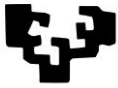


eman ta zabal zazu



Universidad
del País Vasco

Euskal Herriko
Unibertsitatea



ZTF-FCT

Zientzia eta Teknologia Fakultatea
Facultad de Ciencia y Tecnología



Gradu Amaierako Lana
Fisikako Gradua

Argiaren sakabanaketa eta xurgapena nanopartikuletan

Egilea:
Maitane Ferreres Eceiza
Zuzendaria:
Nerea Zabala Unzalu
Luca Bergamini



Laburpena

Argiaren sakabanaketa fisikari askoren aztergai izan da urte askotan zehar. Rayleigh-en teoria izan zen fenomeno hau azaltzen lehena, Astrofisika eta Optikaren arloan. Gaur egun, hainbat aurkikuntza berriren atzean dagoen Plasmonikaren oinarria da. Plasmoiak partikulak argiarekin edo elektroien sorta batekin erasotzean sortzen diren kuasipartikulak dira, elektroien oszilazioen kuantizazioak hain zuzen. Lan honetan fenomeno hau aztertuko da, nanopartikula esferikoen sakabanaketan zentratuz. Kasu honetan Mie-k proposatutako teoriako soluzio analitikoak erabil daitezke uhin elektromagnetikoen sakabanaketa deskribatzeko, baina egitura konplexuagoetarako metodo konputazionalak erabili behar dira ezinbestean. Problema hau ebatzeko metodo numeriko ezberdinak garatu dira. Lan honetan, metodo horietako bat den DDA (dipole-dipole approximation) erabiliz argiaren sakabanaketa fenomenoaren simulatu da nanopartikula esferiko metaliko eta dielektrikoen kasurako. Emaitzak Mie-ren soluzio analitikoekin bateragarriak direla ikusita, nanohagak deituriko partikula anisotropoen sakabanaketa aztertu da.

Aurkibidea

1	Sarrera	1
2	Oinarri teorikoa	3
2.1	Uhin-elektromagnetikoen sakabanaketa	3
2.2	Uhin-elektromagnetikoen sakabanaketa aztertzeke metodoak	10
3	Emaitzak eta analisisa	15
3.1	Argiaren sakabanaketa nanopartikula metalikoetan	15
3.2	Argiaren sakabanaketa nanopartikula dielektrikoetan	23
3.3	Argiaren sakabanaketa nanorod batean	25
4	Ondorioak	33
A	Kalkuluak	35
A.1	Esfera baten eremu induzitua	35
A.2	Iturri lokalizatuen erradiazio elektromagnetikoa	36

1. Kapituluia

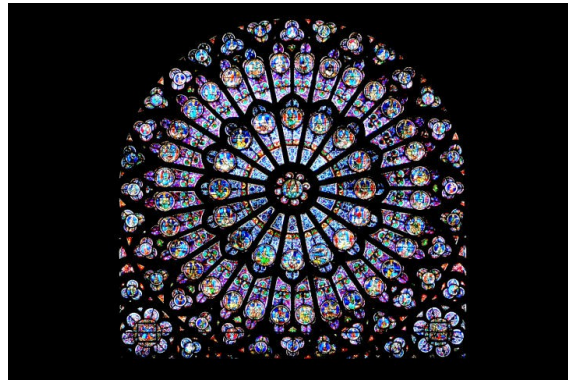
Sarrera

Argiak betidanik piztu du jakinmina gizakiarengan. Argiaren izaera nolakoa den jakitea eta sortzen dituen fenomenoak ulertzea urte askotako ikerketen emaitza izan zen. Historian zehar hainbat ikerketa eta teoria izan dira. Horrela, XXVIII. mendean, Newtonen teoria zen onartuena, argia kolore ezberdineko partikulez osatutako korpuskulo bat zela zioena. Lehenago, 1678 urtean, Cristian Huygens-ek argia eter izeneko ingurunean zehar transmititzen zen uhin bat zela proposatu zuen. Baina teoria honek ez zuen indarririk hartu harik eta, 1801. urtean Thomas Youngek bi zirikituen esperimenteria egin zuen arte. Bertan, argiak uhin izaera zuela frogatu zen. Hala ere, teoria honek zalantzak sortzen zituen, izan ere, ordura arte ezagututako uhinak hutsean transmititzea ezinezkoa baitzen.

1845. urtean Michael Faraday-k eremu magnetiko baten bidez argiaren polarizazioa aldatu zitekeela aurkitu zuen. Bi urte beranduago, argia maiztasun altuko bibrazio elektromagnetiko bat zela proposatu zuen. James Clerk Maxwellek, Faraday, Gauss, Ampere eta Coulombek burututako esperimenterietan oinarrituz, uhin hauek matematikoki aztertu zituen. Fenomeno elektromagnetikoak guztiz deskribatzen dituzten lau ekuazio proposatu zituen.

Maxwell-en ekuazioak argiaren sakabanaketa ulertzeko funtsa izan ziren. Uhin elektromagnetikoen ekuazio hauetan oinarrituta Rayleigh-ek partikula oso txikietarako argia nola sakabanatzen zen azaldu zuen. Azalpen honetatik ondoriozta daiteke, esate baterako, zeruaren kolore urdina. Partikula uhin-elektromagnetiko erasotzailearen uhin-luzeraren tamainakoa denean ordea, soluzio hau ez da baliagarria. Tamaina hauetako partikula esferikoentzat 1908. urtean Gustav Mie Maxwell-en ekuazioen soluzio analitikoa aurkitu zuen, ondoren, Lorenz-ek eta Debye-k garatu zutena. Tamaina handiagoetarako, aldiz, optika geometrikoaren bidez azal daiteke argiaren sakabanaketa.

Nahiz eta kontzeptu klasikoa izan, argiaren sakabanaketa azkenengo urteetan egin diren garapen teknologiko eta zientifiko askoren atzean dago. Argiak partikula metaliko bat erasotzen duenean elektroigasaren oszilazio kolektiboa sortzen da. Oszilazio hau plasmoideturiko kuasipartikularekin deskribatzen da. Oszilazio hauek bolumenekoak zein gainazalekoak izan daitezke eta erresonantzia-maiztasun berezi bat dute. Gainazaleko plasmoiden kontzeptua Rufus Ritchie-k 1957. urtean sortu zuen. Partikula nanometrikoen plasmoidak dira elizetako beirateen kolore ikusgarrien arrazoi, baina horretaz gain soluzio kimiko baten kontzentrazioa molekula mailan zenbatzea ahalbidetzen dute eta minbiziaren kontrako terapietan erabiliak izan daitezke.



1.1 Irudia: Pariseko Notre Dame elizako beiratea. Beirak urrezko nanopartikulak dauzka. Beiratea argizatzerakoan urrezko partikulen gainazalean plasmoidak sortzen dira, eta hauen bibrazioek kolore dizdiratsuak sortzen dituzte.

Azken urtetan, plasmoidetik eta argiaren sakabanaketatik abiatuta "pintza optikoak" eraiki dira. Pintza hauek izugarriko aurrerapenak ekarri dituzte, batez ere biomedikuntzan, nanopartikulak edo proteinak maneiatzea ahalbidetzen baitute. Plasmoiden beste aplikazio interesgarri bat nanoantennak dira. Plasmoidiek eremu elektromagnetikoak handitzeko duten ahalmenean oinarritzen dira, abiadura handiagoko komunikazioak lortuz. Bestalde, beste aplikazio interesgarrien artean espektroskopia edo hurbileko-eremuko mikroskopio optikoa daude. Halaber, eguzki-energian erabiltzen diren sentsoreetan ere garapenak eman daitezke, aurkikuntza berri hauek erabiliz. Azaldutako guztiarekin ondorioztatzen da teknologia berri honen garrantzia gero eta handiagoa dela, eta etorkizunean iraultza teknologikoa ekar dezakeela.

Aurrerakuntza hauen guztien oinarria nanopartikuletan gertatzen den argiaren sakabanaketa da. Lan honetan fenomeno hau aztertuko da, eta berau ulertzeko garatu diren teoria ezberdinak ikusiko dira. Metodo horietako bat erabiliz saiakera ezberdinak egingo dira nanopartikula esferikoekin. Lortutako emaitzak konparatu ondoren, geometria konplexuagoak simulatuko dira.

2. Kapituluia

Oinarri teorikoa

2.1 Uhin-elektromagnetikoen sakabanaketa

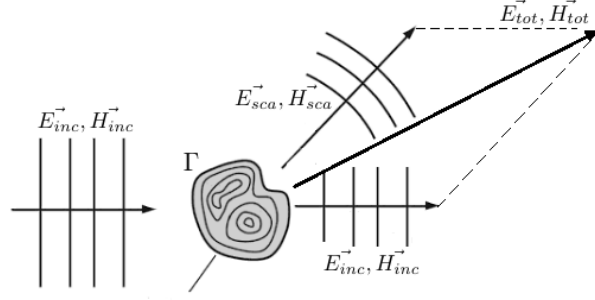
Uhin elektromagnetiko batek lagin bat erasotzen duenean sakabanaketa edo difrakzioa gertatzen da. Uhin erasotzailearen uhin-luzerak erasotutako materialaren tamaina antzekoa edo handiagoa duenean, ezin da azaldu Fresnelen errefrakzio eta islapen teorien bidez. Difrakzio eta sakabanaketaren arteko ezberdintasuna erasotutako lagin honen mugetan dago; mugak leunak direnean sakabanaketa gertatzen da, zorrotzak direnean aldiz, difrakzioa.

Sakabanaketaren atzean dagoen fisika Fresnelen ekuazioek deskribatzen dutena da: eremu elektromagnetiko erasotzaileak, objektuaren partikulak kitzikatzen ditu hauek mugimenduan jarritz. Azeleratutako partikula hauek atzeratutako eremu elektromagnetiko bat sortzen dute, gainontzeko partikuletan eragina duena. Objektuko partikula guztiek sortutako eremuaren baturari sakabanaketa-eremua deritzo.

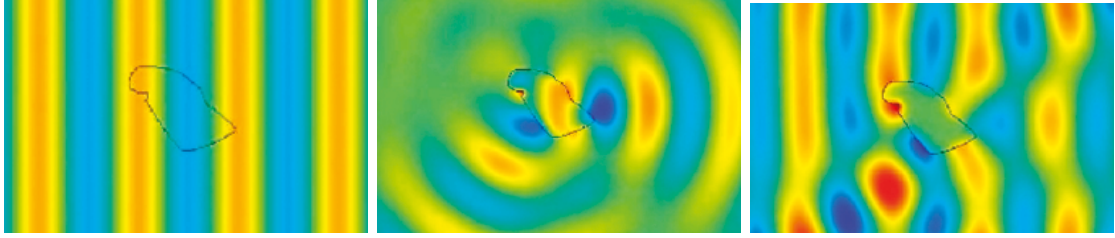
2.1.1 Nanopartikulen sekzio eragilea eta teorema optikoa

Sakabanaketa prozesuan sakontzeko, 2.1 Irudian ikus daitekeen problema klasikoa aztertuko da [1]. Bertan, uhin lau batek Γ azalerako eta propietate ezaguneko (ϵ_r permitibitate dielektrikoa, μ_r iragazkortasuna) objektu leun bat erasotzen du.

Eremu erasotzailea (\vec{E}_{inc} , \vec{H}_{inc}) eta ingurunearen permitibitatea ϵ eta iragazkortasuna μ ezagututa (hutsaren iragazkortasuna hartu da $\mu_r=1$), espazioko edozein puntutan eremu elektromagnetikoa (\vec{E}_{tot} , \vec{H}_{tot}) zehaztea izango da helburua. Sakabanaketa-eremua (\vec{E}_{sca} , \vec{H}_{sca}) objektutik kanpora hedatzen da eremu erasotzailearekin kontaktuan jartzerakoan. Beraz, espazioko edozein puntutan eremu osoa



2.1 Irudia: Uhin lau polarizatu batek, lagin-objetuan korrante bat induzitzen du. Eredu elektromagnetiko totala sakabanaketa eta erasotze-eremuetan deskonposatuta ikus daiteke.



(a) Eraso-uhina, \vec{H}_{inc} .

(b) Sakabanaketa-uhina, \vec{H}_{sca} .

(c) Eredu totala, \vec{H}_{tot} .

2.2 Irudia: Sakabanaketa prozesuko eremu magnetikoak, $\epsilon = -10 + i$ permitibitateko nanopartikula metaliko batean [1].

erasotzailearen eta sakabanatutakoaren batura izango da,

$$\vec{E}_{tot} = \vec{E}_{inc} + \vec{E}_{sca} \quad (2.1)$$

$$\vec{H}_{tot} = \vec{H}_{inc} + \vec{H}_{sca}. \quad (2.2)$$

Objektu sakabanatzaileak eraso-uhinaren energia zati bat xurgatzen du. Energia Poynting bektorearen bidez adieraz daiteke, energiaren kontserbazio-legea ondorengo moduan idatziz:

$$\vec{S}_{tot} = \vec{S}_{inc} + \vec{S}_{sca} + \vec{S}_{ext}, \quad (2.3)$$

non Poynting bektorearen denboraren bataz bestekoa eraso-eremuaren kasurako $\vec{S}_{inc} = \frac{1}{2} \text{Re}\{\vec{E}_{inc} \times \vec{H}_{inc}^*\}$ den eta $\vec{S}_{sca} = \frac{1}{2} \text{Re}\{\vec{E}_{sca} \times \vec{H}_{sca}^*\}$ sakabanaketa-eremurako. Sisteman hedatutako energia osoa $\vec{S}_{tot} = \frac{1}{2} \text{Re}\{\vec{E}_{tot} \times \vec{H}_{tot}^*\}$ modura adierazten da.

Eremu erasotzailearen eta sakabanatutakoaren arteko interferentziaren ondorioz sortutako energia $\vec{S}_{ext} = \frac{1}{2} Re\{\vec{E}_{inc} \times \vec{H}_{sca}^* + \vec{E}_{sca} \times \vec{H}_{inc}^*\}$ moduan adierazten da.

Energia-kanal ezberdinen arteko erlazioa bilatzeko 2.3 ekuazioa Γ gainazal itxian zehar integra daiteke. Eraso-uhina laua denez, $\int_{\Gamma} \vec{S}_{inc} d\vec{s} = 0$ onartzen da. Erasotutako gainazalean ez da galerarik egongo, metaletan hau egia da $Im(\epsilon) > 0$ den bitartean. Ondorioz, gainazalak xurgatutako energia, bertan sartzen den Poynting bektorea integratuz kalkula daiteke, hau da,

$$W_{abs} = - \int_{\Gamma} \vec{S}_{tot} d\vec{s}. \quad (2.4)$$

Era berean, gainazaletik kanporanzko osagaia integratuz lor daiteke sakabanaketa-energia,

$$W_{sca} = \int_{\Gamma} \vec{S}_{sca} d\vec{s}. \quad (2.5)$$

Desagertutako energia interferentziaren gaiak emandakoa izango dela ondorioztatzen da:

$$W_{ext} = - \int_{\Gamma} \vec{S}_{ext} d\vec{s}. \quad (2.6)$$

Energiaren kontserbazio printzipioari jarraituz $W_{ext} = W_{abs} + W_{sca}$ beteko da. Beraz, hau izango da xurgapen eta sakabanaketa prozesuen ondorioz galdutako energia.

