tuak parentesi arteko argumentuarekiko deribatua adierazten duen. Argumentuetan agertu diren gaiak ondokoak dira: x *tamaina-parametroa* eta m *errefrazio-indize erlatiboa*:

$$x = ka = \frac{2\pi Na}{\lambda}, \quad m = \frac{k_1}{k} = \frac{N-1}{N}, \quad (2.31)$$

eta N_1 eta N partikularen eta ingurunearen errefrakzio-indizeak dira, hurrenez hurren. Ekuazio-sistema ebatziz barne-eremuko koefizienteak:

$$c_n = \frac{\mu_1 j_n(x) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 h_n^{(1)}(x) [x j_n(x)]'}{\mu_1 j_n(mx) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu h_n^{(1)}(x) [mx j_n(mx)]'} \quad (2.32)$$

$$d_n = \frac{\mu_1 m j_n(x) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 m h_n^{(1)}(x) [x j_n(x)]'}{\mu m^2 j_n(mx) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 h_n^{(1)}(x) [mx j_n(mx)]'} \quad (2.33)$$

eta sakabanaketa-koefizienteak:

$$a_n = \frac{\mu m^2 j_n(mx) [x j_n(x)]' - \mu_1 j_n(x) [mx j_n(mx)]'}{\mu m^2 j_n(mx) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 h_n^{(1)}(x) [mx j_n(mx)]'} \quad (2.34)$$

$$b_n = \frac{\mu_1 j_n(x) [x j_n(x)]' - \mu j_n(x) [mx j_n(mx)]'}{\mu_1 j_n(mx) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu h_n^{(1)}(x) [mx j_n(mx)]'} \quad (2.35)$$

lortzen dira.

Sakabanaketa-koefizienteak (2.34) apur bat sinplifika daitezke *Riccati-Bessel funtzioekin*:

$$\psi_n(\rho) = \rho j_n(\rho), \quad \xi_n(\rho) = \rho h_n^{(1)}(\rho) \quad (2.36)$$

eta partikularen eta ingurunearen iragazkortasuna berdina izanez gero (normalean $\mu = \mu_0$ ingurune magnetikoak ez badira), orduan horrela adierazten dira:

$$a_n = \frac{m\psi_l(mx)\psi_l'(x) - \psi_l(x)\psi_l'(mx)}{m\psi_l(mx)\xi_l'(x) - \xi_l(x)\psi_l'(mx)} \quad (2.37)$$

$$b_n = \frac{\psi_l(mx)\psi_l'(x) - m\psi_l(x)\psi_l'(mx)}{\psi_l(mx)\xi_l'(x) - m\xi_l(x)\psi_l'(mx)}. \quad (2.38)$$

2.4.2 Sekzio eragileak

Bukatzeko esferaren sekzio eragilea kalkulatuko dugu esfera inguratzen duen gainazal irudikari bat zeharkatzen duen energia elektromagnetikoaren fluxua kalkulatuaz 2.1 ataleko definizioak osagai esferikoetan adieraziz. Ingurunea ez bada xurgakorra P_a gainazal irudikariaren erradioaren independentea da, eta urruneko eremu magnetikoa kontsideratu ahal izateko bezain handia hartuko dugu. Beraz¹:

$$\begin{aligned} P_{ext} &= \frac{1}{2} \text{Re} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (E_{i\phi} H_{sca\theta}^* - E_{i\theta} H_{sca\phi}^* - E_{sca\theta} H_{i\phi}^* + E_{sca\phi} H_{i\theta}^*) r^2 \sin\theta d\theta d\phi \\ P_{sca} &= \frac{1}{2} \text{Re} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (E_{sca\theta} H_{sca\phi}^* - E_{sca\phi} H_{sca\theta}^*) r^2 \sin\theta d\theta d\phi \end{aligned} \quad (2.39)$$

Hemendik, kontsideratzen badugu argia eremu elektrikoarekin x norabidean polarizatuta dagoela, lortzen diren sekzio eragileetarako emaitzak honakoak dira:

$$\sigma_{sca} = \frac{\lambda^2}{2\pi} \sum_{l=1}^{\infty} (2l+1) (|a_l|^2 + |b_l|^2) \quad (2.40)$$

$$\sigma_{ext} = \frac{\lambda^2}{2\pi} \sum_{l=1}^{\infty} (2l+1) \text{Re}[(a_l + b_l)], \quad (2.41)$$

eta beraz σ_{abs} xurgatutako sekzio eragilea

$$\sigma_{abs} = \sigma_{ext} - \sigma_{sca} \quad (2.42)$$

Aurreko magnitudeak adierazgarriagoak izan daitezten “eraginkortasunak” edo sekzio era-

¹Ikus [7] erreferentziako 3.4 atala

gile normalizatuak definitzen dira, sekzio eragilea zati partikularen sekzio eragile osoa bezala, hau da²,

$$Q_i = \frac{\sigma_i}{\pi a^2} \quad (2.43)$$

non ($i = sca, ext, abs$) izan daitekeen eta a partikularen erradioa den. Azkenik sakabanatze-eraginkortasuna definitzen da:

$$Q_{eff} = \frac{Q_{sca}}{Q_{sca} - Q_{abs}}. \quad (2.44)$$

²Hemendik aurrera sekzio eragile esaten denean sekzio eragile normalizatuaz ari da.

3. KAPITULUA

Emaitzak eta analisia

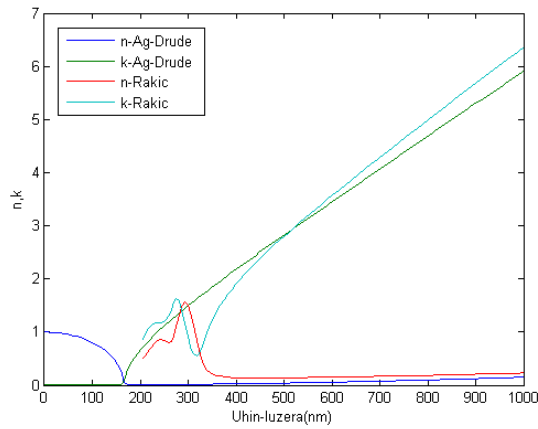
Azaldutako Mie teoriaren emaitzak inplementatu dira MATLABeko programak eginez. Horretarako [8], [9] eta [10] erreferentziak lagungarri izan dira. Egindako programa nagusiak B eranskinean daude eta atal bakoitzean erabili diren funtzioei erreferentzia egin zaie.

Hasteko nanopartikula metalikoen kasuan sakabanaketako sekzio eragileak eta hurbileko eremuak aztertuko ditugu. Ondoren dielektrikoak aztertuko dira, bien arteko alderaketa egin ahal izateko. Azkenik geometria konplexuagoko sistema aztertuko da BEM teoriaren [11] bitartez eta honetarako Hohenester eta Truglerren lana [12] lagungarria izan da.

3.1 Nanopartikula metalikoak

Oro har, metalen kasuan funtzio dielektrikoa Druderen ereduarekin (2.12) deskriba daiteke, hein handi batean elektroiak askeak bezala kontsidera baitaitezke material hauetan. Metalen kasua aztertzeko zilarra (Ag) aukeratu da, plasmonikan oso erabilia baita tarte ikusgai duen xurgapen baxua dela eta.

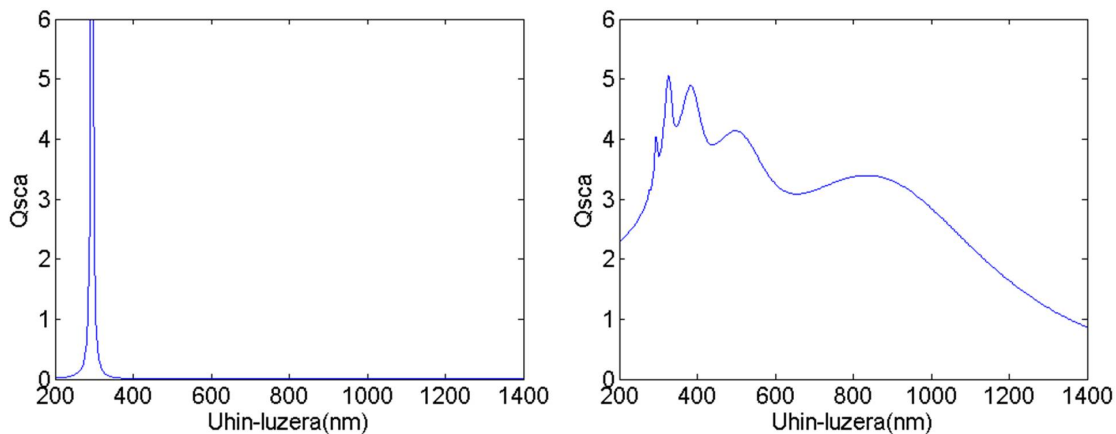
Druderen ereduarekin kalkulaturako errefrakzio-indizea Rakic-en [13] datu esperimentalekin batera irudikatu dira 3.1 irudian. Ikus daiteke gutxi gorabehera 300-400 nm-tik gorako tartean nahiko bateragarriak direla datu esperimentalak eta Druderen ereduarekin lortutakoak. Hemendik beherako tartean elektroiban den arteko trantsizioak gertatzen dira eta beraz ezin da eredu honekin konparatu.



