



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

Μελέτη των Φαινομένων Ενίσχυσης της Οπτικής Παγίδευσης λόγω Ανάπτυξης Πλασμονικού Πεδίου

Δαλάκα Ελένη - Διπλωματική Εργασία

Επιβλέπων Καθηγητής: Αλέξανδρος Α. Σεραφεινίδης - Καθηγητής
ΕΜΠ

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

Σε αυτή την διπλωματική εργασία, έγινε κυρίως θεωρητική μελέτη του φαινομένου της οπτικής παγίδευσης σε συνδυασμό με τη διέγερση πλασμονικού πεδίου. Κατά την οπτική παγίδευση, μια φωτεινή δέσμη, συνήθως ακτινοβολίας laser, έχει τη δυνατότητα να ακινητοποιήσει σωματίδια της τάξης των μικρομέτρων (μm), ασκώντας δύναμη σε αυτά (πίεση ακτινοβολίας). Με αυτό τον τρόπο, μας δίνεται η δυνατότητα παγίδευσης και μικροχειρισμού μικρών σωματιδίων, με σκοπό τη μελέτη των μηχανικών κυρίως ιδιοτήτων τους. Ωστόσο, η συμβατική οπτική παγίδευση αδυνατεί να ακινητοποιήσει σωματίδια είτε μεγαλύτερα είτε πολύ μικρότερα από δέκατα του μικρομέτρου. Η ανάγκη μας να διαχειριστούμε μικρότερα σωματίδια, της τάξης πλέον των νανομέτρων (nm), μας οδήγησε στο να εκμεταλευτούμε την ενίσχυση του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου που προσφέρει η διέγερση πλασμονικού πεδίου στην επιφάνεια μεταλλικών νανοδομών.

Είναι γνωστό ότι μια ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία έχει τη δυνατότητα να δημιουργήσει πλασμόνια στην επιφάνεια μετάλλων, κατά την πρόσπτωσή της σε αυτά, ενισχύοντας τοπικά το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Έτσι, όταν εισάγουμε μια μεταλλική νανοδομή κάτω από το δείγμα που μελετάται, η ενίσχυση του πεδίου μπορεί να αυξήσει την οπτική δύναμη που αυτό επάγει πάνω στα παγιδευμένα σωματίδια, δίνοντας τη δυνατότητα ισχυρότερης ακινητοποίησης αλλά και παγίδευσης μικρότερων σωματιδίων.

Η μελέτη που έγινε στην παρούσα διπλωματική εργασία αφορά την επίδραση της γεωμετρίας της μεταλλικής νανοδομής καθώς και του μεγέθους της στην ισχύ της οπτικής παγίδευσης. Έγινε θεωρητική μελέτη χρησιμοποιώντας το λογισμικό προσομοίωσης COMSOL Multiphysics, όπου μοντελοποιήθηκε το πρόβλημα της οπτικής παγίδευσης, σύμφωνα με τα δεδομένα του εργαστηρίου μας.

Η διπλωματική εργασία εκπονήθηκε στον Τομέα Φυσικής, της Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου, με επιβλέποντα καθηγητή τον Καθηγητή του Τομέα Φυσικής του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου, κ. Αλέξανδρο Σεραφετινίδη. Η θεωρητική μελέτη έγινε μέσω δισδιάστατων (2D) και τρισδιάστατων (3D) προσομοιώσεων, χρησιμοποιώντας το λογισμικό COMSOL Multiphysics. Αυτές οι προσομοιώσεις έγιναν στον Τομέα

Υπολογιστών της Σχολής Χημικών Μηχανικών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου, όπου και υπάρχει το συγκεκριμένο λογισμικό προσομοιώσεων, με την άδεια του καθηγητή Ανδρέα Μπουντουβή, υπεύθυνου του Υπολογιστικού Κέντρου διευθυντή του Εργαστηρίου Προσωπικών Υπολογιστών. Τα πειράματα οπτικής παγίδευσης διεξήχθησαν στο εργαστήριο 'Ανάπτυξης Laser και Εφαρμογές', στον Τομέα Φυσικής του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

Περίληψη

Η οπτική παγίδευση αποτελεί ένα σημαντικό εργαλείο με πολλές εφαρμογές σε τομείς όπως η ιατρική, η βιολογία, η μικροηλεκτρονική, ακόμα και η βιομηχανία. Το φαινόμενο της οπτικής παγίδευσης βασίζεται σε φαινόμενα πίεσης ακτινοβολίας και αποτελεί την ακινητοποίηση ενός σωματιδίου της τάξης των μικρομέτρων (μm), όταν αυτό βρεθεί υπό την επίδραση μιας φωτεινής δέσμης. Ο περιορισμός ωστόσο της παγίδευσης μικρών σωματιδίων έδωσε αφορμή για την εισαγωγή του φαινομένου της διέγερσης πλασμονίων στο πρόβλημα της οπτικής παγίδευσης. Τα πλασμόνια αποτελούν το κβαντικό σωματίδιο της ταλάντωσης του πλάσματος και είναι γνωστό ότι η διέγερσή τους ενισχύει τοπικά το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο, με αποτέλεσμα τη δυνατότητα παγίδευσης σωματιδίων με μέγεθος κάτω από το όριο Rayleigh.