Kalkulatutako energietatik sekzio eragileak lor daitezke, horretarako uhin erasotzailearen azalera unitateko potentzia definitu da: $|\vec{S}_{inc}| = \frac{1}{2} c \epsilon_0 \epsilon_r |\vec{E}_0|^2$, non \vec{E}_0 eremu elektrikoaren anplitudea, ϵ_0 hutsaren permitibitate dielektrikoa, ϵ_r ingurua-aren permitibitate dielektriko erlatiboa eta c argiaren abiadura hutsean diren. Hau horrela, sekzio eragileak kalkula daitezke:

$$\sigma_{abs} = \frac{W_{abs}}{|\vec{S}_{inc}|} \quad (2.7)$$

$$\sigma_{sca} = \frac{W_{sca}}{|\vec{S}_{inc}|} \quad (2.8)$$

$$\sigma_{ext} = \frac{W_{ext}}{|\vec{S}_{inc}|} = \sigma_{abs} + \sigma_{sca}. \quad (2.9)$$

Sekzio eragile hauen kalkulurako eraso-uhina eta sakabanaketa-uhina ezagutu

behar dira [2]. Uhin elektromagnetiko erasotzailea uhin laua izango da,

$$\begin{aligned}\vec{E}_{inc} &= \vec{E}_0^{inc} e^{ik\hat{n}_0\vec{r}} \\ &\underset{kr \rightarrow \infty}{=} \frac{i2\pi}{k} \left[\delta(\hat{n}_0 + \hat{r}) \frac{e^{-ikr}}{r} - \delta(\hat{n}_0 - \hat{r}) \frac{e^{-ikr}}{r} \right] \vec{E}_0^{inc}\end{aligned}\quad (2.10)$$

$$\vec{E}_0^{inc} \cdot \hat{n}_0 = 0 \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned}\vec{H}_{inc} &= \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu_0}} e^{ik\hat{n}_0\vec{r}} \hat{n}_0 \times \vec{E}_0^{inc} \\ &\underset{kr \rightarrow \infty}{=} \frac{i2\pi}{k} \left[\delta(\hat{n}_0 + \hat{r}) \frac{e^{-ikr}}{r} - \delta(\hat{n}_0 - \hat{r}) \frac{e^{-ikr}}{r} \right] \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu_0}} \hat{n}_0 \times \vec{E}_0^{inc},\end{aligned}\quad (2.12)$$

non \vec{E}_0^{inc} bektoreak polarizazio-norabidea adierazten duen, k uhin-bektorearen modulua, \hat{n}_0 argizatze-norabideko bektorea eta $\delta(\hat{r})$ angelu solidoaren delta funtzioa diren. Sakabanaketa-uhina aldiz, uhin esferikoa izango da,

$$\vec{E}_{sca} \underset{kr \rightarrow \infty}{=} \vec{E}_0^{sca} \frac{e^{ikr}}{r} \quad (2.13)$$

$$\vec{E}_0^{sca} \cdot \hat{r} = 0 \quad (2.14)$$

$$\vec{H}_{sca} = \frac{1}{i\omega\mu_0} \Delta \times \vec{E}_{sca} \underset{kr \rightarrow \infty}{=} \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu_0}} \frac{e^{ikr}}{r} \hat{r} \times \vec{E}_0^{sca}, \quad (2.15)$$

non $\omega = \frac{k}{\sqrt{\epsilon\mu_0}}$ den. Behin eremu elektromagnetikoen adierazpenak ezagututa, aurretik emandako ekuazioen bidez Poynting bektoreak kalkula daitezke, ondoren energiak eta azkenik sekzio eragileak [3]:

$$\sigma_{ext} = \frac{4\pi}{k} \text{Im}(\vec{E}_1^{sca} \cdot \hat{e}_0). \quad (2.16)$$

Ekuazio hau Teorema Optikoa bezala ezaguna da, \hat{e}_0 eraso-uhinaren polarizazio norabide-bektorea izanik.

2.1.2 Funtzio dielektrikoa

Atal honetan, eraso-uhinak sakabanaketa objektuan sortutako propietate optikoak aztertuko dira. Izan ere, objektu baten xurgapen eta sakabanaketa propietateak haren erantzun optikoarekin erlazionatuta daude. Materialaren elektroiak eremu

elektromagnetikoarekin interakzionatzen dutenean, oreka posizioaren inguruan oszilatzeko hasten dira. Oszilazio hau osziladore indargetua kontsidera daiteke, $\vec{E}_{inc} = \vec{E}_0^{inc} e^{-i\omega t}$ kanpo-eremuaren menpe dagoen elektroi baten higidura-ekuazioa honela idatzi baitaiteke:

$$m\ddot{\vec{x}} + \Gamma\dot{\vec{x}} + k\vec{x} = e\vec{E}_{inc}. \quad (2.17)$$

Aurreko ekuazioan $\vec{x}(t) = \vec{x}_0 e^{-i\omega t}$ moduko soluzio partikularrak sartuz, desplazamendua lortzen da:

$$\vec{x}(t) = \frac{e\vec{E}_0^{inc}}{m} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}, \quad (2.18)$$

non, $\gamma = m\Gamma$ eta $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$ diren. Desplazamendutik polarizazioa $\vec{P} = \vec{x}(t)Ne$ lor daiteke, N partikula kopurua eta e elektroiaren karga izanik,

$$\vec{P} = \epsilon_0 \vec{E}_0^{inc} \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \quad (2.19)$$

non, $\omega_p^2 = \frac{Ne^2}{m\epsilon_0}$ plasma-maiztasuna, ω_0 erresonantzia-maiztasuna eta γ indargetze faktorea diren.

Polarizazioa eremu elektrikoarekin erlazionatzen da permitibitate elektrikoaren bidez, $\vec{P} = \chi\epsilon_0\vec{E}$ eta $\epsilon_r = 1 + \chi$. Ondorioz,

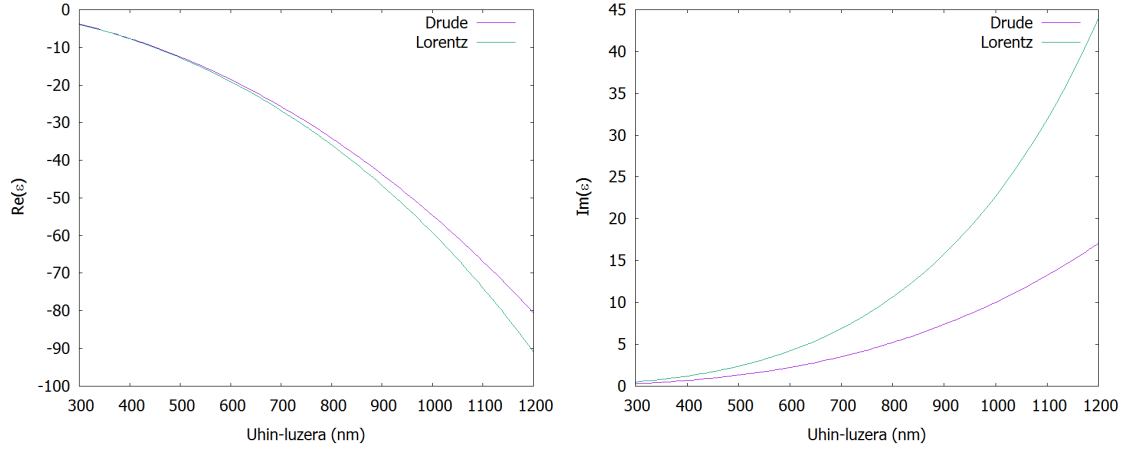
$$\epsilon_r = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}. \quad (2.20)$$

Permitibitatearen ekuazio honi Lorentzen eredu deritzo. Eredu hau erabiltzen da eraso-uhinaren energia energia-tarte debekatua baina handiagoa denean. Kasu honetan, energia elektroiak balentzia bandatik eroankortasun bandara pasatzeko adina izango da. Osziladore ugari dauden kasurako ($j=1, \dots, N$) Lorentz eredu ondorengo moduan idatzi daiteke:

$$\epsilon_r = 1 + \sum_{j=1}^N \frac{\omega_{pj}^2}{\omega_{0j}^2 - \omega^2 - i\gamma_j\omega}. \quad (2.21)$$

Elektroi askeen hurbilketa onartuz gero, hau da, elektroiak ez dutenean ioiarekiko loturarik, $\omega_0 = 0$ izango da. Kasu honetan, elektroi-gas askea geldi dagoen ioi positiboz osatutako zonaldean higitzen da. Kasu hau, Drude-Sommerfeld eredu da:

$$\epsilon_r = 1 - \sum_{j=1}^N \frac{\omega_{pj}^2}{\omega^2 + i\gamma_j\omega}. \quad (2.22)$$



(a) Permitibitatearen alde erreal.

(b) Permitibitatearen alde irudikaria.

2.3 Irudia: Urrearen permitibitatea uhin-luzeraren menpe. Morez Drude eredua, berdez Lorentzena. Erabili diren $\hbar\omega_p=9.03$ eV, $\hbar\gamma=0.241$ eV eta $\hbar\omega_0=0.415$ eV [4]-tik hartu dira.

Hurbilketa hau baliagarria izango da metal alkalinoetan uhin-erasotzailea ultramo-rea denean eta metal nobleetan maiztasuna optikoa denean. Maiztasun handiagoe-tarako ordea, materialaren elektroien banden arteko trantsizioek ekarpena izango dute. Beraz ekarpen hori ω_0 -k ematen duenez, hurbilketa hau ez da baliagarria izango, 2.3 Irudian ikus daitekeen bezala.

Hala ere, Druderen zein Lorentzen erduetan onartzen da atomoek jasandako eremua kanpo uhin erasotzailearena dela. Hau horrela, onartzen da kontsideratu-tako atomoaren gainean inguruko atomoek ez dutela eraginik. Baina kanpo-eremu honek momentu dipolar bat sortuko du atomoaren gainean, eta momentu honen ondorioz eremu elektriko bat sortuko da. Honen eraginez, inguruko atomoek kontsideratu dugun atomoak sortutako eremua eta kanpo eremua jasango dute. Aldi berean, kontsideratu den atomoa, ingurukoek sortutako eremuaren menpe egongo da. Induzitutako barne eremu honi \vec{E}_{ind} deituko zaio.

Beraz, eremu totala $\vec{E}_{tot} = \vec{E}_{inc} + \vec{E}_{ind}$ izango da. Jakinik desplazamendu bektorearen erlazioa polarizazioa eta eremuarekin ondorengoa dela

$$\vec{P} = \vec{D} - \epsilon_0 \vec{E}_{inc} = (\epsilon - \epsilon_0) \vec{E}_{inc}, \quad (2.23)$$

eta

$$\vec{E}_{ind} = \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0} \quad (2.24)$$

beteko dela (ikus A.1 eranskina), ondorengoa ondorioztatzen da,

$$\vec{E}_{tot} = \frac{\epsilon + 2\epsilon_0}{3\epsilon_0} \vec{E}_{inc}. \quad (2.25)$$

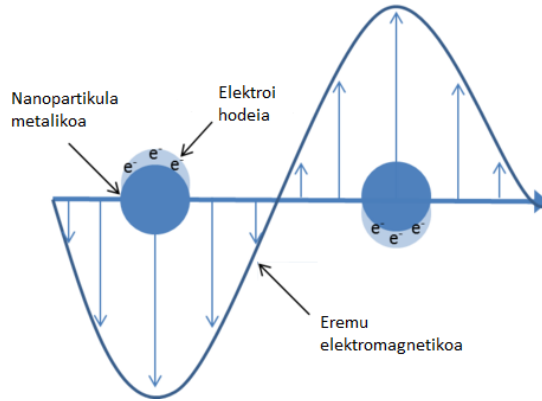
Polarizazioa dipolo guztien polarizabilitateekin erlazionaturik dago, $\vec{P} = N\alpha\vec{E}_{tot}$. Hau jakinda eta 2.24 ekuazioa erabiliz, Clausius-Mossotti erlazioa ondorioztatzen da:

$$\frac{\epsilon - \epsilon_0}{\epsilon + 2\epsilon_0} = \frac{N\alpha}{3\epsilon_0}. \quad (2.26)$$

Erlazio hau oso interesgarria da. Izan ere, formula honek polarizabilitatea bezalako propietate mikroskopiko bat permitibitatearekin lotzen du, zeinek ondorio makroskopikoak dituen.

2.1.3 Plasmoiak

Nanopartikulen gainazalean dauden eroankortasun-bandako elektroi askeak eraso-eremu baten aurrean kitzikapen bat jasaten dute. Elektroi hauek eremu elektrikoari jarraituz desplazatzen dira. Partikulen nukleoak ordea, kontrako noranzkoan desplazatzen dira. Nahiz eta elektroiaren desplazamenduarekin konparatuz arbuigarria izan, desplazamendu honek elektroiaren desplazamenduan erresistentzia bat eragiten du. Eremua kentzerakoan, elektroiak hasierako egoerara itzultzen dira.



2.4 Irudia: Nanopartikula metaliko baten gainazaleko plasmoiaren oszilazioa.

Kitzikapen elektromagnetiko honek sortutako oszilazioari gainazaleko plasmoiaren polaritona (Surface Plasmon Polaritons, SPP) deitzen zaio. Maiztasun jakin batzuetarako, eraso-uhinaren maiztasuna eta oszilazioen maiztasuna akoplatu egiten dira ($\omega = \omega_p$), kasu honetan $\gamma = 0$ eginez, funtzio dielektrikoa $\epsilon(\omega) = 0$ da (Drude eredua, ikus 2.22 ekuazioa). Fenomeno honi gainazaleko plasmoiaren erresonantzia (Surface Plasmon Resonance, PSR) deritzen. Partikula metaliko itxi batean gertatzen diren oszilazioak gainazaleko plasmoi lokalizatuenak (Localized Surface Plasmons, LSP) deitzen dira (ikus 2.4 Irudia).

Material bakoitzak errefrakzio-indize bat du, uhin batek bertatik pasatzerakoan

duen abiadura adierazten duena, eta materialaren permitibitatea eta iragazkortasunarekin $n = \sqrt{\epsilon\mu}$ erlazioa du. Beraz, errefrakzio-indizea konplexua izango da permeabilitate eta permitibitatearen balioen arabera, hau da, $n = n_1 + in_2$ osagai erreala eta irudikarian bananduko da.