3.1 Irudia: Errefrakzio indizea n eta xurgapen koefizientea κ uhin-luzeraren arabera, Ag kasurako Drude funtzioak emandakoa eta esperimental (Rakic [3]). $E_p = \hbar\omega_p = 7.44 \text{ eV}$, $\gamma = 0.062 \text{ eV}$.

Aurreko atalean ε maiztasunaren (edo energiaren $E = \hbar\omega$) funtzioan adierazi dugu eV-etan 2.2 irudian. Uhin-luzeraren araberako adierazpenarekin konparatzeko oso erabilgarria izaten da $\lambda(\text{nm}) = 1240/E(\text{eV})$ erlazioa erabiltzea.

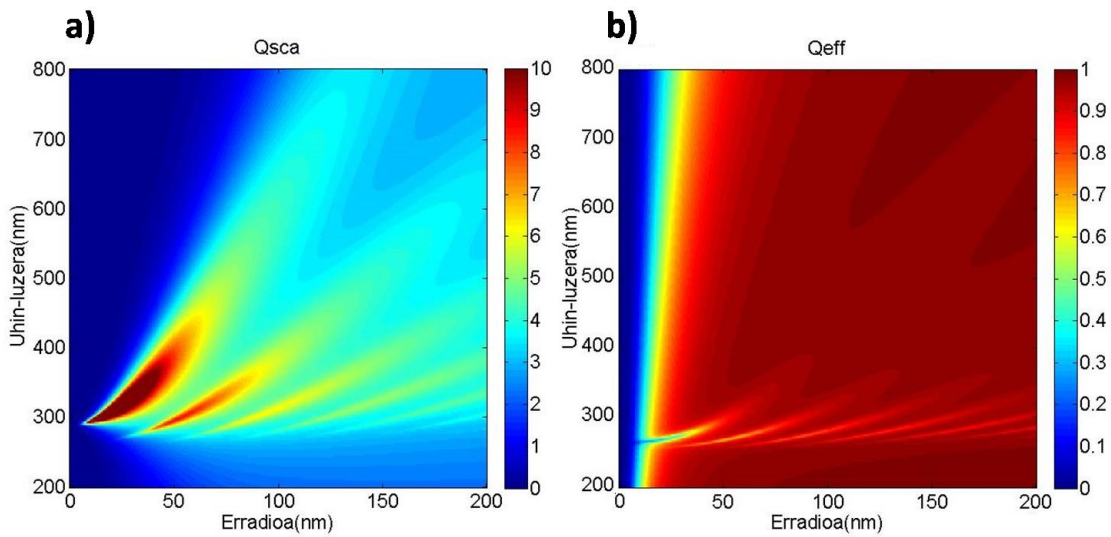
Lehenik eta behin esferaren bi erradio ezberdinetarako espektroak alderatuko ditugu; argi eta garbi ikusten da 3.2 irudian erradioa oso txikia den kasuan ($a \approx 10 \text{ nm}$) soluzioa 2.3 atalean ikusitakoarekin erabat bateragarria dela (2.6 irudia), eta modo dipolarra baino ez dela agertzen. Erradioa handitzen baldin badugu, ordea, beste hainbat modo agertzen dira eta espektroa zabaltzen da $\lambda > 400 \text{ nm}$ uhin-luzeretara.



3.2 Irudia: Zilarrezko $a = 10 \text{ nm}$ -ko (ezkerrean) eta $a = 150 \text{ nm}$ -ko (eskuman) nanopartikula esferikoetako sakabanatze sekzio eragilea Druderen ereduarekin lortutako errefrakzio indizeekin.

Gure proposamenerako (antenen moduan jokatze) partikulak eragindako sakabanaketa-

intentsitatea handia izan dadin nahi dugu, baina aldi berean xurgapenak txikia izan behar du. Jokaera hau aztertu ahal izateko kalkuluak egin ditugu esferaren erradio ezberdinetarako ($\lambda < 200$ nm). Emaitzak 3.3 irudian agertzen dira. Ohartu $Q_{eff} = \frac{Q_{sca}}{Q_{sca} - Q_{abs}}$ enez, $Q_{eff} \approx 1$ denean esan nahi du $Q_{abs} \approx 0$ dela. Bestalde, 2.40 ekuazioko baturak mozteko orduan, [7] oinarrizko bibliografian proposatzen bezala, $l_{max} = x + 4x^{1/3} + 2$ erabili da, $x = ka$ izanik, non k uhin bektorea den eta a esferaren erradioa. Kalkulu hauek egiteko B.2 eraskineko programa egin da.

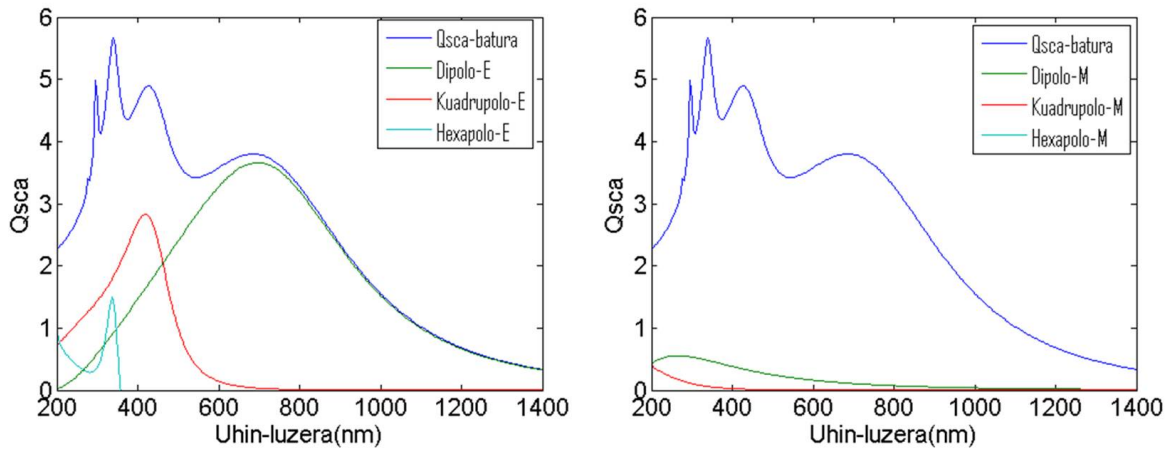


3.3 Irudia: Erradio ezberdinetako Ag nanopartikula esferikoen a) sakabanaketako sekzio eragile normalizatua eta b) sakabanatze-efizientzia normalizatua Druderen ereduarekin lortutako erre-fraczio indizearekin (3.1 irudia).

Beraz, 3.3b) irudian argi ikusten da erradioa 50 nm baino txikiagoa denean xurgapena handiagoa dela sakabanaketa baino; erradio handiagoetarako, berriz, sakabanaketa da nagusi 3.3a)-n ikus daitekeen bezala. Gainera, erradio txikietan erresonantziak $\lambda < 450$ uhin-luzeretakako ematen dira gutxi gora bera, eta argi ikusgaia erabili nahi badugu komenigarriagoa da erradio handiagoko nanopartikulak hautatzea.

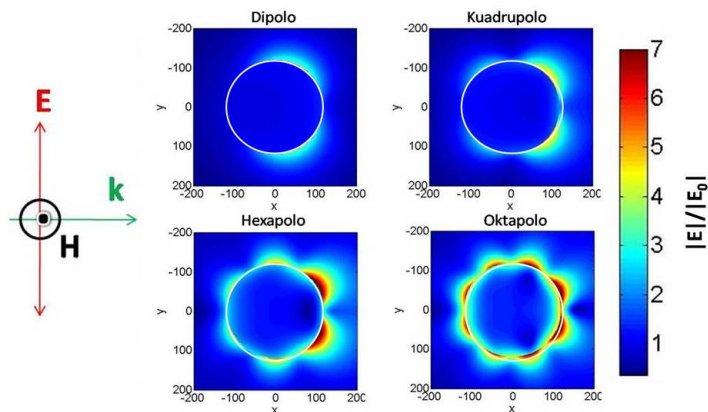
Har dezagun adibidez $a = 120$ nm-ko nanopartikula bat. Orain aztertu beharra dago erradio finko honetarako zein uhin-luzeratan dauden sakabanaketa maximoak. Horretarako 3.4 grafikoa egin da.