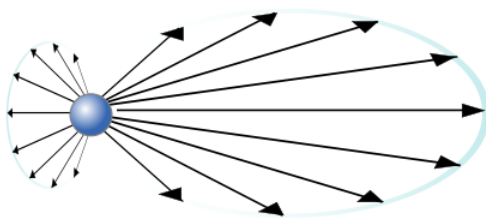
Uhin-erasotzailearen maiztasuna material baten plasma-maiztasunaren gainetik badago ($\omega > \omega_p$), $\epsilon > 0$ izango da, eta ondorioz, errefrakzio-indizea erreala izango da. Beraz, elektro-plasman uhin elektromagnetikoak hedatuko dira. Aldiz, maiztasun horren azpitik ($\omega < \omega_p$), $\epsilon < 0$ eta n irudikaria da, hortaz uhin elektromagnetikoak iraungitu egingo dira, metal perfektuetan bezala.

2.2 Uhin-elektromagnetikoen sakabanaketa aztertzeke metodoak

Uhin elektromagnetikoen sakabanaketa aztertzeke beharrezkoa da Maxwell-en ekuazioak ebaztea. Baina Maxwellen ekuazioen soluzio zehatzak esfera, esferoide edo zilindro infinituaren kasurako bakarrik dira ezagunak, hau dela eta, hurbilketa metodoak beharrezkoak dira.

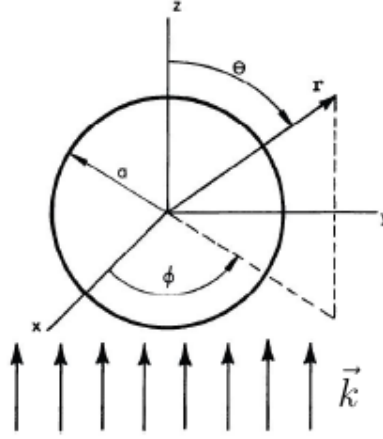
2.2.1 Mie teoria

1908. urtean Gustav Mie partikula esferikoen sakabanaketaren lehen teoria osoa garatu zuen. Teoria honen arabera, sakabanaketa aurreraka gertatzen da. Partikularen erradioa argi erasotzailearen uhin-luzera baino handiagoa den kasuko ohiko sakabanaketa 2.5 Irudian ikus daiteke.



2.5 Irudia: Mie sakabanaketaren eskema. Argia gehien bat aurrerara sakabanatzen da.

Mie teoriak Maxwell-en ekuazioen soluzio bat aurkezten du, esfera edo zilindro baten kasurako. Ondoren, kasu hau aztertuko da 2.6 Irudian aurkezten den eskemari jarraituz. Bertan \vec{k} uhin-bektorea duen uhin-elektromagnetiko batek partikula



2.6 Irudia: Partikula esferiko batean zentratutako koordenatu sistema esferikoa (r, theta, phi).

esferiko bat kitzikatzen du.

Uhin erasotzailearen eremu elektromagnetikoak $\vec{E}_{inc} = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$ eta $\vec{H}_{inc} = \vec{H}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$ dira. Ingurune isotropiko, homogeen eta lineal bat dela suposatzen bada uhin-ekuazioa beteko da:

$$\begin{aligned}\vec{\nabla}^2 \vec{E} + k^2 \vec{E} &= 0 \\ \vec{\nabla}^2 \vec{H} + k^2 \vec{H} &= 0\end{aligned}\tag{2.27}$$

non, $k^2 = \omega^2 \epsilon \mu$ den. Gainera iturririk ez dagoen puntuetan,

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \cdot \vec{E} &= 0 \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{H} &= 0\end{aligned}\tag{2.28}$$

eremu elktrikoa eta magnetikoa beraien artean erlazionaturik daude,

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \times \vec{E} &= i\omega\mu\vec{H} \\ \vec{\nabla} \times \vec{H} &= i\omega\epsilon\vec{E}.\end{aligned}\tag{2.29}$$

Aurreko ekuazioak osagai esferikoetan ebatzi daitezke Bohren & Huffman liburuan [3] agertzen den modura. Uhinak \hat{z} norabidean hedatzen dela eta eremua elktrikoa \hat{x} norabidean polarizatu dela suposatuko da. Hau horrela, eremu erasotzailea ($\vec{E}_{inc}, \vec{H}_{inc}$), sakabanaturiko eremua ($\vec{E}_{sca}, \vec{H}_{sca}$) eta esferaren barneko eremua

$(\vec{E}_{ind}, \vec{H}_{ind})$ ondorengoak dira:

$$\begin{aligned}\vec{E}_{inc} &= E_0 \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} (\vec{M}_{l,n,o}^{(1)} - i\vec{N}_{l,n,e}^{(1)}) \\ \vec{H}_{inc} &= \frac{-k}{\omega\mu} H_0 \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} (\vec{M}_{l,n,e}^{(1)} + i\vec{N}_{l,n,o}^{(1)})\end{aligned}\quad (2.30)$$

$$\begin{aligned}\vec{E}_{sca} &= \sum_{n=1}^{\infty} E_n (ia_n \vec{N}_{l,n,e}^{(3)} - b_n \vec{M}_{l,n,o}^{(3)}) \\ \vec{H}_{sca} &= \frac{-k'}{\omega\mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (ib_n \vec{N}_{l,n,o}^{(3)} + a_n \vec{M}_{l,n,e}^{(1)})\end{aligned}\quad (2.31)$$

$$\begin{aligned}\vec{E}_{ind} &= \sum_{n=1}^{\infty} E_n (c_n \vec{M}_{l,n,o}^{(1)} - id_n \vec{N}_{l,n,e}^{(1)}) \\ \vec{H}_{ind} &= \frac{-k'}{\omega\mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (d_n \vec{M}_{l,n,e}^{(1)} - ic_n \vec{N}_{l,n,o}^{(1)}).\end{aligned}\quad (2.32)$$

Eremuetan agertzen diren a_n, b_n, c_n eta d_n koefizienteak eremuen muga-baldintzak askatzen lortzen dira. \vec{M} eta \vec{N} bektore funtzioak, Bessel-en funtzioak eta Legendren polinomioen funtzioak dira hurrenez hurren (ikus definizioa [3] erreferentzian).

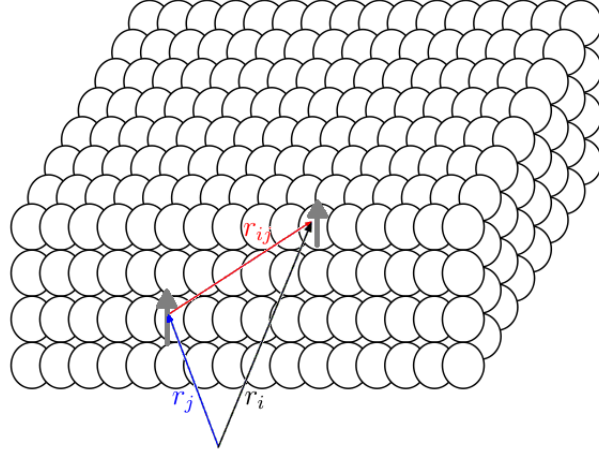
Bukatzeko, esferaren sekzio eragilea kalkulatu da. Horretarako, esferaren inguruko gainazal bat zeharkatzen duen energia elektromagnetikoaren fluxua kalkulatu da eta 2.1.1 ataleko definizioak osagai esferikoetan adieraziz, lortzen diren sekzio eragileen emaitzak honakoak dira:

$$\sigma_{sca} = \frac{\lambda^2}{2\pi} \sum_{l=1}^{\infty} (2l+1) (|a_l|^2 + |b_l|^2) \quad (2.33)$$

$$\sigma_{ext} = \frac{\lambda^2}{2\pi} \sum_{l=1}^{\infty} (2l+1) \text{Re}(a_l + b_l) \quad (2.34)$$

$$\sigma_{abs} = \sigma_{ext} - \sigma_{sca}. \quad (2.35)$$

Hala ere, 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 erabili behar dira.



2.7 Irudia: Dipolo-dipolo hurbilketaren eskema.

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

2.2.2 DDA metodoa

Dipolo-dipolo hurbilketa (DDA) edozein geometria duen objektu baten sakabanaketa eta xurgapen-prozesuak simulatzeko erabiltzen da. DDA metodoa 1964. urtean proposatu zen lehenengo aldiz, DeVoe-ek teknika hau erabili zuenean molekula agregatuen propietate optikoak aztertzeko. Ondoren, 1973an Purcell eta Pennypacker-ek aurreko metodoari atzerapen efektua gehitu zioten izarrarteko hautsaren azterketan erabiltzeko. 1980an Draine [5] eta 1993an Draine eta Flatau-k [6] DDA metodoa implementatu zuten Fortran hizkuntzan: DDSCAT programa.

DDA metodoan objektu sakabanatzailea dipolo puntualez osatutako sare batez ordezkutzen da ($j=1, \dots, N$), ikus 2.7 Irudia. Puntu bakoitza \vec{r}_j posizioan kokatuta dago, α_j polarizabilitatea dutelarik. Kanpo eremu bat ($\vec{E}_{inc,j} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}-i\omega t}$) ezartzen denean, puntu bakoitzak momentu dipolar bat edukiko du: $\vec{P}_j = \alpha_j \vec{E}_j$. Puntu bateko momentu dipolar honek inguruko puntuetan eremu bat sortuko du. Aldi berean, ingurukoek sortutako eremuak puntu honetan eragina izango du. Beraz, \vec{r}_j posizioko eremu osoa hurrengoa da:

$$\vec{E}_j = \vec{E}_{inc,j} - \sum_{k \neq j} \vec{A}_{jk} \vec{P}_k. \quad (2.36)$$

Ekuazio honetan $-\sum_{k \neq j} \vec{A}_{jk} \vec{P}_k$ ekarpena \vec{r}_j posizioan, \vec{r}_k posizioko \vec{P}_k dipoloak sor-

tutako eremu elektrikoa da. Bestalde, \vec{A}_{jk} biderkagaia 3×3 matrizea da (bere kalkulua A.2 eranskinean ikus daiteke) eta k dipoloak j dipoloaren gainean sortzen duen eremu elektrotik dator,

$$\vec{A}_{jk} = \frac{e^{ikr_{jk}}}{r_{jk}} \times \left[k^2 (\hat{r}_{jk} \hat{r}_{jk} - I_3) + \frac{ikr_{jk} - 1}{r_{jk}^2} (3\hat{r}_{jk} \hat{r}_{jk} - I_3) \right], (j \neq k) \quad (2.37)$$

non, $k = \omega/c$, $r_{jk} = |\vec{r}_j - \vec{r}_k|$ eta $\hat{r}_{jk} = (\vec{r}_j - \vec{r}_k)/r_{jk}$ diren. Sakabanaketa-problema sinplifikatzeko $\vec{A}_{jj} = \alpha_j^{-1}$ bezala definitzen da, α_j polarizabilitatea izanik. Horrela $3N$ ekuazio-sistema konplexu lineala betetzen duten \vec{P}_j polarizazioak aurkitu beharko dira soilik,

$$\sum_{k=1}^N \vec{A}_{jk} \vec{P}_k = \vec{E}_{inc,j}. \quad (2.38)$$

Ondoren, 2.38 ekuaziotik \vec{P}_j polarizazioak lortzerakoan, C_{ext} , C_{abs} eta C_{sca} sekzio-eragile normalizatuak kalkula daitezke:

$$C_{ext} = \frac{4\pi k}{|\vec{E}_0|^2} \sum_{k=1}^N \text{Im}(\vec{E}_{inc,j}^* \cdot \vec{P}_j) \quad (2.39)$$

$$C_{abs} = \frac{4\pi k}{|\vec{E}_0|^2} \sum_{k=1}^N \left[\text{Im}(\vec{P}_j \cdot (\alpha_j^{-1})^* \vec{P}_j^*) - \frac{2}{3} k^2 |\vec{P}_j|^2 \right]. \quad (2.40)$$

Sakabanaketa sekzio eragilea $C_{sca} = C_{ext} - C_{abs}$ izango da, behin \vec{P}_j polarizazioak ezagututa kalkula daitekeena. Sakabanaketa-eremua ere polarizazioaren arabera kalkula daiteke. Distantzia luzea denean ondorengo eremua egongo da:

$$\vec{E}_{sca} = \frac{k^2 e^{-ikr}}{r} \sum_{k=1}^N e^{-ik\hat{r}_j} (\hat{r}_j \hat{r}_j - I_3) \vec{P}_j. \quad (2.41)$$

3. Kapituluia

Emaitzak eta analisisia

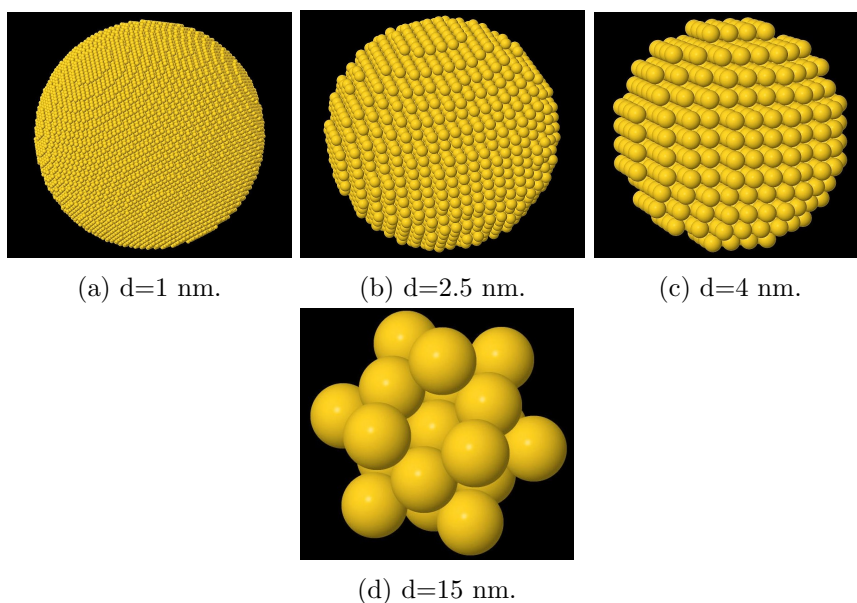
Argiaren sakabanaketa edozein itxuratako objektuan aztertzeke aurreko atalean aipatu den DDSCAT programa erabili da. Programa honekin nahi den formako dipoloz osatutako egitura sortzen da [7]. Egitura hau eraldatu egin daiteke nahi den tamaina eta dipolo-sarea lortzeko. Behin hau eginda, DDSCAT programak eraikitako egitura erabiliz eremuak eta sekzio eragileak kalkulatzeko dituzte.

Hasteko, sakabanaketa-prozesua aztertu da nanopartikula esferikoetan. Partikula metaliko eta dielektrikoetarako simulazioak egin, eta sekzio eragileak eta eremuak aztertu dira kasu bakoitzerako. Gainera, partikulen tamainak sakabanaketa-prozesuan duen eragina ikusi da. Ondoren, nanopartikula anisotropoak aztertu dira, uhin erasotzaileen polarizazio ezberdinak kontuan hartuz.

3.1 Argiaren sakabanaketa nanopartikula metalikoetan

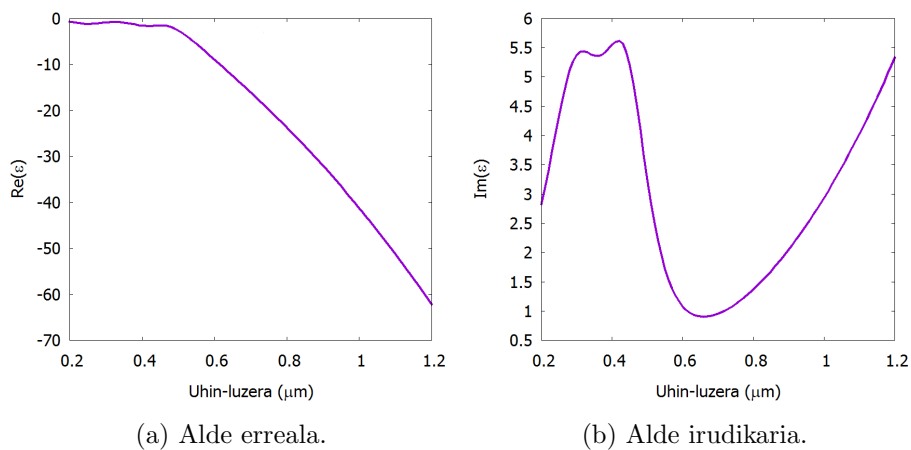
Nanopartikula metalikoen kasua aztertzeke urrea aukeratu da lehenengo, tarte ikusgai duen xurgapen baxua dela eta oso erabilia baita. Hasteko, $r=25$ nm erradioko urrezko esfera simulatu da, inguruan ura duela suposatuz ($n=1.36$ [1]).

DDA metodoa esfera dipolo-sare batez ordezkatzean datza, sistema jarraitua diskretizatuz. Lehenik, distantzia ezberdinak erabili dira dipolo horien arteko distantziak duen eragina aztertzeke. Dipoloen artean 1 nm, 2.5 nm, 4 nm eta 15 nm-ko distantziak ezarri egin dira simulazioak, 3.1 Irudian ikusi daitezkeen bezala. Sare bakoitzaren kasurako dipolo kopurua asko aldatzen da: dipoloen arteko distantzia 15 nm-koa denean 19 dipolo erabili dira; 4 nm-ko kasuan 912 dipolo erabili dira; 2.5 nm-rako 4224 dipolorekin egin da simulazioa; eta 1 nm-tarako 65752 erabili dira.



3.1 Irudia: DDSCAT programan simulazioa egiteko erabili diren egitura esferikoak, 25 nm-ko erradioa ezarri da dipoloen arteko distantzia aldatuz.

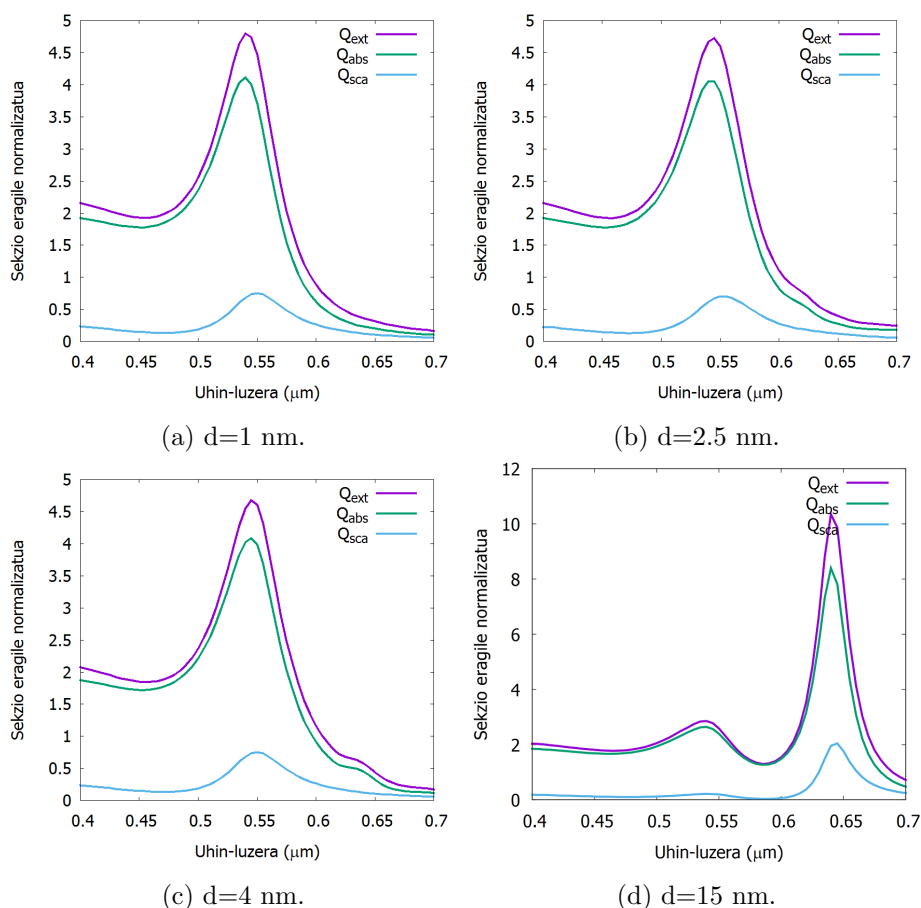
Urrearen funtzio dielektrikoa Johnson and Christy-k lortutako balio esperimenteratik hartu da [8]. Uhin-luzerarekiko permitibitatearen zati irudikaria eta erreala nola aldatzen diren ikus daiteke 3.2 Irudian.



3.2 Irudia: Urrearentzat erabilitako funtzio dielektrikoa [8].

Behin egitura eta funtzio dielektrikoa ezarrita DDSCAT programaren bidez simulatu egin dira, dipolo bakoitzari α polarizabilitatea egotzi zaio Clausius-Mossotti ekuazioa erabiliz (2.26). Bertatik sakabanaketa, xurgapen eta deuseztatze-sekazio

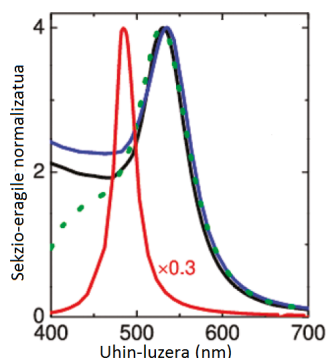
eragileak lortu dira (ikus 3.3 Irudia). Grafikoetan sekzio eragile normalizatua adierazten da, $Q = \frac{\sigma}{\pi r^2}$. Emaitzetan ikus daiteke dipoloen arteko distantziak ez duela ia eraginik esfera-egitura mantentzen den bitartean. Izan ere, dipoloen artean 4 nm-ko distantzian lortutako emaitza, 1nm-ko distantziara lortutakoaren berdina da. Distantzia 15 nm-koa denean ordea, emaitza zeharo aldatzen da.



3.3 Irudia: Urrezko 25nm-ko erradioko esferaren sekzio eragile normalizatua dipoloen arteko distantzia ezberdinetarako. Sekzio eragileak uhin luzeraren menpe adierazita daude.

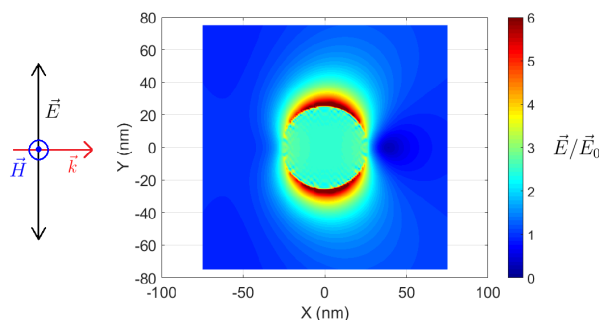
Lortutako sekzio eragileen baliogarritasuna konprobatzeko [1] artikuluan lortutako emaitza teorikoekin eta esperimetaletan alderatu da, ikus 3.4 Irudia. Lortutako emaitzak bertan egindako kalkulu teorikoekin bateragarriak direla ikusi da, hala ere, uhin-luzera $\lambda=500$ nm-koa baino txikiagoa denean datu esperimetaletatik urruntzen dira.

3.3 Irudia aztertuz ikus dezakegu $\lambda=550$ nm denean sekzio eragilea maximoa dela. Hau da, hain zuzen ere, modo dipolarrari dagokion erresonantziako uhin-luzera, geroago konprobatuko den bezala. Uhin-luzera hau hartuz, eremu elektrikoa kal-



3.4 Irudia: Deuseztatze sekzio eragilea uhin-luzeraren menpe $r=25$ nm-ko urrezko esferaren kasurako. Beltzez artikuluan [1] teorikoki kalkulatu, eta puntu berdez, emaitza esperimentalak.

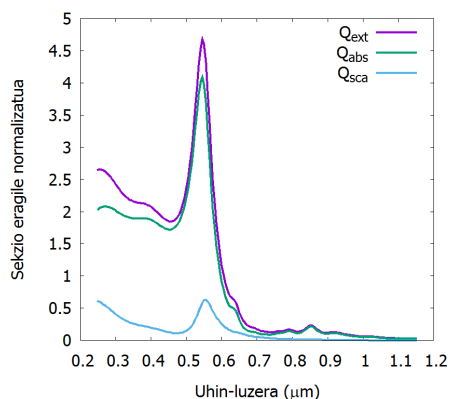
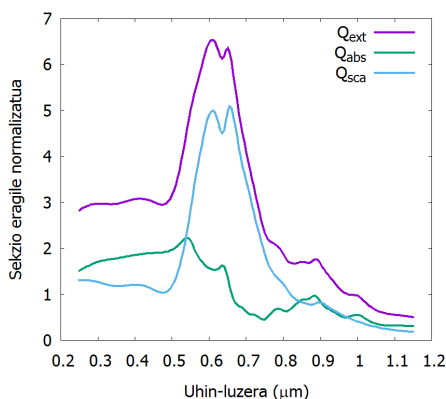
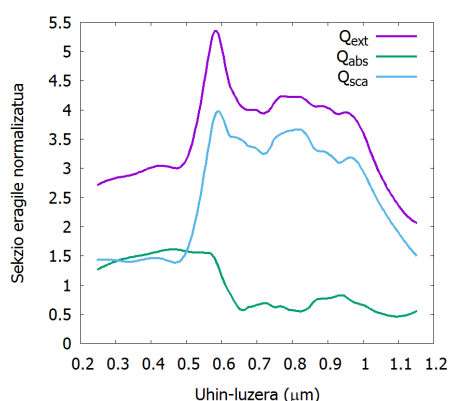
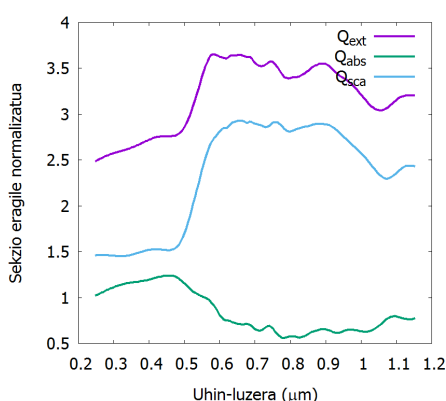
kulatu da partikularen inguruan DDSCAT programa erabiliz. Emaitza 3.5 Irudian ikus daiteke, bertan modo dipolarra argi eta garbi azaltzen da. Ikusten denez, eremu elektrikoa kontzentratuta dago partikularen inguruko goialde eta behealdean, dipolo baten uhin erasotzailearen eremu elektronikoaren norabidean. Gainera ikus daiteke eremu osoaren intentsitatea sei bider handitu dela eremu erasotzailearekiko. Bestalde, nabaria da partikularen barruan eremua ia nulua dela, izan behar zuen bezala.



3.5 Irudia: Urrezko 25 nm-ko erradioa duen nanopartikula metaliko baten kasurako eremu elektrikoaren intentsitatearen banaketa, $\lambda=550$ nm-ko uhin-luzerarako.

Ondoren, partikularen tamainak sakabanaketa prozesuan duen eragina aztertze-ko, urrezko esferaren tamaina handitzerakoan gertatutakoa aztertu da. Hau egiteko, esferaren erradioari balio ezberdinak eman zaizkio, baina erradioaren tamaina aldatu ahala, dipoloen arteko distantzia handitu da, kostu konputazionala gutxitzeko. Simulazioak egiteko erabilitako erradioak 25 nm, 60 nm, 100 nm eta 200 nm izan dira.

Lortutako emaitzetan ikus daiteke $r=25$ nm-ko erradioko urrezko esferarako,

(a) $r=25$ nm eta $d=4$ nm.(b) $r=60$ nm eta $d=10$ nm.(c) $r=100$ nm eta $d=10$ nm.(d) $r=200$ nm eta $d=15$ nm.

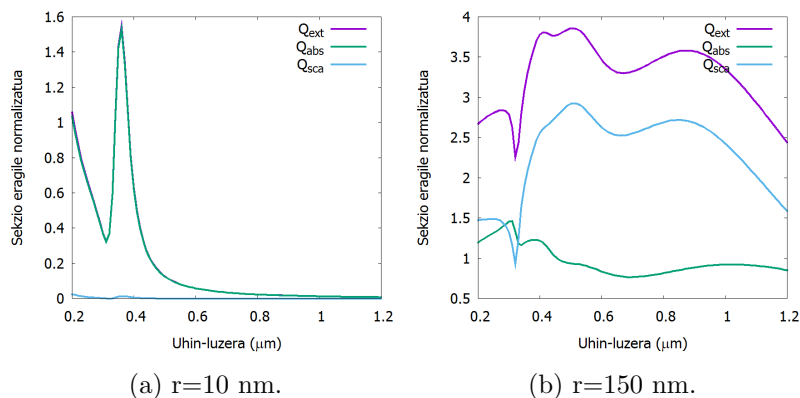
3.6 Irudia: Urrezko esferaren sekzio eragile normalizatuak erradio eta dipoloen arteko distantzia ezberdinetarako. Sekzio eragileak uhin-luzeraren menpe adierazita daude.

$\lambda=550$ nm inguruan modo dipolarra baino ez dela agertzen. Erradioa handitzen baldin bada ordea, beste hainbat modo agertzen dira, gainera espektroa uhin-luzera handiagoetara zabaltzen dela ikus daiteke. Azpimarragarria da, erradioa handitzen denean xurgapeneko sekzio eragilearen ekarpena jaisten dela deuseztatze-sekzio eragilean, izan ere, sakabanaketa sekzio eragilearena handitu egiten da.