Badakigu 3.4 iruditik erresonantziako uhin-luzerak 686, 425, 340 eta 296 nm-tan agertzen direla eta hauek modo dipolar, kuadrupolar, hexapolar eta oktapolarri dagozkie, hurrenez hurren. Gainera, ikus daiteke metalaren kasuan ekarpen handienak modo elektrikoak direla, eta magnetikoek ez dutela ekarpenik egiten. Ereku elektriko eta magne-



3.4 Irudia: Zilarrezko 120nm-ko erradiodun nanopartikula esferikoaren sakabanaketako sekzio eragile normalizatua Druderen ereduarekin lortutako errefrakzio indizearekin. Ezkerrean dipolo, kuadrupolo eta hexapolo elektrikoak eta eskuman magnetikoak, baturaz gain (hexapolo magnetikoa ez da ia ikusten oso balio baxuak dituelako).

tikoaren intentsitate-banaketak kolore-mapen bidez adierazi dira 3.5 irudian lau modoen itxurak ageri direlarik. Adierazpen honetarako kalkuluak egiteko B.3 programa erabili da. Ereku magnetikoaren intentsitatearen banaketa ez da irudikatu 3.5 intentsitate oso baxua duelako.

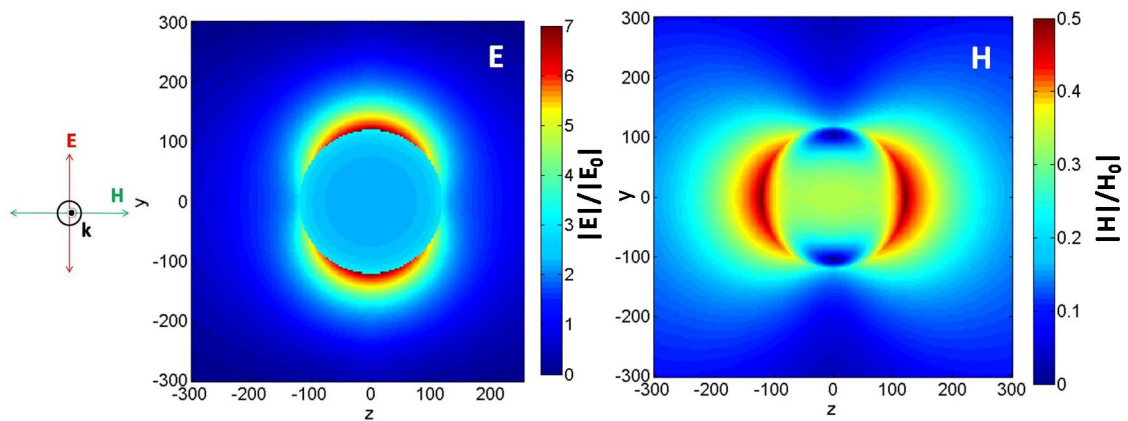


3.5 Irudia: Zilarrezko 120nm-ko erradiodun nanopartikula esferikoaren kasurako eremu elektrikoaren banaketa (eraso argia ezkerretik) espaziala modo dipolar, kuadrupolar, hexapolar eta oktopolarrerako (686, 425, 340 eta 296 nm).

Kalkulu honetarako, 3.5 irudian agertzen den bezala, k uhin-bektorea x norabidean eta E eremuaren polarizazio-norabidea y norabidean hartu dira.

Espero genuen bezala, partikula metalikoa izanda, esferaren barruan eremu elektrikoa ia nulua da. Gainera, aipatzea esferaren eskumaldean eremu elektromagnetikoa indartsuagoa dela eraso argiarekin dagoen interferentzia dela eta. Nabaritzekoa da, bestalde, esferaren tamaina honetarako ekarpen handiena ez datorrela modo dipolar elektrotik, esfera txikiaren kasuan bezala, baizik eta ordena altuagoko modoetatik; horrez gain, modo dipolarra gorrirantz desplazatu da.

Modo dipolar elektrikoak duen itxura eta uhin-luzera horretan eremu magnetikoaren banaketa argiago ikusteko 3.6 irudia egin da.

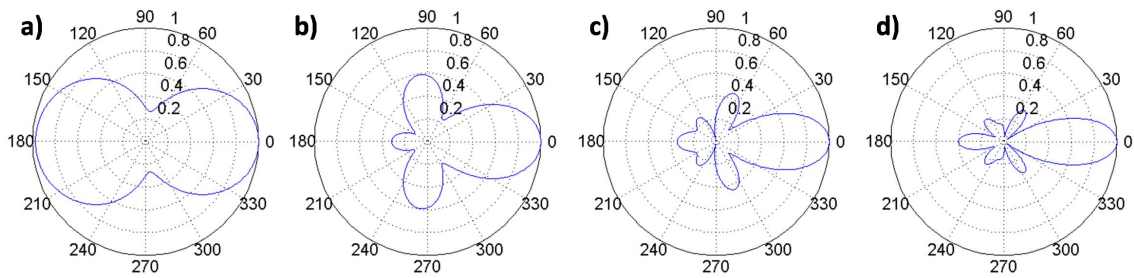


3.6 Irudia: Zilarrezko 120 nm-ko erradiodun nanopartikula esferiko baten eremu elektriko (ezkerra) eta magnetikoaren (eskuma) banaketa espaziala dipolo elektrikoaren erresonantzian ($\lambda = 296$ nm). Ohartu eremu magnetikoaren intentsitatea askoz ere txikiagoa dela.

Bukatzeko lau modoetarako ematen den ekarpena hobeto ikusteko sakabanaketaren banaketa angeluarra ikus daiteke 3.7 irudian. Adierazpen grafiko hauek B.4 programaren bitartez egin dira. Modo altuagoen norabidekotasuna aurreragokoa dela nabari da.

3.2 Nanopartikula dielektrikoak

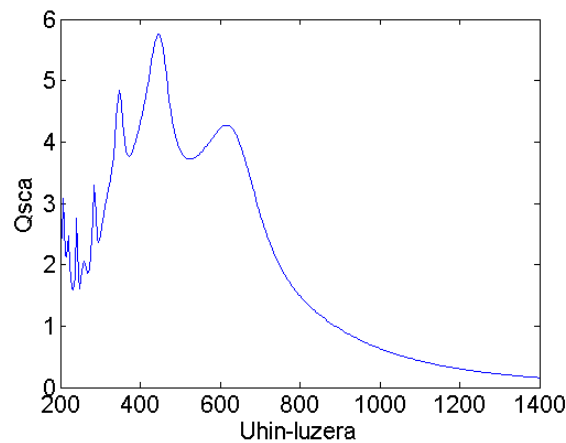
Partikula dielektrikoen sakabanaketa aztertzeko kontutan hartu behar da hauek ez dutela ia xurgapenik eragiten, hau da, errefrakzio indizearen zati irudikaria nulutzat har daitekeela, eta beraz printzipioz erabilgarriagoak dira nanopartikula sakabanatzaile bezala erabiltzeko. Egiaztatu behar dena da ea partikula dielektrikoekin metalikoekin lortzen zen besteko sakabanaketako sekzio eragilea lortzen den.



3.7 Irudia: Sakabanaketa-banaketa angeluarra $a = 120$ nm-ko Ag esferarentzat. Dipolo a), kua-drupolo b), hexapolo c) eta oktapolo d) modoen ekarpenak (eraso uhina ezkerretik dator).

Dielektrikoen kasuan funtzio dielektrikoa zenbait metodoren bidez deskriba daiteke. Hemen $n = 2$ eta $k = 0$ hartu dugu. Errefrakzio indizea $n = 2$ hartu dugu zenbait oxido interesgarrietan balio honen inguruan baitago. Adibidez $n = 1.5$ SiO_2 -ren kasuan edo $n = 2.5$ TiO_2 -rako; Aluminioan $n = 1.7$. Zehazki Si_3N_4 -ri dagokio gutxi gora behera $n = 2$ balio zehatza $\lambda > 400$ nm-ko tarterako.