Nanopartikula metalikoekin bukatzeko zilarrezko esfera simulatu da. Imanol Uriak gradu amaierako lanean [9] nanopartikula metalikoen sakabanaketa aztertu zuen, Mie-ren teoria erabiliz. Simulazioekin lortutakoa bertan aurkeztutako emaitzekin konparatuko da, simulaketak Mie teoriarekin bat datozela ikusteko. Kasu honetan, partikula hutsean dagoela suposatu da: inguruaren errefrakzio-indizea $n=1$ izango da.

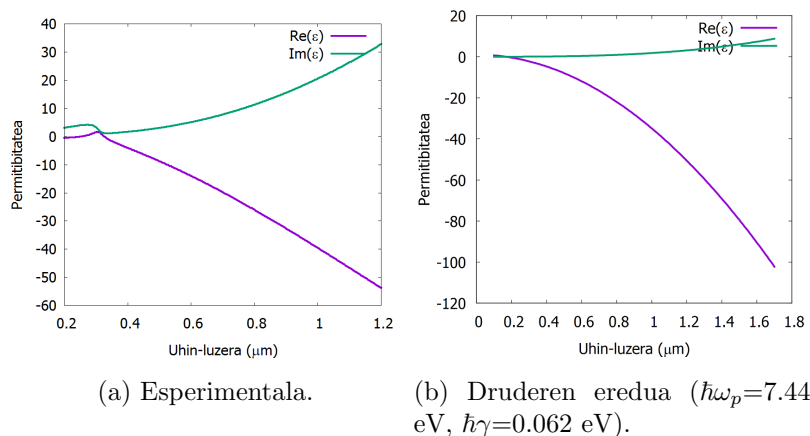
Lehenengo, 10 nm-ko erradioa duen esfera simulatu da, dipoloen artean 1 nm-ko

distantzia ezarriz. Beraz, simulazioa eraikitzeko 4224 dipolo erabili dira. Ondoren, 150 nm-ko esfera eraiki da eta dipoloen artean 10 nm-ko distantzia utziz oraingoan, 14328 dipolo erabiliz. Funtzio dielektrikoaren balio esperimentala Johnson & Christie-ren artikulutik [8] hartu da, eta sekzio eragileak kalkulatu dira erradio bakoitzerako, emaitzak 3.7 Irudian ikus daitezke.



3.7 Irudia: Zilarrezko esferaren simulazioaren emaitzak erradio ezberdinetarako, permitibitate esperimentala erabiliz [8]. Sekzio eragileak uhin luzeraren menpe adierazita daude.

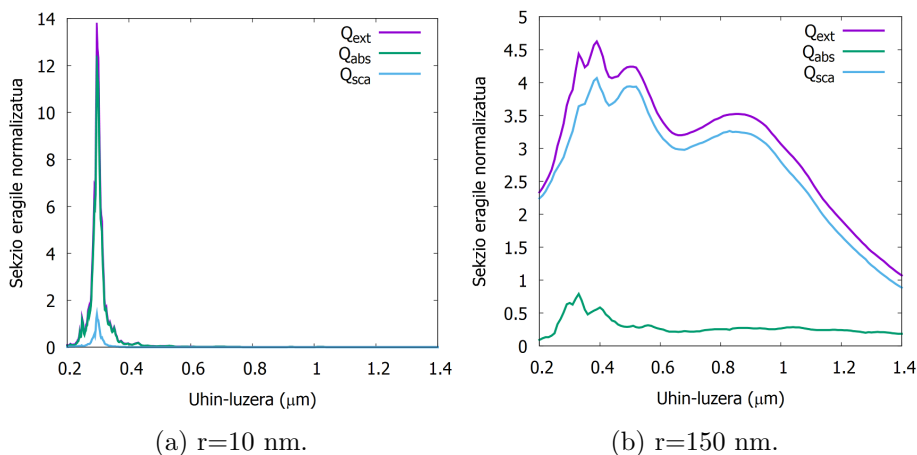
Emaitza hauek Mie-ren teoriaren bidez [9] lortutakoekin konparatuz ez dira bateragarriak. Hala ere, emaitza teoriko horiek lortzeko Druderen ereduaren bidez kalkulatu da funtzio dielektrikoa, beraz, beste saiakera bat egin da. Oraingoan, DDSCAT programari Druderen ereduaren bidez kalkulatuako funtzio dielektrikoa eman zaio. Horretarako, (2.22) ekuazioan $\hbar\omega_p=7.44$ eV eta $\hbar\gamma=0.062$ eV sartuz uhin luzera ezberdinetarako permitibitatearen kalkulua egin da.



3.8 Irudia: Erabilitako zilarraren funtzio dielektrikoak uhin-luzeraren menpe.

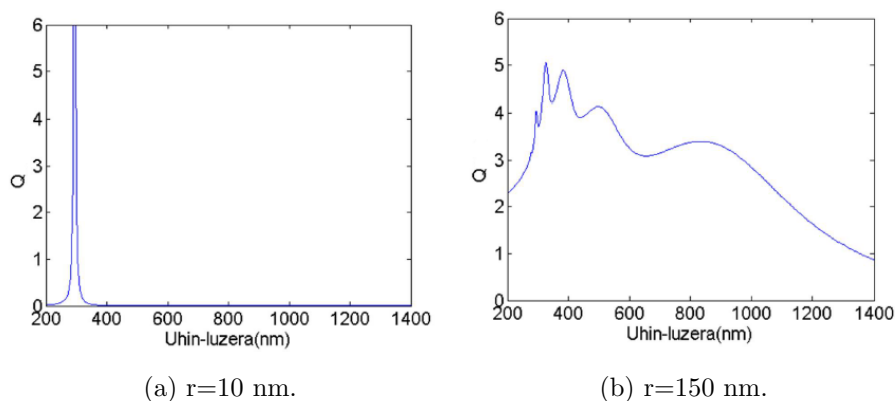
Druderen funtzio dielektrikoa erabiliz kalkulatuako sekzio eragileak 3.9 Irudian

ikus daitezke.



3.9 Irudia: Zilarrezko esferaren DDSCAT simulazioaren emaitzak erradio ezberdinetarako, Druderen permitibitatea erabiliz. Sekzio eragileak uhin-luzeraren menpe adierazita daude.

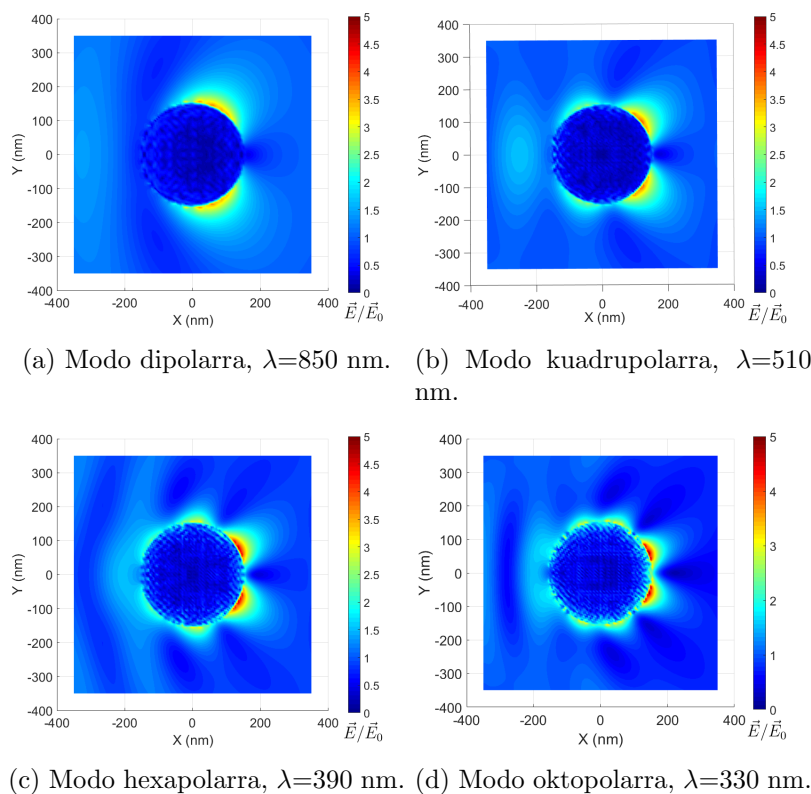
Drude eredua erabiliz kalkulaturiko sekzio eragileak Mie teorian kalkulaturikoekin bateragarriak dira, ikus 3.10 Irudia. Izan ere, sekzio eragilearen gailurren uhin-luzerak, erresonantziako uhin-luzerak hain zuzen, bat datoz.



3.10 Irudia: Zilarrezko esferaren emiatza teorikoak bi erradio ezberdinetarako. Sekzio eragileak uhin luzeraren menpe adierazita daude [9].

Emaitzetan ikus daiteke, erresonantzia 850 nm, 510 nm, 390 nm eta 330 nm-ko uhin-luzerentarako ematen dela. Hauek modo dipolar, kuadrupolar, hexapolar eta oktapolarrari dagozkie, hurrenez hurren. Modo elektrikoaren ekarpena magnetikoena baina askoz handiago da, izan ere, eremu magnetikoaren intentsitatea txikiagoa da. Beraz, eremu elektrikoaren intentsitate-banaketa aztertu da modoak ikusteko. Azterketa hau DDSCAT programarekin egin da eta emaitzak 3.11 Irudian ikus daitezke.

Bestalde, azpimarratzekoa da xurgapenaren eta sakabanaketaren ekarpen desberdinak esfera txikian eta handian. Txikian xurgapena da nagusi, handian berriz, sakabanaketak garrantzi handiagoa hartzen du.

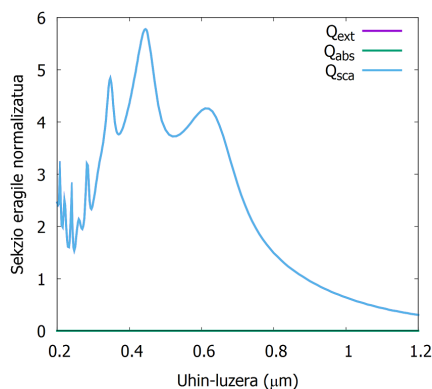


3.11 Irudia: Zilarrezko 150 nm erradiodun nanopartikula esferikoaren kasurako eremu elektrikoaren banaketa espaziala uhin-luzera ezberdinetarako.

Kalkulu honetarako, urrearen kasurako 3.5 Irudian agertzen den argiaren erasorabide bera erabili da, \vec{k} uhin-bektorea \hat{x} norabidean, eremu elektrikoa \hat{y} norabidean polarizatuta eta eremu magnetikoa \hat{z} norabidean. Espero genuen bezala, partikula metalikoa izanda, esferaren barruan eremu elektrikoa ia nulua da. Ikus daiteke esferaren eskubialdean eremu elektrikoa indartsuagoa dela, izan ere, uhin elektromagnetikoa erasotzaileak sakabanaketa-eremuarekin interferitzen du eta sakabanaketa bereziki aurrerantz gertatzen da. Bestalde, esferaren tamaina honetarako ekarpen handiena ez dator modo dipolar elektrikitik, ordena altuagoko modoetatik baizik.

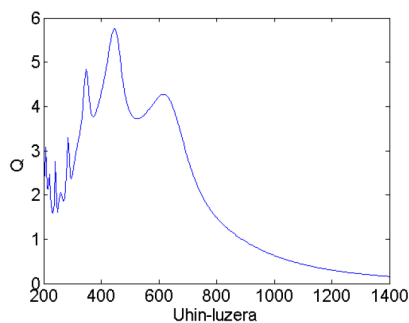
3.2 Argiaren sakabanaketa nanopartikula dielektrikoetan

Partikula dielektrikoen sakabanaketa aztertzeko kontuan hartu behar da, hauek ez dutela ia xurgapenik eragiten. Izan ere, errefrakzio-indizearen zati irudikaria nulu-tzat har daiteke, eta beraz, printzipioz, metalezko nanopartikulak baina sakabanaketa handiagoa eragingo du.



3.12 Irudia: Nanopartikula dielektrikoaren sekzio eragilea uhin-luzeraren menpe, $n=2$ errefrakzio-indize eta $r=150$ nm-ko erradorako.

Nanopartikula dielektrikoa denez, errefrakzio-indizea erreal eta konstantetzat har daiteke, zehazki $n=2$ deneko kasua aztertu da. Errefrakzio-indize hau aukuratu da zenbait dielektriko interesgarrik balio honen inguruko errefrakzio indizea dutelako: $n=1.5$ SiO_2 -ren kasuan edo $n=2.5$ TiO_2 -rako.

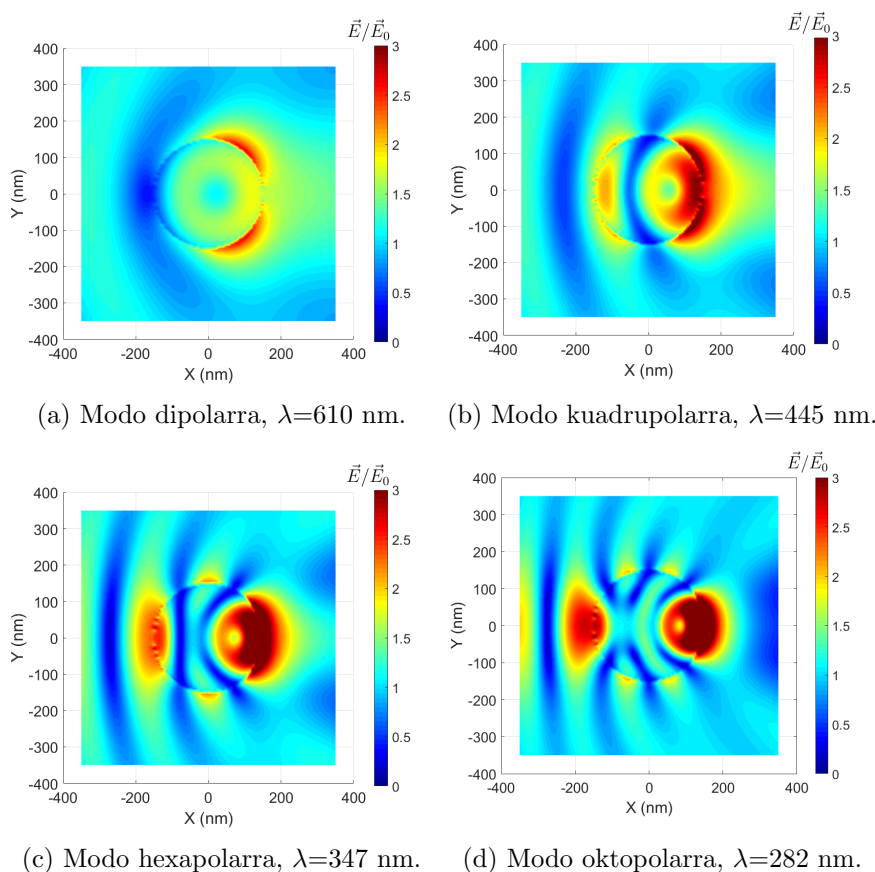


3.13 Irudia: Nanopartikula dielektrikoaren sekzio eragilea uhin-luzeraren menpe [9], $n=2$ errefrakzio-indize eta $r=150$ nm-ko erradorako.

Lehenik eta behin, partikula metalikoekin egin dugun bezala, erradio finko baterako sekzio eragile normalizatuak kalkulatu dira. Horretarako, partikularen permitibitatea ($\epsilon = n^2$) eta tamaina ($r=150$ nm) finkatu dira. DDSCAT programaren bidez simulatu da eta 3.12 Irudian ikus daitezkeen emaitzak lortu dira.

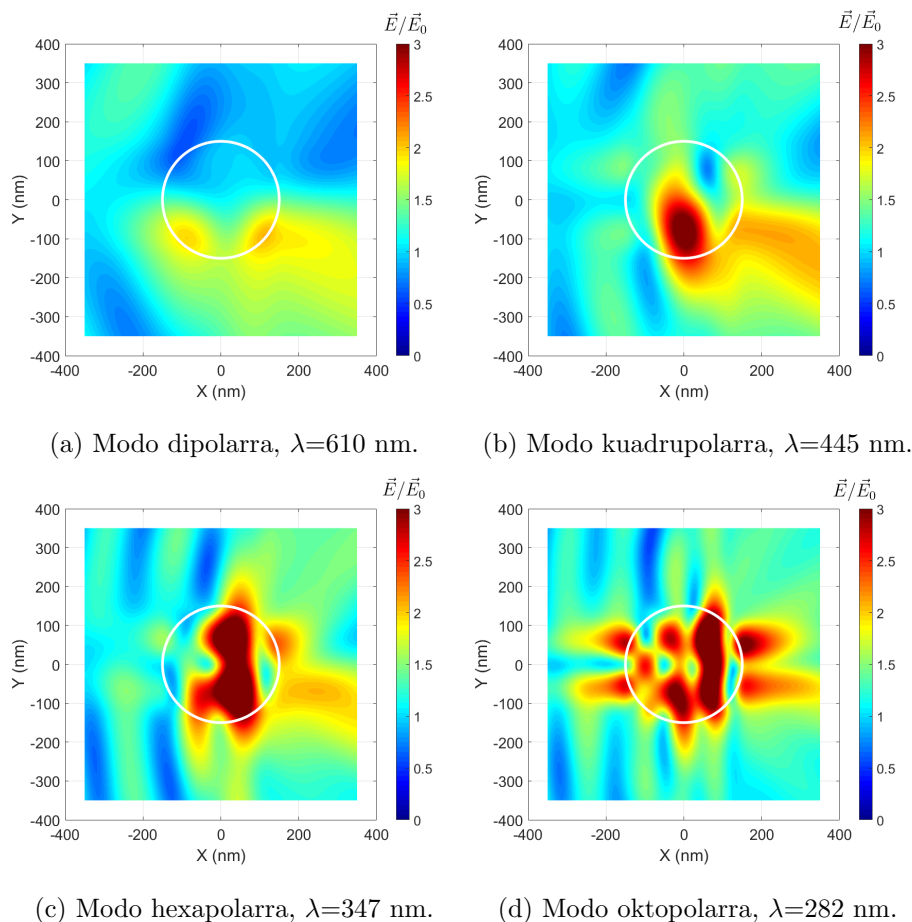
Lortutako sekzio eragilearen adierazpena Mie teoriarekin [9] lortzen den emaitzarekin konparatu da. Emaitza hauek 3.13 Irudian ikus daitezke. Bi grafikoak konparatuz lortutako emaitzak teoriarekin bateragarriak direla egiaztatu da.

Ikusten da 3.12 Irudian sakabanaketako sekzio eragile normalizatu maximoaren balioa 6 ingurukoa dela, 3.1 atalean zilarren kasurako lortutako balioaren antzekoa. Bestalde, maximoak uhin-luzerak 610 nm, 445 nm, 347 nm eta 282 nm direnean agertzen dira. Uhin-luzera hauetarako eremu elektrikoaren sakabanaketa aztertu da, 3.14 Irudian ikus daitekeen bezala.



3.14 Irudia: 150nm-ko erradiodun nanopartikula dielektrikoaren kasurako eremu elektrikoaren banaketa espaziala.

Nabari da kasu honetan eremua esferaren barruan garatzen dela, partikula metalikoetan ez bezala. Azpimarratzekoa da ere, partikula metalikoekin ez bezala, hemen multipolo magnetikoen ekarpena elektrikoarena bezain garrantzitsu edo garrantzitsuagoa dela. Eremu hau kontuan hartuz azterketa errepikatu da, eta lortutakoa 3.15 Irudian ikus daiteke. 3.14 Irudiarekin konparatuz ikus daiteke, material dielektrikoen kasuan eremu magnetikoaren ekarpena ez dela batere arbuigarria.

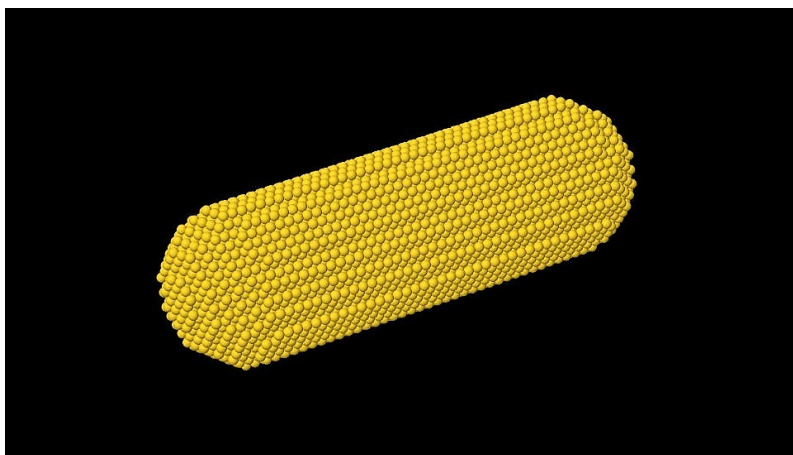


3.15 Irudia: 150nm-ko erradiodun nanopartikula dielektriko esferikoaren kasurako eremu magnetikoaren banaketa espaziala.

3.3 Argiaren sakabanaketa nanorod batean

Behin DDA metodoak nanopartikula esferikoetarako emaitza onak ematen dituela frogatuta, bestelako nanoegiturak simulatu dira. Izan ere, gaur egun, metodo kimikoak erabiliz neurri eta itxura ezberdineko partikulak hazten dira. Egitura konplexua denean ez dago Maxwell-en ekuazioen soluzio analitikorik, beraz metodo konputazionalak beharko dira.

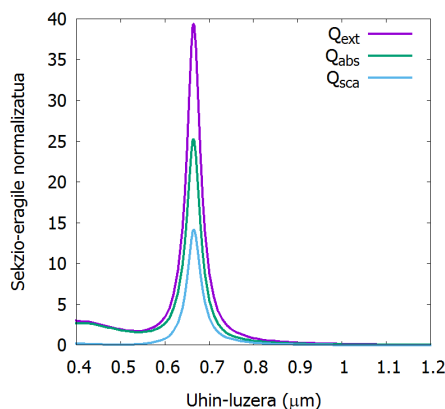
Atal honetan nanorod-ak aztertuko dira. Nanorodak bukaera esferikoa duten nanozilindroak dira, luzera zabalera baino 3-5 aldiz handiagoa izaten da normalean. Eremu elektromagnetiko baten menpe jartzerakoan, sakabanaketa-eremua, eta beraz sekzio-eragileak ezberdina dira nanorodaren orientazioaren arabera.



3.16 Irudia: Simulaziorako erabili den 100 nm-ko luzerako urrezko nanoroda.

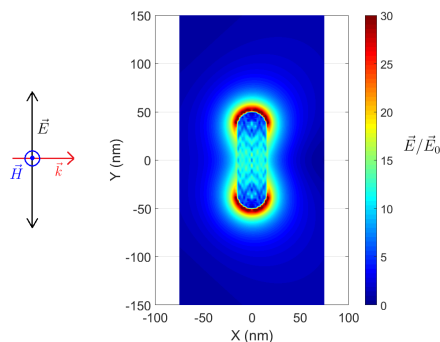
Nanopartikula hauek hainbat aplikazioa dituzte, esate baterako urrezko nanoroden erabilera proposatu da minbizia tratatzeko. Nanorodak uhin elektromagnetikoa xurgatzen dute espektroaren zati infragorrian, xurgatutako energia horrek bibrazio bat sortzen du eta energia bero moduan barreiatzen da. Uhin infragorriak gorputz ehunetan zehar pasa daitezkeenez, tumore baten ondoan dagoen nanopartikula bat kitzikatzea posible da eta honek inguruan dituen zelulak erre ditzake.

Nanorod bat simulatzeko 3.16 Irudian ikus daitekeen geometria eraiki da, 30 nm-ko diametroa eta 100 nm-ko luzera ezarriz. Urrearen funtzio dielektriko esperimentalak erabili da, 3.1 ataleko 3.2 Irudian ikus daitekeena. Dipoloen artean 1 nm-ko distantzia ezarri da, eta egitura osatzeko 64448 dipolo erabili dira. Simulazioak hutsen egin dira ($n=1$).



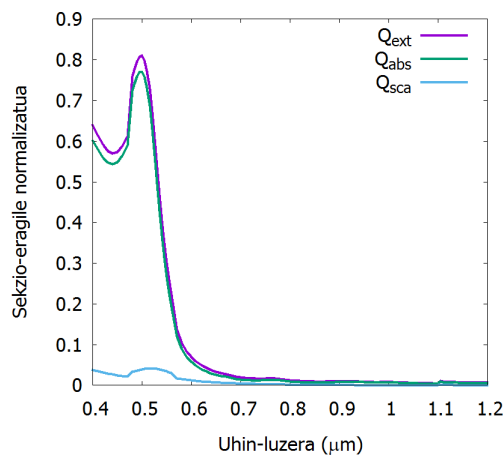
3.17 Irudia: Sekzio eragilea uhin-luzerarekiko, urrezko nanoroda ($l=100$ nm, $d=30$ nm) uhin-bektorearen perpendikularra denean.

Nanorodaren erantzuna aztertuko da, orientazio ezberdineko argiaren menpe jarritz. Lehenengo, urrezko nanoroda uhin-bektorearen perpendikularrean ezarri da. Kasu honetan, eremu elektriko ardatz luzearen paraleloa denez, luzetarako modoak agertzea espero daiteke. Lortu diren sekzio eragileak 3.17 Irudian ikusi daitezke.



3.18 Irudia: Eremu elektrikoaren banaketa, urrezko nanoroda ($l=100$ nm, $d=30$ nm) uhin-bektorearen perpendikularra eta $\lambda=665$ nm denean.

Sekzio eragilearen maximoa uhin-luzera 665 nm denean aurkitu da. Orduan, eremu elektrikoaren banaketa nolakoa den aztertu da uhin-luzera horretarako eta emaitza 3.18 Irudian ikus daiteke. Espero bezela luzetarako modoa aurkitu da, nanoroda eremu elektrikoaren paraleloa baita. Eremuaren patroia \hat{y} ardatzean (eremu elektrikoaren norabidean) zuzendutako dipoloari dagokio.

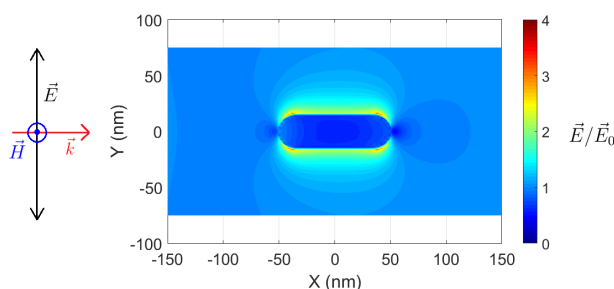


3.19 Irudia: Sekzio eragilea uhin luzerarekiko, urrezko nanoroda ($l=100$ nm, $d=30$ nm) uhin-bektorearekiko paraleloa denean.

Ondoren, nanoroda uhin-bektorearen paraleloa deneko kasua aztertu da. Oraingoan nanorodaren ardatz luzea eremu elektrikoaren perpendikularra da, beraz zeharkako modoak agertzea espero da. Hau ikusteko, sekzio eragilea kalkulatu da lehe-

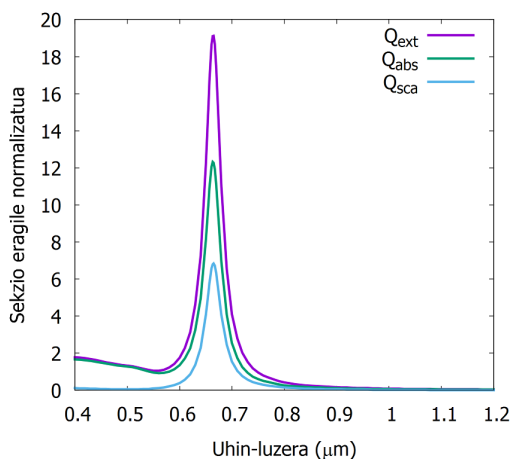
nengo eta simulazioaren emaitzak 3.19 Irudian ikus daitezke.

Kasu honetarako sekzio eragilea maximoa den uhin-luzera 500 nm da, luzetarako modoarena baino txikiaoa. Gainera, sekzio eragilearen balio altuena luzetarakoarena baino askoz baxuagoa da. Uhin-luzera honetarako eremu elektronikoaren banaketa kalkulatu da. Simulazio honen emaitzak 3.20 Irudian ikus daitezke. Bertan, nabaria da eremuaren intentsitatea luzetarakoan baino askoz txikiago dela.



3.20 Irudia: Eremu elektrikoaren banaketa, urrezko nanoroda ($l=100$ nm, $d=30$ nm) uhin-bektorearekiko paraleloa eta $\lambda=500$ nm denean.