Lehenik eta behin, partiula metalikoekin egin dugun bezala, erradio finko baterako ($a = 150$ nm) espektroa kalkulatu eta erakutsi dugu 3.8 irudian.

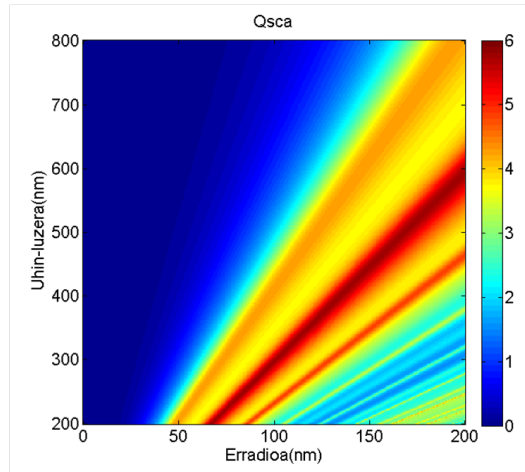


3.8 Irudia: Nanopartikula dielektriko esferiko baten kasurako sakabanaketako sekzio eragile normalizatua ($a = 150$ nm, $n = 2$ eta $k = 0$), uhin-luzera ezberdinetarako.

Dielektrikoaren kasuan ez dugu $a = 10$ nm-ko erradioaren kasua egin, sakabanaketako sekzio eragilea nulua baita, ondoren ikusiko dugun bezala.

Metalen kasuan egin dugun bezala (3.3 irudia) MATLABeko programarekin (B.2) uhin-luzera eta erradio ezberdinetarako mapa egin dugu (3.9 irudia). Kasu honetan ez dago

xurgapenik, beraz Q_{abs} adierazten duen 3.3 b)-ren antzeko irudia egiteak ez luke zentzurik.



3.9 Irudia: Erradio ezberdinetako esfera dielektrikoen (Si_3N_4) sakabanatze sekzio eragile normalizatua uhin-luzera ezberdinetarako.

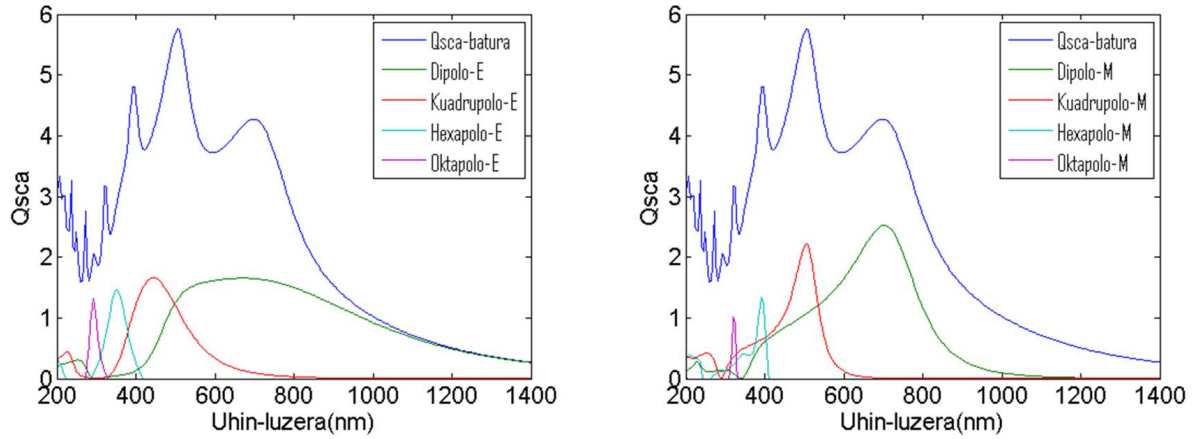
Ikus daiteke 3.9 irudiari begiraturaz $a = 170$ nm-ko erradioa egokia dela sakabanaketa argi ikusgai (≈ 700 nm) emateko, metalaren kasukoa ($a = 120$ nm) baino handiagoa izanik. Beste alde batetik, ikus daiteke $a \approx 50$ nm baino erradio txikiagoetarako ez dela sakabanaketarik ematen, metalaren kasuan ez bezala (3.3 irudia).

Ondoren, erradio finko baterako sakabanaketako sekzio eragilea irudikatu dugu uhin-luzeraren funtzioan, maximoak zein minimoak non gertatzen diren ikusteko (3.10 irudia). Horrez gain, modo elektriko eta magnetikoak independenteki irudikatu dira maximo bakoitza zeini dagokion argiako ikusteko.

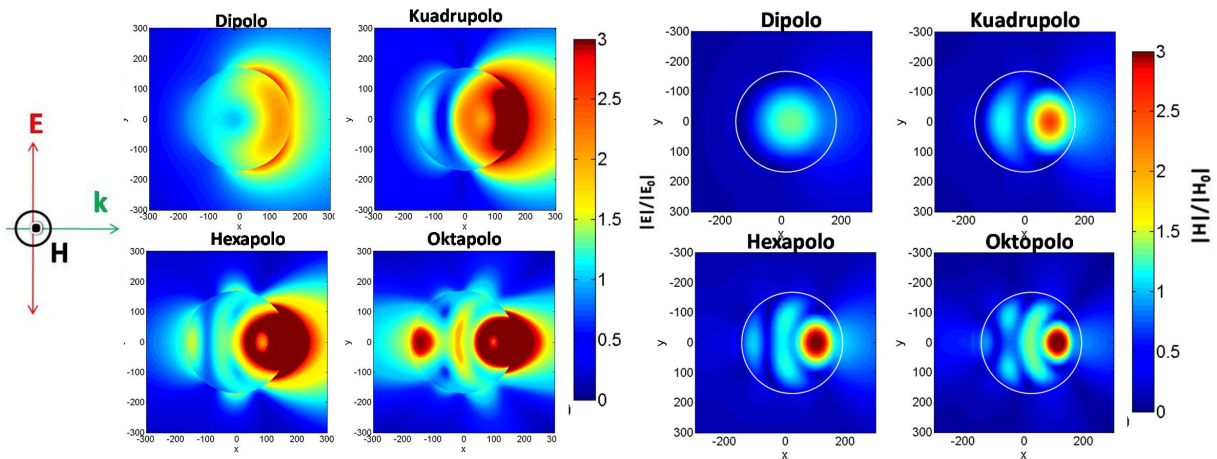
Ikusten da 3.10 irudia sakabanaketako sekzio eragile normalizatu maximoaren balioa sei ingurukoa dela, metalaren kasuan lortutakoaren moduan. Horregatik, pentsa genezake dielektrikoa material hobea izango dela xurgapenik ez izateagatik. Bestalde, maximo totalak $\lambda = 700, 502, 392$ eta 322 nm-etarako agertzen dira. Azpimarratzekoa da, partikula metalikoekin ez bezala, hemen multipolo magnetikoen ekarpena (3.10 eskuma) elektrikoarena bezain garrantzitsu edo garrantzitsuagoa dela.

Eremu elektromagnetikoaren intentsitatearen banaketa erakusten duten grafikoak egin dira hurrena MATLABen bidez, nanopartikula metalikoekin antzera, eta lortu diren emaitzak 3.11 irudian ageri dira.

Hemen ikus daiteke eremu elektromagnetikoaren intentsitatea handitzen bada ere, handipen hori gehienbat esferaren barrualdean ematen dela, eta beraz printzipioz antena mo-

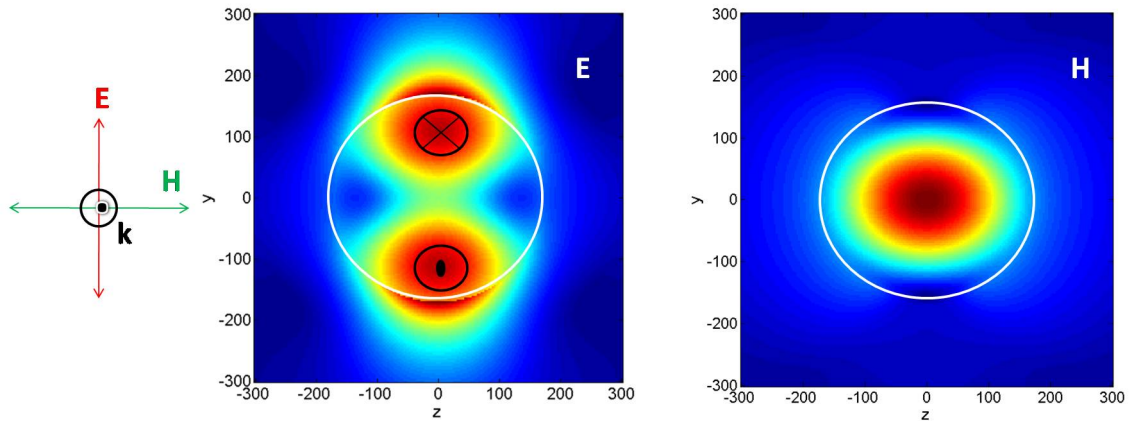


3.10 Irudia: Nanopartikula dielektriko ($a = 170 \text{ nm}$, $n = 2$, $k = 0$) esferiko baten kasurako sakabanaketako sekzio eragile normalizatua. Ezkerrean dipolo, kuadrupolo, hexapolo eta oktapolo elektrikoak eta eskuman magnetikoak, baturaz gain.