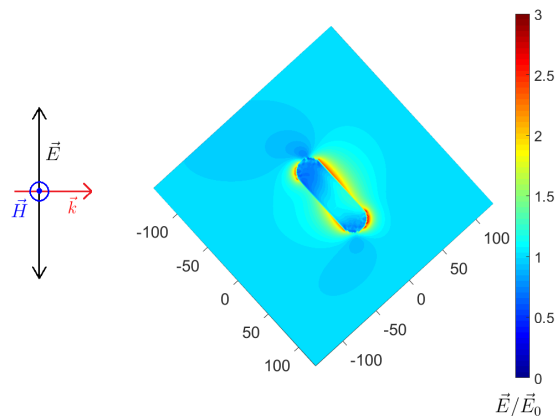
Amaitzeko, nanorodaren ardatz luzearen eta uhin-bektorearen artean $\theta=45^\circ$ -ko angelua ezarri da. Kasu honetan eremu elektrikoa bi osagaietan banatuko da, beraz, kitzikapena luzetara zein zeharka emango da. DDSCAT programa erabiliz simulatu eta sekzio eragileak kalkulatu dira. Emaitzak 3.21 Irudian ikus daitezke.



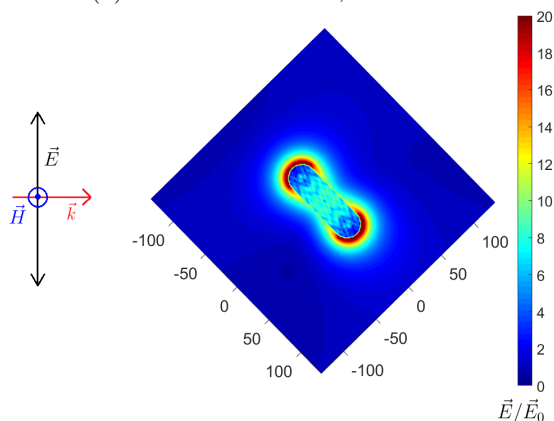
3.21 Irudia: Sekzio eragilea uhin luzerarekiko, urrezko nanorodaren ($l=100$ nm, $d=30$ nm) eta uhin-bektorearen arteko angelua $\theta=45^\circ$ denean.

Kasu honetan sekzio eragilean bi maximo agertu beharko lirateke, bata zeharkako modoari dagokiona eta bestea luzetarakoari. 3.21 Irudian ordea, maximo bakarra ikusten da, luzetarako modoari dagokiona. Hala ere, sekzio eragilearen balioa

uhin bektorearekiko perpendikularra denean baino txikiagoa da. Zeharkako modoa-ri dagokion maximoa ez da ikusten, izan ere luzetarako modoaren ekarpena askoz handiagoa da. Oraingoan, bi uhin-luzetarako irudikatu da eremu elektrikoaren banaketa, 500 nm eta 665 nm.



(a) Zeharkako modoa, $\lambda=500$ nm.

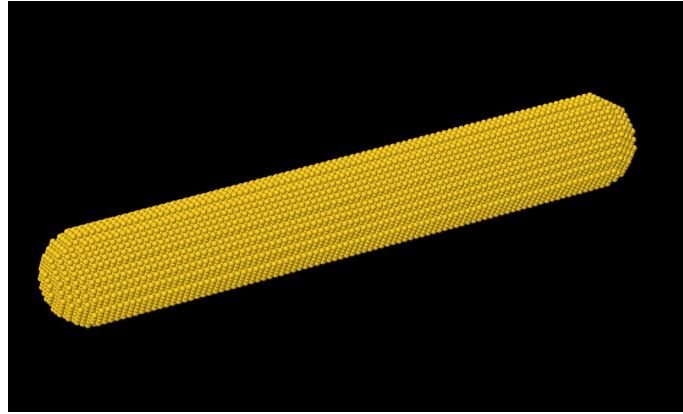


(b) Luzetarako modoa, $\lambda=665$ nm.

3.22 Irudia: Eremu elektrikoaren banaketa, urrezko nanorodaren ($l=100$ nm, $d=30$ nm) eta uhin-bektorearen arteko angelua $\theta=45^\circ$ denean.

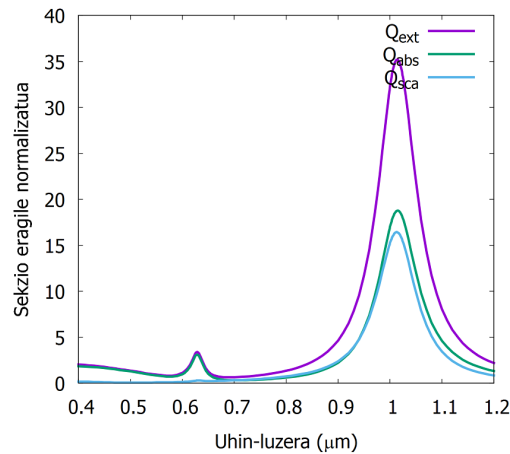
Emaitzak 3.22 Irudian ikus daitezke. Uhin-luzera 500 nm denean zeharkako modoarena da ekarpen nagusia, 665 nm denean ordea, ikus daiteke luzetarako modoa agertzen dela. Hala ere, zeharkako modoa ez da oso garbi ikusten. Eremuaren banaketa begiratzen bada modo kuadrupolarraren itxura du; bi modoaren hibridazioaren ondorioz sortutakoa.

Nanorodaren eta uhin-bektorearen arteko angelua $\theta=45^\circ$ denean, nanorod luzeago bat simulatu da. Oraingoan 200 nm-ko luzerako eta 30 nm-ko diametroko nanoroda eraiki da, 3.23 Irudian ikus daitekeena.



3.23 Irudia: Simulaziorako erabili den 200 nm-ko luzerako urrezko nanoroda.

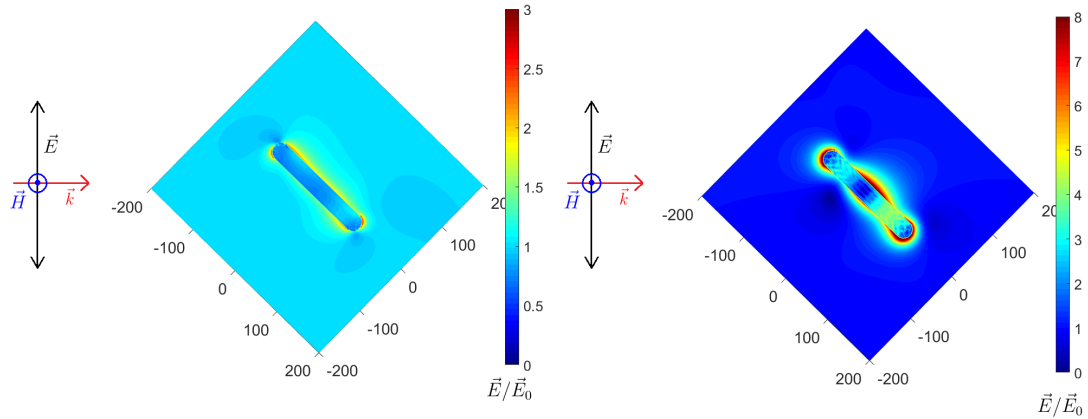
Kasu honetarako kalkulaturako sekzio eragileak 3.24 Irudian ikus daitezke. Bertan bi maximo daude, uhin-luzera $\lambda=628$ nm denean eta $\lambda=1014$ nm denean. Biak luzetarako modoak dira, zeharkako modoa uhin-luzera $\lambda=500$ nm denean ematen da.



3.24 Irudia: Sekzio eragileak uhin luzerarekiko, urrezko nanorodaren ($l=200$ nm, $d=30$ nm) eta uhin-bektorearen arteko angelua $\theta=45^\circ$ denean.

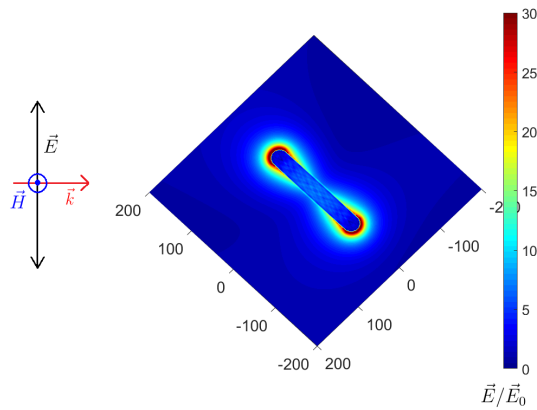
Eremua nola sakabanatzen duen ikusteko eremu elektrikoaren banaketa irudikatu da 3.25 Irudian. Uhin-luzera $\lambda=1014$ nm denean eremu-banaketa modo dipolarrari dagokiona da argi eta garbi. Bestalde, $\lambda=628$ nm-rako aurreko nanorod txikiagoan agertu ez zaigun beste luzetarako modo bat agertu da. Ikusten denez, modo dipolarrean bezala, intentsitatea maximoa da bi mutur erdiesferikoetan, nanorodaren erdian ordea ez dago nodo bat maximo bat baizik. Arrazoi honengaitik ordena handiagoko luzetarako modo bat dela ondorioztatu da, gainera, modo asimetrikoa da. Nanorod-etan modo geldikorrek kontsidera daitezke, soka batean bezala. Orohar

modo hauek $L = \frac{n\lambda_{eff}}{2}$ betetzean agertzen dira; non $n=1,2,3,\dots$ eta λ_{eff} plasmoiaren uhin-luzera eraginkorra diren. Uhin-luzera $\lambda=500$ nm denean zeharkako modoa azaltzen da, aurreko kasuan bezala luzetarako modo altuagoekin hibridatzen da.



(a) Zeharkako modoa, $\lambda=500$ nm.

(b) Luzetarako modoa $n=2$, $\lambda=628$ nm.



(c) Luzetarako modoa $n=1$, $\lambda=1014$ nm.

3.25 Irudia: Eremu elektrikoaren banaketa, urrezko nanorodaren ($l=200$ nm, $d=30$ nm) eta uhin-bektorearen arteko angelua $\theta=45^\circ$ denean.

Ikusi da nanorodren luzera handitu ahala, modo gehiago azaltzen direla. Gainera, hauen uhin-luzera gorrirantz lerratzen da. Plasmioen modoen konfinamendua gertatzen da, kuantikan elektroien konfinamendua gertatzen den bezala.

4. Kapituluia

Ondorioak

Lan honetan partikula ezberdinen argiaren sakabanaketa eta xurgapena aztertu da. Lehenik eta behin, argiaren sakabanaketaren atzean dagoen fisika azaldu da, baita honekin erlazionaturik dagoen plasmoiarena ere. Ondoren nanopartikula esferiko metaliko eta dielektrikoen propietateak aztertu dira. Simulazioak dipolo-dipolo hurbilketa (DDA) erabiliz egin dira eta Mie teoriarekin lortzen diren emaitzekin bateragarriak direla ikusi da partikula metaliko eta dielektrikoen kasuan.

Bi kasuetarako sekzio eragileak kalkulatu dira neurri ezberdinetarako esferentzat. Txikiaren kasuan maximo bakarra agertzen da, plasmoiaren modo dipolarrari dagokiona. Esfera handiagoa denean berriz, gailur gehiago agertzen dira, plasmioen modo multipolarrari dagozkionak hain zuzen ere. Propietate honek ahalbidetzen du erradioaren tamaina aldatuz erresonantzia zein uhin-luzeratarako emango den aukeratzea. Gainera, eremua partikulen inguruan, eraso-eremua baina handiagoa da, eremu elektrikoaren banaketa adierazten duten irudietan ikus daitekeen bezala. Bestalde, material bakoitzaren eremu elektromagnetikoaren banaketa angeluarra ere garrantzitsua da. Nanopartikula metalikoetan sakabanaketa alboetara desbideratzen da gehien bat. Dielektrikoetan berriz, sakabanaketa hori aurrerantz gertatzen da modo guztietarako.

Nanopartikula esferikoen sakabanaketa eta xurgapena erradioaren menpekoa dela egiaztatuta da, erradioa handitu ahala sakabanaketak garrantzia hartzen du, xurgapenarekin konparatuz. Erresonantzia uhin-luzera antzekoetan eman dadin, dielektrikoaren kasurako nanopartikularen erradioak zertxobait handiagoa izan behar duela ikusi da, zilarrarenarekin alderatuz. Hurbileko eremu-elektromagnetikoak ezberdinak izan dira bi kasuetarako; metalikoetan eremua partikularen kanpoaldean handitzen da eta esferaren barruan eremua ia nulua da, dielektrikoen kasuan ordea, partikularen barnealdean eman dira eremu indartsuenak.

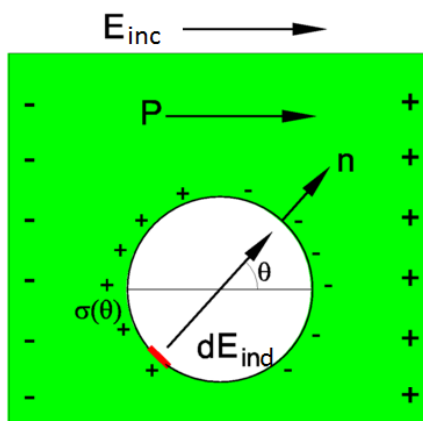
Azken atalean, urrezko nanohagak aztertu dira. Kasu honetan, eraso-argiaren polarizazioaren arabera, luzetarako eta zeharkako modoak kitzikatzen dira. Ikusi da eremua partikula esferikoetan baino askoz gehiago handitzen dela, batez ere nanorodaren ardatza eremuaren paraleloa denean, hau da, luzetarako modoa agertzen denean. Propietate hau dela eta nanoantena modura erabiltzen dira nanorodak. Gainera, luzetarako modoaren uhin-luzera gorrirantz desplazatzen da partikula luzatzen denean, eta ordena altuagoko luzetarako modoak azaltzen dira. Zeharkako modoa ahulagoa dela ikusi da, eta uhin-luzera baxuagoetan agertzen da. Propietate hau dela eta nanorod-ak uhin-elektromagnetikoen norabide detektore modura erabil daitezke.

A. Eranskina

Kalkuluak

A.1 Esfera baten eremu induzitua

Material dielektriko bat eremu elektriko baten menpe jartzen da, \vec{E}_{inc} . Eremu honek materiala polarizatu egingo du (\vec{P}), eta ondorioz materialaren gainazalean kargak pilatuko dira. Dielektriko honen barruan r erradioko esfera huts bat sartu da. Gainazala esferikoa denez, karga dentsitatea $\sigma(\theta) = -\hat{n} \cdot \vec{P} = -P \cos \theta$ izango da, non \hat{n} gainazalarekiko perpendikularra den bektore-unitarioa izango den θ puntuan, ikus A.1 Irudia.



A.1 Irudia: Berdez, material dielektrikoa kanpo-eremu baten menpe; zuriz, r erradioko kabitare esferikoa. \vec{E}_{inc} eremu elektriko ezartzen da \hat{z} ardatzean zehar.