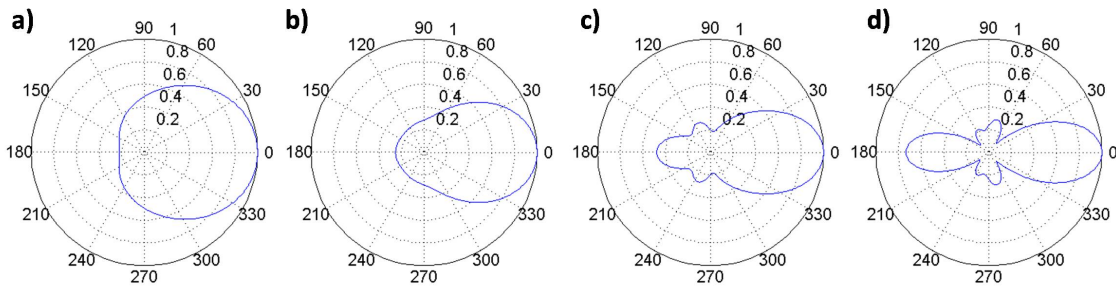
3.11 Irudia: Ereku elektriko eta magnetikoaren banaketak (eraso argia ezkerretik) espaziala kasu dipolar, kuadrupolar, hexapolar eta oktopolarerako. Ezkerrean eremu elektrikoaren intentsitatea, eskuman magnetikoarena. Maximo nagusien uhin-luzeretak irudikatu dira biak ($\lambda = 700, 502, 392$ eta 322 nm -etarako). Ezkerreko irudian koloreak saturatu dira modoak argi-irudi ikusteko.

duan erabiltzeko ez litzatekeela oso erabilgarria izango. Eremuen banaketa espaziala zein motakoa den hobeto ikusteko YZ planoko grafikoa ikus daiteke lehenengo maximo magnetikorako ($\lambda = 700 \text{ nm}$) 3.12 irudian. Ikusten da dipolo magnetikoa eta eremu elektrikoaren banaketa zirkularra momentu magnetikoaren inguruan.



3.12 Irudia: Sakabanaketa banaketa angeluarra $a = 170 \text{ nm}$, $n = 2$ -ko esfera dielektrikoarentzat $\lambda = 700 \text{ nm}$ -rako. Dipolo magnetikoaren erresonantzia ondo ikusten da.

Bukatzeko, metalekin bezala banaketa angeluarra argiagi ikusteko 3.13 irudia egin da:



3.13 Irudia: Sakabanaketa-banaketa angeluarra $a = 170 \text{ nm}$ -ko erradioko eta $n = 2$ -ko esfera dielektrikoarentzat. Dipolo a), kuadrupolo b), hexapolo c) eta oktapoloa d)(eraso uhina ezkerretik dator).

Orokorrean ikus daiteke dielektrikoaren kasuan sakabanaketa aurrerantzagoa dela metalen kasuarekin alderatuz, zeinetan beste norabideetara gehiago desbideratzen zen.

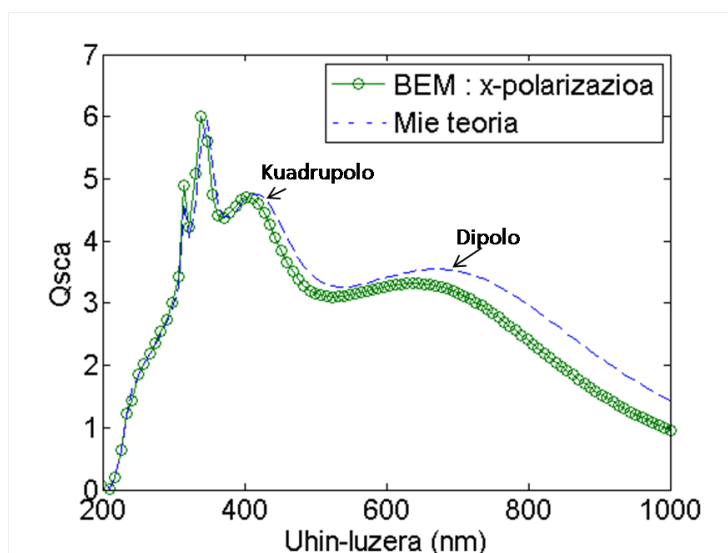
3.3 Dimeroa: kalkulu numerikoak MNPBEM erabiliz

Mie teoriarekin kalkula daitezkeen Maxwellen ekuazioen soluzio analitikoak geometria jakin batzuetara mugatzen dira, besteak beste esfera edo zilindro infinituetara. Sistema konplexu edo errealagoen erantzun elektromagnetikoa simulatu ahal izateko Maxwellen ekuazioen soluzio numerikoak erabiltzea derrigorrezkoa da.

Kalkulu hauek burutzeko badaude zenbait teknika; ospetsuenak “*Finite Difference Time Domain*” (FDTD) metodoa, “*Discrete Dipole Approximation*” (DDA) edo “*Boundary Element Method*” (BEM) dira.

Azken atal honetan, bi partikula metalikoz osatutako sistemen simulazio pare bat laburki deskribatuko dira, kasu honetan BEM metodoan [11] oinarrituz. Teoria honen oinarriak Maxwellen ekuazioak objektuen gainazaletako karga eta korronteen menpe adieraztean datza. Kalkuluak egiteko MNPBEM toolbox [12] lagungarria izan da. Honek nanopartikula metalikoen kasurako BEM (*boundary element method* edo “mugaldeko elementuen metodoa” teoria inplementatzen du MATLAB programan. Gogoratu behar da dimeroa bezalako sistemak ezin direla Mie teoriarekin ebatzi, ez baitaude simetria esferikorik.

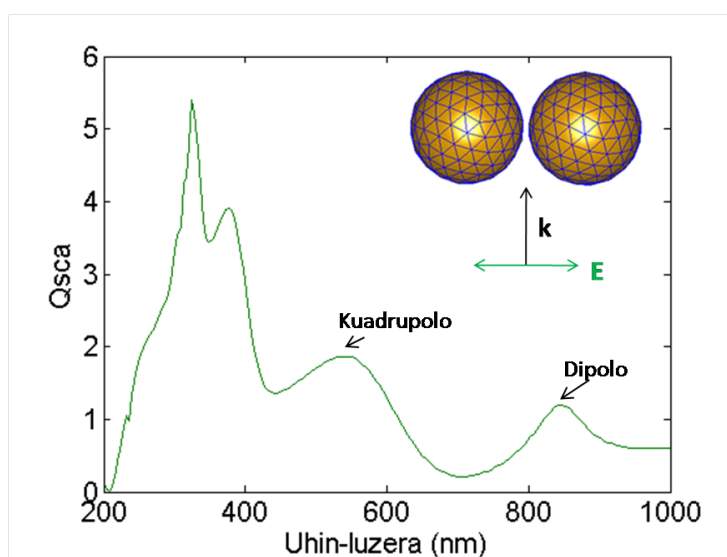
Lehenik eta behin 3.1 atalean egindako 3.4 grafiko berdina egin da. Horretarako lehenago bezala $a = 120$ nm-ko zilarrezko nanopartikula esferikoa kontsideratu da, eta funtzio dielektrikoa Druderen funtzioak emandakoa hartu da.



3.14 Irudia: Sakabanaketako sekzio eragilea $a = 120$ nm-ko zilarrezko nanopartikula esferiko batentzako, Druderen funtzioak emandako funtzio dielektrikoa erabiliz.