Gainazalaren elementu infinitesimal bat hartuko da (A.1 irudian gorriz). Gaina-

zal honek esferaren barruan induzitu duen eremua ondorengoa da:

$$d\vec{E}_{ind} = \frac{\sigma(\pi + \theta)d\Omega}{4\pi\epsilon_0 r^2} \hat{n} = -\frac{P \cos(\pi + \theta)d\Omega}{4\pi\epsilon_0 r^2} \hat{n} = \frac{P \cos \theta \sin \theta d\theta d\psi}{4\pi\epsilon_0} \hat{n}. \quad (\text{A.1})$$

Barne-eremu induzitu honen z ardatzeko osagaia kalkulatu, jakin daiteke zein den bere ekarpena kanpo-eremuan,

$$dE_{ind,z} = \frac{P}{4\pi\epsilon_0} \cos^2 \theta \sin \theta d\theta d\psi \quad (\text{A.2})$$

$$E_{ind,z} = \int \int dE_{ind,z} = \frac{P}{4\pi\epsilon_0} \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\psi = \frac{P}{3\epsilon_0} \quad (\text{A.3})$$

Ondorioz, eremu elektriko totala $\vec{E}_{tot} = \vec{E}_{inc} + \vec{E}_{ind} = \vec{E}_{inc} + \frac{P}{3\epsilon_0}$ izango da.

A.2 Iturri lokalizatuaren erradiazio elektromagnetikoa

Kalkulu hauek, [10]-liburuan oinarritu dira. Suposatuko da potentziala, eremua eta erradiazioa sinusoidalki aldatzen direla denboran zehar, ondorengo karga eta korronte dentsitateen ondorioz,

$$\rho(\vec{r}', t) = \rho(\vec{r}') e^{-i\omega t} \quad (\text{A.4})$$

$$\vec{J}(\vec{r}', t) = \vec{J}(\vec{r}') e^{-i\omega t} \quad (\text{A.5})$$

non, \vec{J} eta ρ -k $\vec{\nabla} \cdot \vec{J} = i\omega\rho$ jarraitasun ekuazioa bete behar duten. Potentzial elektrikoa, ondorengoa da:

$$\begin{aligned} V(\vec{r}) e^{-i\omega t} &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}') e^{-i\omega(t - |\vec{r} - \vec{r}'|/c)}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' \\ &= \frac{e^{-i\omega t}}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}') e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

edo

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}') e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r'. \quad (\text{A.7})$$

Modu berean, potentzial-bektorea aurki daiteke,

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\vec{J}(\vec{r}') e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r'. \quad (\text{A.8})$$

Orokorrean A.7 eta A.8 ez direnez integragarriak, hurbilketak behar dira. Horretarako, problema hiru zonaldetan banatuko da:

- Eremu hurbila edo indukzio eremuan, $k|\vec{r} - \vec{r}'| \ll 1$ (or $R \ll \lambda$) = $e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|} \approx 1$ hurbilketa egin daiteke. Ondorioz, \vec{A} -ren soluzio estatikoa kontsideratuz,

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\vec{J}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' \quad (\text{A.9})$$

eta ondorengo hurbilketa eginez,

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \sum_{\ell, m} \frac{4\pi}{2\ell + 1} \frac{r_{<}^\ell}{r_{>}^{\ell+1}} Y_\ell^{*m}(\theta', \varphi') Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad (\text{A.10})$$

potentzial bektorearen ondorengo adierazpena lortzen da koordenatu esferikoe-tan:

$$\vec{A}(\vec{r}) = \mu_0 \sum_{\ell, m} \frac{1}{2\ell + 1} \frac{Y_\ell^m(\theta, \varphi)}{r^{\ell+1}} \int \vec{J}(\vec{r}') r'^\ell Y_\ell^{*m}(\theta', \varphi') d^3 r'. \quad (\text{A.11})$$

- Eremu urrunean aldiz, $|\vec{r} - \vec{r}'| \approx r - (\vec{r} \cdot \vec{r}')/r + \dots$ beteko da, beraz $1/|\vec{r} - \vec{r}'|$ beharrean $1/r$ jarritz,

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int \vec{J}(\vec{r}') e^{-ik(\vec{r} \cdot \vec{r}')/r} d^3 r' \quad (\text{A.12})$$

lortzen da. Gainera, iturriaren tamiana r' txikia bada uhin-luzerarekin konparatuz gero λ , $kr' \ll 1$ izango da eta ondorengo beteko da,

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \sum_{\ell} \frac{(-ik)^\ell}{\ell!} \int \vec{J}(\vec{r}') \left(\frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r} \right)^\ell d^3 r'. \quad (\text{A.13})$$

- Eremu ertainean $e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}/|\vec{r}-\vec{r}'|$ ezingo da hurbildu, bere serie garapena erabili beharko da:

$$\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} = 4\pi ik \sum_{\ell, m} h_\ell^{(1)}(kr_{>}) j_\ell(kr_{<}) Y_\ell^m(\theta, \varphi) Y_\ell^{*m}(\theta', \varphi'), \quad (\text{A.14})$$

non, $h_l = j_l + in_l$ Hankel-en funtzio esferikoa den. Seriea erabiliz, potentzial bektorea

$$\vec{A}(\vec{r}) = i\mu_0 k \sum_{\ell, m} h_\ell^{(1)}(kr) Y_\ell^m(\theta, \varphi) \int \vec{J}(\vec{r}') j_\ell(kr') Y_\ell^{*m}(\theta', \varphi') d^3 r' \quad (\text{A.15})$$

izango da. Iturria uhin-luzera baina txikiagoa dela onartzen bada, $j_n(kr') = (kr')^2/(2n+1)!!$ izango da, beraz,

$$\vec{A}(\vec{r}) = i\mu_0 k \sum_{\ell, m} h_\ell^{(1)}(kr) Y_\ell^m(\theta, \varphi) \int \frac{(kr')^\ell}{(2\ell+1)!!} \vec{J}(\vec{r}') Y_\ell^{*m}(\theta', \varphi') d^3 r'. \quad (\text{A.16})$$

Dipolo elektriko batek sortzen duen erradiazioa kalkulatzeko, hiru eremuak kontsideratu behar ditugu. Eremu ertaineko potentzial-bektorearen (A.16) lehen terminoa bakarrik kontsideratuz ($l=0$):

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int \vec{J}(\vec{r}') d^3 r', \quad (\text{A.17})$$

eremu urrunerako ere baliagarria dela ikus daiteke A.13 ekuazioarekin konparatuz gero. Adierazpen hau karga banaketaren osagai dipolarretik datorrela ikusteko, honen menpe jarri nahi da. Horretarako korrante-dentsitatea karga-dentsitatearen menpe jarri beharko da. Kontsidera bedi

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}' \cdot [x' \vec{J}(\vec{r}')] &= \vec{\nabla}' x' \cdot \vec{J}(\vec{r}') + x' [\vec{\nabla}' \cdot \vec{J}(\vec{r}')] \\ &= \hat{i} \cdot \vec{J} + x' (\vec{\nabla}' \cdot \vec{J}) \\ &= J_x + x' (\vec{\nabla}' \cdot \vec{J}), \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

ondorioz $J_x = \vec{\nabla}' \cdot (x' \vec{J}) - x' (\vec{\nabla}' \cdot \vec{J})$. Integratuz,

$$\begin{aligned} \int J_x(\vec{r}') d^3 r' &= \int \vec{\nabla}' \cdot (x' \vec{J}) d^3 r' - \int x' (\vec{\nabla}' \cdot \vec{J}) d^3 r' \\ &= \oint x' \vec{J}(\vec{r}') \cdot d\vec{S} + \int x' \frac{\partial \rho}{\partial t} d^3 r' \\ &= -iw \int x' \rho(\vec{r}') d^3 r' \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

lortzen da. Emaitza hau \vec{J} -ren osagai guztietara orokortuz

$$\int \vec{J} d^3 r' = -iw \int \vec{r}' \rho(\vec{r}') d^3 r' = -iw \vec{p} \quad (\text{A.20})$$

erlazioa ondorioztatzen da,

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{-iw\mu_0}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \vec{p}_0 \quad (\text{A.21})$$

emaitzara iritsiz, non $\vec{p} = \vec{p}_0 e^{-i\omega t}$ momentu dipolar elektrikoa den.

Potentzial bektorearen bidez, induzitutako eremu magnetikoa lortzen da,

$$\begin{aligned}
\vec{B}(\vec{r}) &= \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}) = \frac{-i\omega\mu_0}{4\pi} \vec{\nabla} \left(\frac{e^{ikr}}{r} \right) \times \vec{p}_0 \\
&= \frac{-i\omega p_0}{4\pi} \left(\frac{ik}{r} - \frac{1}{r^2} \right) e^{ikr} \hat{r} \times \vec{p}_0 \\
&= \frac{\omega k p_0}{4\pi} \left(1 - \frac{1}{ikr} \right) \frac{e^{ikr}}{r} \hat{r} \times \vec{p}_0
\end{aligned} \tag{A.22}$$

Behin eremu magnetikoa lortuta eremu elektrikoa ondoriozta daiteke,

$$\begin{aligned}
\vec{E}(\vec{r}) &= \frac{ic^2}{\omega} \vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{ie}{k} \vec{\nabla} \times \vec{B} \\
&= \frac{ic\omega\mu_0}{4\pi} \left[\vec{\nabla} \left(\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{ikr}}{ikr^2} \right) \times (\hat{r} \times \vec{p}_0) + \left(\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{ikr}}{ikr^2} \right) \vec{\nabla} \times (\vec{r} \times \vec{p}_0) \right] \\
&= \frac{ic\omega\mu_0}{4\pi} \left[ik \frac{e^{ikr}}{r} \dot{r} \times (\hat{r} \times \vec{p}_0) - \frac{e^{ikr}}{r^2} \dot{r} \times (\dot{r} \times \vec{p}_0) - \frac{e^{ikr}}{r^2} \dot{r} \times (\hat{r} \times \vec{p}_0) \right. \\
&\quad \left. + \frac{2e^{ikr}}{ikr^3} \dot{r} \times (\hat{r} \times \vec{p}_0) + \frac{e^{ikr}}{ikr^2} (ikr - 1) \vec{\nabla} \times (\vec{r} \times \vec{p}_0) \right]
\end{aligned} \tag{A.23}$$

Eremu elektrikoa sinplifikatzeko bertan dauden adierazpenak garatu egingo dira;

$$\hat{r} \times (\hat{r} \times \vec{p}_0) = (\hat{r} \cdot \vec{p}_0) \hat{r} - \vec{p}_0 \tag{A.24}$$

eta

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla} \times (\vec{r} \times \vec{p}_0) &= \hat{r} (\vec{\nabla} \cdot \vec{p}_0) - \vec{p}_0 (\vec{\nabla} \cdot \hat{r}) + (\vec{p}_0 \cdot \vec{\nabla}) \hat{r} - (\hat{r} \cdot \vec{\nabla}) \vec{p}_0 \\
&= -\vec{p}_0 (\vec{\nabla} \cdot \hat{r}) + (\vec{p}_0 \cdot \vec{\nabla}) \hat{r} \\
&= -\frac{2\vec{p}_0}{r} + \frac{\vec{p}_0}{r} - \frac{(\vec{p}_0 \cdot \vec{r}) \vec{r}}{r^3} \\
&= -\frac{\vec{p}_0}{r} - \frac{(\vec{p}_0 \cdot \hat{r}) \hat{r}}{r}
\end{aligned} \tag{A.25}$$

Adierazpenak A.23-n sartuz, eremu elektrikoaren adierazpen orokorra lortuko

da:

$$\begin{aligned}
\vec{E}(\vec{r}) &= \frac{ck\omega\mu_0}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} (\vec{p}_0 \times \hat{r}) \times \hat{r} \\
&\quad - \frac{ic\omega\mu_0}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r^3} \frac{1}{ik} \left\{ (2ikr - 2)[(\hat{r} \cdot \vec{p}_0)\hat{r} - \vec{p}_0] + (ikr - 1)[\vec{p}_0 + (\hat{r} \cdot \vec{p}_0)\hat{r}] \right\} \\
&= \frac{ck\omega\mu_0}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \hat{r} \times (\vec{p}_0 \times \hat{r}) + \frac{c^2\mu_0}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r^3} (1 - ikr)[3(\hat{r} \cdot \vec{p}_0)\hat{r} - \vec{p}_0] \\
&= \frac{ck\omega\mu_0}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \hat{r} \times (\vec{p}_0 \times \hat{r}) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{(1 - ikr)e^{ikr}}{r^3} [3(\hat{r} \cdot \vec{p}_0)\hat{r} - \vec{p}_0] \\
&= \frac{k^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{ikr}\vec{p}_0}{r} [\hat{r} \cdot \hat{r} - 1] + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{(1 - ikr)e^{ikr}\vec{p}_0}{r^3} [3\hat{r} \cdot \hat{r} - 1] \\
&= \frac{e^{ikr}\vec{p}_0}{4\pi\epsilon_0 r} \left[k^2(\hat{r} \cdot \hat{r} - 1) + \frac{(1 - ikr)}{r^2} (3\hat{r} \cdot \hat{r} - 1) \right].
\end{aligned} \tag{A.26}$$

Bibliografia

- [1] V. GIANNINI, A. I. FERNÁNDEZ-DOMINGUEZ, S.C. HECK, S.A. MAIER, *Plasmonic nanoantennas: fundamentals and their use in controlling the radiative properties of nanoemitters*, Chemical Reviews, vol. 11, 3888-3912, 2011.
- [2] M.I. MISHCHENKO, *The electromagnetic optical theorem revisited*, Journal of quantitative spectroscopy & radiative transfer, vol. 101, 404-410, 2006.
- [3] C.F. BOHREN, D.R. HUFFMAN, *Absorption and scattering of light by small particles*, John Wiley & son Inc., 1983.
- [4] A.D. RAKIĆ, A.B. DJURISIĆ, J.M. ELAZAR, M.L. MAJEWSKI, *Optical properties of metallic films for vertical-cavity optoelectronic devices*, Applied Optics, vol. 37, no. 22, 5271-5283, 1998.
- [5] B.T. DRAINE, *The discrete-dipole approximation and its application to interstellar graphite grains*, The Astrophysical Journal, vol. 333, 848-872, 1988.
- [6] B.T. DRAINE, P.J. FLATAU, *Discrete dipole approximation for scattering calculations*, Journal of the Optical Society of America, vol. 11, no. 4, 1491-1499, 1993.
- [7] L. BERGAMINI, *Plasmonic properties of metal-manoparticles interacting with molecules.*, PhD thesis, Università di Modena e Reggio Emilia, Italia, 2014.
- [8] P.B. JOHNSON, R.W. CHRISTY, *Optical constants of the noble metal*, Physical Review B, vol. 6, no. 12, 4370-4379, 1972.
- [9] I. URIA, *Nanoantena plasmonikoak.*, Gradu Amaierako Lana, Euskal Herriko Unibertsitatea, Leioa, 2015.
- [10] J. VANDERLINDE, *Classical Electromagnetic Theory*, 2nd ed., Kluwer Academic Publishers, 2004.