3.14 irudian ikusten den bezala BEM teoriarekin simulatutakoa nahiko bateragarria da Mie teoriaren emaitzekin. Orain bi nanoesfera metalikok osatutako sistema kontsideratuko dugu. Eraso-uhina x ardatzean polarizatuta dago eta perpendikularki erasotzen du 3.15 irudian adierazitako moduan.

Bi nanopartikulek $a = 120$ nm-ko erradioa izango dute eta bien arteko gap -a edo tarte 10 nm-koa da 3.15 irudian agertzen den moduan. Simulazioa eginda sakabanaketako sekzio eragile normalizatua 3.15 irudian ageri da.

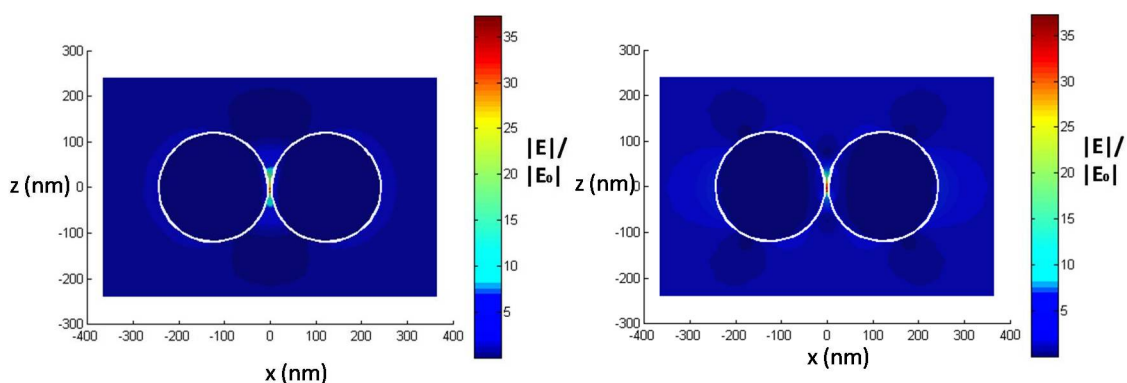


3.15 Irudia: Sakabanaketako sekzio eragile normalizatua 10 nm-ko tarteaz banandutako $a = 120$ nm-ko zilarrezko bi nanopartikula esferikorentzako (funtzio dielektrikoa Druderen funtzioak emana).

3.15 irudian ikusten da modo dipolar eta kuadrupolar elektrikoak gorriranzko lerrakuntza jasan dutela 3.14 irudiarekin konparatuz gero.

Sistema honetan eremu elektrikoaren intentsitatea kalkulatzeko bada (3.16 irudia) $\lambda = 843$ nm-ko uhin-luzerarako (3.15 irudian agertzen den modo dipolarra) irudian ageri den kolore-mapa lortzen da.

Lehenik konturatu behar da zein den kolore-maparen eskala (eskuamako kolore-marra) eta alderatu behar da esfera isolatuaren mapan agertzen zenarekin (3.5 irudia). Orain eremu maximoa 5 aldiz handiagoa da.



3.16 Irudia: Eremu elektrikoaren intentsitatea 10 nm-ko tarteaz banandutako $a = 120$ nm-ko zilarrezko bi nanopartikula esferikorentzako, funtzio dielektrikoa Druderen funtzioak emana izanik; ezkerrean modo dipolarraren erresonantzia ($\lambda = 843$ nm) eta eskuman modo kuadropolarrarena ($\lambda = 545$ nm).

Baina, 3.16 irudian, argi eta garbi ikusten da bi partikula elkarren ondoan jartzen baditugu bien artean asko handitzen dela eremua, eta honi *hot-spot* edo puntu beroa deitzen zaio¹.



3.17 Irudia: Aurreko irudiko (3.16 irudia) bi esferen arteko zonaldea handituta

Horrez gain, kolore urdinei zehaztasunez begiratu gero, ohartzen gara bi modo (dipolarra eta kuadropolarra) ezberdinen itxurak bereizten direla. Puntu beroaren egitura ere ezberdina da, 3.17 irudian ikusten den bezala. Esferak hurbiltzean karga-dentsitatea bi esferen tarteko gainazalean pilatzen da, kondentsadore baten moduan.

¹Kontuan izan azken atal hau bi partikulen kasuan gertatzen dena laburki ikusteko dela eta ez dela azterketa sakonagorik egin tamaina/distantzia efizienteenak bilatuz.

4. KAPITULUA

Ondorioak

Proiektu honetan nanoantena plasmonikoen jokabidearen oinarrian dauden zenbait kontzeptu landu dira, hala nola argiaren sakabanaketa eta erresonantzia plasmonikoak. Ondoren nanopartikula esferiko metaliko eta dielektrikoen propietateak aztertu dira. Lehenik eta behin 3.1 eta 3.2 ataletan ikusi da sakabanaketako sekzio eragilea sekzio eragile geometrikoa baino zenbait aldiz handiagoa lortzen dela plasmoi-erresonantzia dela eta. Nanopartikula dielektrikoen kasuan ikusi da praktikan ez dagoela xurgapenik, nanopartikula metalikoen kasuan badagoen bitartean. Horrez gain nanopartikularen erradioa alda dezakegu erresonantzia guk nahiago dugun uhin-luzeretan eman dadin; honetarako 3.3 eta 3.9 mapak oso erabilgarriak izan dira, erradio eta uhin-luzera ezberdinetarako sekzio eragileak nola aldatzen diren ematen baitigute.

Gainera, ikusi da, dielektrikoaren kasurako nanopartikularen erradioak zertxobait handiagoa izan behar duela, zilarrarenarekin alderatuz, erresonantzia uhin-luzera antzekoetan eman dadin. Hurbileko eremu-elektromagnetikoak ere ezberdinak izan dira bi kasuetarako: nanopartikula metalikoetan eremua partikularen kanpoaldean idartzen zen bitartean, dielektrikoen kasuan partikularen barnealdean ematen dira eremu indartsuenak.

Bestalde, material bakoitzaren eremu elektromagnetikoaren banaketa angeluarra ere garrantzitsua da. Ikusi da metalikoen kasuan alboetara dezente desbideratzen dela eta dielektrikoetan aurrerantzagoa dela sakabanaketa. Erabili nahi den antena motarako bata edo bestea izan daiteke egokiagoa; adibidez eguzki-xafla finetan sakabanaketa angelu handietan desbideratzeak argia harrapatzea ahalbidetu dezake.

Kontuan izan behar da lan honetan ingurune homogeenak baino ez ditugula aztertu. Az-

tertzeke geratu da nanopartikula bi inguruneren arteko gainazalean egonez gero gertatzen dena, adibidez, baina kasu hau ezin aztertu daiteke Mie teoriaren bidez, beharrezko simetria galduko baikenuke.

Azken atalean (3.3 atala) bi partikulaz osatutako sistema aztertu da laburki. Hemen azterketa sakonagorik egin ez bada ere, argi eta garbi ikusi da eremua izugarri handitzen dela bi partikulen arteko tarte edo *gap*-ean. Sakonago aztertzeke geratu dira bi gorputzez osatutako sistema hauek, halaber geometria, tamaina, *gap*, edota material ezberdinetarako. Hain zuzen ere geometria honen antzekoak dira gaur egun nanoantena optiko moduan erabilienak nanofotonikan.

Eranskinak

Mie koefizienteen ebazpena.

A.1 Esfera baten xurgapena eta sakabanaketa

Suposatu zorizko uhin-bektore *konstante* \mathbf{c} eta funtzio *eskalar* bat (ψ) hartuta \mathbf{M} *bektore-funtzioa* eraikitzen dugula¹:

$$\mathbf{M} = \nabla \times (\mathbf{c}\psi) \quad (\text{A.1})$$

eta horrez gain beste funtzio bektorial bat (hau ere dibergentzia gabekoa)

$$\mathbf{N} = \frac{\nabla \times \mathbf{M}}{k}. \quad (\text{A.2})$$

Bai \mathbf{M} -k eta bai \mathbf{N} -k dibergentzia nulua izateaz gain uhin-ekuazio bektoriala betetzen dute, eta gainera bien arteko erlazioa kontuan izanik eremu elektromagnetiko batek behar dituen propietateak dituzte. Orduan froga daiteke (ikus [7], 4.1 atala) koordenatu esferikoetan (2.8 irudia) uhin-ekuazioaren soluzioak ondorengoak direla:

$$\psi_{emn} = \cos(m\phi)P_n^m(\cos\theta)z_n(kr) \quad (\text{A.3})$$

$$\psi_{omn} = \sin(m\phi)P_n^m(\cos\theta)z_n(kr), \quad (\text{A.4})$$

¹Honen dibergentziak ere nulua izan behar du.

non e eta o azpindizeek *bikoiti* eta *bakoiti* esan nahi duten, eta z_n Besselen lau funtzio esferikoetako edozein izan daitekeen ($j_n, y_n, h_n^{(1)}$ edo $h_n^{(2)}$). Gainera \mathbf{M} eta \mathbf{N} funtzioak horrela idatz daitezke:

$$\begin{aligned}\mathbf{M}_{emn} &= \frac{-m}{\sin\theta} \sin(m\phi) P_n^m(\cos\theta) z_n(\rho) \hat{\mathbf{e}}_\theta - \cos(m\phi) \frac{dP_n^m(\cos\theta)}{d\theta} z_n(\rho) \hat{\mathbf{e}}_\phi, \\ \mathbf{M}_{omn} &= \frac{m}{\sin\theta} \cos(m\phi) P_n^m(\cos\theta) z_n(\rho) \hat{\mathbf{e}}_\theta - \sin(m\phi) \frac{dP_n^m(\cos\theta)}{d\theta} z_n(\rho) \hat{\mathbf{e}}_\phi, \\ \mathbf{N}_{emn} &= \cos(m\phi) \frac{dP_n^m(\cos\theta)}{d\theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_n(\rho)] \hat{\mathbf{e}}_\theta - m \sin(m\phi) \frac{P_n^m(\cos\theta)}{\sin\theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_n(\rho)] \hat{\mathbf{e}}_\phi + \\ &\quad \frac{z_n(\rho)}{\rho} \cos(m\phi) n(n+1) P_n^m(\cos\theta) \hat{\mathbf{e}}_r, \\ \mathbf{N}_{omn} &= \sin(m\phi) \frac{dP_n^m(\cos\theta)}{d\theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_n(\rho)] \hat{\mathbf{e}}_\theta + m \cos(m\phi) \frac{P_n^m(\cos\theta)}{\sin\theta} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} [\rho z_n(\rho)] \hat{\mathbf{e}}_\phi + \\ &\quad \frac{z_n(\rho)}{\rho} \sin(m\phi) n(n+1) P_n^m(\cos\theta) \hat{\mathbf{e}}_r.\end{aligned}$$

Orain uhin erasotzaileak x polarizazioa duenez, $\mathbf{E}_i = E_0 e^{ikr \cos\theta} \hat{\mathbf{e}}_x$ bezala idatz dezakegu, eta bektore harmoniko esferikoetan garatuz

$$\mathbf{E}_i = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=m}^{\infty} (B_{emn} \mathbf{M}_{emn} + B_{omn} \mathbf{M}_{omn} + A_{emn} \mathbf{N}_{emn} + A_{omn} \mathbf{N}_{omn}), \quad (\text{A.5})$$

eta $\sin m\phi$ eta $\cos m\phi$ -ren arteko ortogonaltasunagatik \mathbf{M}_{emn} eta \mathbf{M}_{omn} ere ortogonalak dira,

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{M}_{em'n'} \cdot \mathbf{M}_{omn} \sin\theta d\theta d\phi = 0 \quad (\text{A.6})$$

zentzuan. Era berean $(\mathbf{N}_{omn}, (\mathbf{N}_{emn})), (\mathbf{M}_{omn}, (\mathbf{N}_{omn}))$ eta $(\mathbf{M}_{emn}, (\mathbf{N}_{emn}))$ ere elkarrekiko ortogonalak dira. Izan ere, $\sin m\phi$ eta $\cos m\phi$ -ren ortogonalitate-propietate hauek m orden ezberdineko bektore harmoniko guztiak elkarrekiko ortogonalak izatea dakarte². Hemen ondorioztatzen da harmoniko esferikoetan nahi genuen eremuaren garapena uhin lauetan:

$$\mathbf{E}_i = E_0 \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} (\mathbf{M}_{oln}^{(1)} - i \mathbf{N}_{eln}^{(1)}). \quad (\text{A.7})$$

²Frogapena ez da bat ere tribiala, ikus [7] liburua 4.2 atala

A.1.1 Barne eta sakabanatutako eremuak

Aurreko atalean bezala, kontsidera dezagun x -polarizazioko uhin erasotzailea a erradioko esfera homogeneo eta isotropoan. Lehen ondorioztatu den bezala dagokion eremu magnetiko erasotzailea horrela idatz dezakegu:

$$\mathbf{H}_i = \frac{-k}{\omega\mu} E_0 \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} (\mathbf{M}_{eln}^{(1)} + i\mathbf{N}_{oln}^{(1)}). \quad (\text{A.8})$$

Horrez gain sakabanatutako eremu elektromagnetikoa $(\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s)$ eta barnekoa $(\mathbf{E}_1, \mathbf{H}_1)$ ere garatu ditzakegu harmoniko esferikoetan. Esferaren eta ingurunearen arteko mugaldebaldintzak direla eta ondorengo inposatzen dugu:

$$(\mathbf{E}_i + \mathbf{E}_s - \mathbf{E}_1) \times \hat{\mathbf{e}}_r = (\mathbf{H}_i + \mathbf{H}_s - \mathbf{H}_1) \times \hat{\mathbf{e}}_r = 0. \quad (\text{A.9})$$

Azken mugaldebaldintza honek, bektore harmoniko esferikoen ortogonaltasunak eta eraso eremuaren garapenaren formak esango digute zein itxurakoak diren sakabanatutako eta esferaren barneko eremuak: garapen hauetan koefiziente guztiak nuluak dira $m \neq 1$ kasurako. Bestalde jatorrian eremua finitua izan dadin $j_n(k_1 r)$ Besselen funtzio esferikoa hartu behar dugu, non k_1 esferaren uhin-zenbakia den. Beraz, $(\mathbf{E}_1, \mathbf{H}_1)$ eremuaren garapena

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_1 &= \sum_{n=1}^{\infty} E_n (c_n \mathbf{M}_{oln}^{(1)} - i d_n \mathbf{N}_{eln}^{(1)}) \\ \mathbf{H}_1 &= \frac{-k_1}{\omega\mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (d_n \mathbf{M}_{eln}^{(1)} + i c_n \mathbf{N}_{oln}^{(1)}) \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

da, non $E_n = i^n E_0 \frac{2n+1}{n(n+1)}$ den, eta μ_1 esferaren permeabilitatea.

Esferaren kanpoaldeko eremuan bai j_n eta bai y_n onargarriak dira, beraz sakabanatutako eremuak bi funtzioen menpekoak izango dira. Hau errazteko komeni da Hankelen $h_n^{(1)}$ eta $h_n^{(2)}$ funtzio esferikoak erabiltzea. Funtzio hauen definizioa edo propietateak [14] matematikako liburuan edo gaur egun interneteko Wolfram webgunean [15] aurki daitezke. aurki daitezke, baina guri inporta zaiguna da $kr \gg n^2$ eremuan duten portaera:

$$h_n^{(1)}(kr) \sim \frac{(-i)^n e^{ikr}}{ikr} \quad (\text{A.11})$$

$$h_n^{(2)}(kr) \sim -\frac{i^n e^{-ikr}}{ikr} \quad (\text{A.12})$$

Lehenengoa *irteten* den uhin esferikoari dagokio; bigarrena *sartzen* denari. Zentzu fisi-koan, sakabanatutako eremua irteten diren uhinez osatua egongo da partikulatik distantzia handietara, eta beraz $h_n^{(1)}$ -ren funtzio bakarrik izango da. Orduan sakabanatutako eremua

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_s &= \sum_{n=1}^{\infty} E_n (ia_n \mathbf{N}_{eln}^{(3)} - b_n \mathbf{M}_{oln}^{(3)}) \\ \mathbf{H}_s &= \frac{k_1}{\omega \mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (ib_n \mathbf{N}_{oln}^{(3)} + a_n \mathbf{M}_{eln}^{(1)}), \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

non (3) goi-indizeak esan nahi duen menpekotasun erradiala $h_n^{(1)}$ funtzioak emandakoa dela.

B. ERANSKINA

Simulazioak. Matlab programak

Kode hauetan erabili diren funtzioak honako erreferentzietatik hartu dira: *mie* [8], *calcmie_nf* eta *calcmie* [9] [10].

B.1 Errefrakzio-indizeak

*%Kasu metalikorako (Ag) edo dielektrikorako errefrakzio indizea
%kalkulatzeko programa*

```
function [m,lambda]=refractiveindex(landamin, landamax, pp, model,material)
%konstanteen definizioa
c=3*10^8;
e0=8.85418717*10^-12;
e=1.602176*10^-19;
hbar=1.054571*10^-34;
joul=e/hbar;
gamma=0.062*e/hbar;

%maiztasuna bektore moduan definituta nahi dugun tartean:
lambda=linspace(landamin,landamax,pp);
lambda1=lambda.*10^-9;
```

```

w=2*pi*c./(lambda1);

bat=ones(size(lambda));
switch material
    case 'Ag'
        %materialaren araberako aldagaiak
        wp=7.44*e/hbar;%Ag
    end

switch model
    case 'metal'
        %Druderen eredua:
        edrude=bat-wp^2./(w.^2+1i*w.*gamma);
        e1=real(edrude);
        e2=imag(edrude);
        mod=sqrt(e1.^2+e2.^2);
        n=sqrt((mod+e1)/2);
        k=sqrt((mod-e1)/2);
        m=n+1i*k;% Errefrakzio indize konplexua

    case 'dielektriko'
        n=2.0;
        k=0.0;
        m=n+1i*k;
    end
end

```

B.2 Qsca-Qeff kalkulua erradio eta uhin-luzera ezberdineta- rako

```

%Qsca Ag lortzeko grafikoa
%Hemen erabiltzen den errefrakzio indizea (m) refractiveindex.m programan
%kalkulatzen da.

```

```
pp=300; %Puntu kopurua
landamin=200; %Uhin-luzera minimoa eta maximoa
landamax=800;
rmin=0; %Esferaren erradio minimoa eta maximoa
rmax=200;
r=linspace(rmin,rmax,pp);
r1=r*10-9;

[m,lambda]=refractiveindex(landamin,landamax,pp, 'metal','Ag'); %hemen
%aukeratu 'metal' metalen kasurako edo 'dielektriko'.
lambda1=lambda*10-9;

qsca=ones(size(r));
qabs=ones(size(r));
qeff=ones(size(r));

for i=1:pp,
    for j=1:pp,
        x=2*pi*r(i)/lambda(j);
        qdenak=mie(2.0,x);
        qsca(j,i)=qdenak(5);
        qabs(j,i)=qdenak(6);
        qeff(j,i)=qsca(j,i)/(qsca(j,i)+qabs(j,i));
    end
end

%plot
figure
imagesc(r,lambda,qsca) %qeff grafikoa egiteko aldatu qsca qeff-gatik.
axis square
```

B.3 Eremu elektromagnetikoaren banaketa espaziala

```

%PROGRAMA HONEK MIE KOEFIZIENTEEKIN HURBILEKO EREMUA KALKULATZEN DU ESFERA
%BATEN KASUAN. AUKERATU BEHAR DA METALEZKOA,DIELEKTRIKOA DEN
%parametro orokorrak
pp=50;%puntu kopurua

x=linspace(-300,300,pp);%nondik nora eremuaren grafikoa(erradioaren
%balioarekin konparatzea komeni)
y=linspace(-300,300,pp);
landamin=0;
landamax=1400;
rmin=0;
rmax=200;
r=linspace(rmin,rmax,pp);
nm=1.0;%inguruaren errefrakzio indizea
radio=170;%r bektorearen zenbatgarren osagaia, beste aukera bat
%zuzenean jartzea erradioa

%uhin luzera bakoitzerako errefrakzio indizeak
[m,lambda]=refractiveindex(landamin,landamax,pp, 'metal','Ag');

intensity=zeros(pp);

%dielektrikoaren kasuan:
%r=170;
%nsdi=2.0;
lambda=([700 502 392 322]);% maximoak agertzen diren balioak
%dielektrikoaren kasuan
%lambda=([688 426 340 298]); %maximoak agertzen diren balioak
%zilarraren kasuan

for l=1:1,
    for i=1:pp,

```

```

    for j=1:pp,
        [E,H]=calcmie_nf(radius,2.0,nm,lambda(1),x(i),y(j),0); %dielektrikoaren
        %kasuan errefrakzio indizea beti n=2.0 ordezkatu m(i)-gatik

        intensity(i,j)=sqrt(abs(E(1))^2+abs(E(2))^2+abs(E(3))^2)
        /(abs(exp(1i*2*pi*x(i)/lambda(1))));
    end
end
%grafikoa
subplot(2,2,1)
figure
imagesc(x,y,intensity)
axis square
end

```

B.4 Eremu elektromagnetikoaren banaketa angeluarra

```

%Banaketa angeluarraren grafikoak
%Datu orokorrak
pp=300;
landamin=200;
landamax=1400;
%Metalaren kasuan erradioa eta errefrakzio indizea Druderen ereduarekin
rmet=120;
[m,lambda]=refractiveindex(landamin,landamax,pp, 'metal','Ag');
%Dielektrikoaren kasuan erradioa eta errefrakzio indizea
rdi=170;
mdi=2.0;
nm=1;

uhin=[688 426 340 288];%Metalaren kasuan maximoak dauden uhin luzerak

figure

```

```
for i=1:4,
indize=find(abs(lambda-uhin(i))<2.5,1);
mmet=m(indize);
[S,C,ang]=calcmie(rmet,mmet,nm,lambda(indize),pp);
SL=sqrt(abs(S(1,1,:)).^2);
SR=sqrt(abs(S(2,2,:)).^2);
SL=squeeze(SL)';
SR=squeeze(SR)';
angulo=ang;
angulo(pp+1:2*pp)=180+ang;
angulo=angulo*pi/180;
SL=padarray(SL,[0 300],'symmetric','post');
SR=padarray(SR,[0 300],'symmetric','post');
%Grafikoak koordinatu polarretan
subplot(2,2,i)
polar(angulo,SL./max(SL))
end
phi=linspace(0,pi*2,2*pp);
[angulo, phi]=meshgrid(angulo,phi);
kaka=linspace(1,1,2*pp);
intens=kaka'*SL;
x=intens.*(sin(angulo)).*cos(phi);
y=intens.*(sin(angulo)).*sin(phi);
z=intens.*cos(angulo);
%Gainazalaren hiru dimentsioko grafikoa
figure
surf(x,y,z);
shading interp
camlight
light
axis off
```

Bibliografia

- [1] P.Bharadwaj, B.Deutsch, and L.Novotny, *Optical Antennas*. Advances in Optics and Photonics 1, 438483, 2009.
- [2] A. Garcia-Etxarri, *Modelization of plasmonic nanoantennas for optical microscopy and surface enhanced spectroscopy*. UPV-EHU Thesis, 2010.
- [3] E. Palik, *Handbook of optical constants of solids*. Academic Press, 1985.
- [4] P. Biagioni, J.-S. Huang, and B. Hecht, *Nanoantennas for visible and infrared radiation*, vol. 1. IOP Publishing, 2012.
- [5] L. Bergamini, *Plasmonic properties of metal-manoparticles interacting with molecules*. PhD thesis, Università di Módena e Reggio Emilia, Italia, 2014.
- [6] L.Novotny and B.Hecht, *Principles of Nano-optics*. Cambridge University press, 2006.
- [7] C. F.Bohren and D. R.Huffman, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. Wiley-Interscience Publication, 1983.
- [8] C. Mätzler, *MATLAB Functions for Mie Scattering and Absorption*. Institut für Angewandte Physi, Research Report No. 2002-08.
- [9] J.-P. Schäfer, *Implementierung und Anwendung analytischer und numerischer Verfahren zur Lösung der Maxwellgleichungen für die Untersuchung der Lichtausbreitung in biologischem Gewebe*. Univerität Ulm, 2011.
- [10] J.-P. Schäfer, S.-C. Lee, and Kienle, *Calculation of the near fields for the scattering of electromagnetic waves by multiple infinite cylinders at perpendicular incidence*. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Trans. 113(16), 2012.

BIBLIOGRAFIA

- [11] F. J. G. de Abajo and A. Howie, *Retarded field calculation of electron energy loss in inhomogeneous dielectrics*. Phys. Rev. B 65, 115418, 2002.
- [12] U. Hohenester and A. Trugler, *MNPBEM A Matlab toolbox for the simulation of plasmonic nanoparticles*. Comp. Phys. Commun. 183 37, 2012.
- [13] A. D. Rakic, A. B. Djuriic, J. M. Elazar, and M. L. Majewski, *Optical properties of metallic films for vertical-cavity optoelectronic devices*. Applied Optics 37,5271, 1998.
- [14] I. Gradshteyn and I. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*. Academic Press, 1980.
- [15] “Wolfram math world.” <http://mathworld.wolfram.com>.