Σε αυτή τη διπλωματική εργασία έγινε προσπάθεια, μέσω υπολογιστικών προσομοιώσεων, να προσδιοριστεί εκείνη η μεταλλική νανοδομή που είναι ικανή να ενισχύει μέγιστα το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Ο προσδιορισμός του ποσοστού ενίσχυσης του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου, έγινε μέσω του υπολογισμού της συνολικής οπτικής δύναμης σε όλη την επιφάνεια του σωματιδίου, σε διάφορες μεταλλικές νανοδομές. Αρχικά, έγινε μια σύντομη αναφορά στην οπτική παγίδευση και στα πλασμόνια σε δύο ξεχωριστά κεφάλαια, (Κεφάλαιο 2 και Κεφάλαιο 3 αντίστοιχα) θέτοντας τις βάσεις για την κατανόηση των φαινομένων και των εννοιών που θα ακολουθήσουν στα επόμενα κεφάλαια. Στο Κεφάλαιο 4 αναλύονται τα αποτελέσματα των τρισδιάστατων προσομοιώσεων, ενώ γίνεται αναφορά και στις δισδιάστατες προσομοιώσεις. Επιπλέον, στο Κεφάλαιο 5 αναφέρονται κάποια αποτελέσματα που προέκυψαν χρησιμοποιώντας τη μέθοδο προσομοίωσης FDTD, και στη συνέχεια γίνεται λόγος για τις πειραματικές μετρήσεις από το πείραμα της απλής οπτικής παγίδευσης (Κεφάλαιο 6) το οποίο πραγματοποιήθηκε στο εργαστήριο 'Ανάπτυξης Laser και Εφαρμογές' του τομέα Φυσικής, της σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών. Κλείνοντας, αναφέρονται ιδέες για μελλοντική έρευνα, τόσο θεωρητική όσο και πειραματική, ενώ γίνεται λόγος για βελτιώσεις των προσομοιώσεων.

Abstract

Optical tweezers are important tools which find many applications in fields such as medicine, biology, microelectronics and even industry. The phenomenon of optical trapping is based on phenomena of pressure of radiation and it constitutes of the immobilization of a particle, with size in the order of micrometers (μm), when this particle is situated under the influence of a laser beam. However, the size limitation of the trapped particle in the optical trapping gave rise to the need of (made us introduce) introducing the phenomenon of plasmonics in the optical tweezers problem. Plasmonics are the quanta of plasma oscillations and it is well known that their excitation can strengthen the electromagnetic field locally, giving the possibility of trapping smaller particles, under the Rayleigh limitation.

In this thesis, we tried to determine, using computational simulations, which metallic nanostructure is able to increase the local electric field at a maximum. The computation of the increase in the electric field, has been made through the calculation of the total optical force on the surface of the particle, for different metallic nanostructures. Firstly, we made a short reference to the phenomena of optical tweezers and plasmonics in two different chapters (Chapter 2 and Chapter 3 respectively), explaining the phenomena and the meanings that are used, in the following chapters of this thesis. In the chapter 4 the results of the three-dimensional simulations are analyzed, while there is a reference to the two-dimensional simulations as well. In addition, in chapter 5, we refer to the results obtained, using the computational method of simulation FDTD, and the experimental measurements from the conventional optical trapping experiment, follow (Chapter 6). These experiments have been conducted in the laboratory of "Laser Development and Applications" in the Physics Department, in the School of Mathematical and Physical Sciences. In the conclusion of this thesis, there are some suggestions for future research, in theoretical and experimental basis, as well as some improvements of the computational models.

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή	2
2	Το φαινόμενο της Οπτικής Παγίδευσης	4
2.1	Ορισμός της Οπτικής Παγίδευσης	4
2.2	Ιστορία της Οπτικής Παγίδευσης	4
2.3	Φυσικές Αρχές της Οπτικής Παγίδευσης	5
2.4	Ο Ρόλος του Μεγέθους του Σωματίδιου στην Οπτική Παγίδευση	9
2.5	Εφαρμογές της Οπτικής Παγίδευσης	12
3	Διέγερση Πλασμονικού Πεδίου σε Μεταλλικές Επιφάνειες	16
3.1	Οπτικές Ιδιότητες Μετάλλων	16
3.2	Φυσικές Αρχές των Πλασμονίων	18
3.2.1	Επιφανειακά Πλασμόνια - Πολαριτόνια (surface plasmons-polaritons, SPPs)	20
3.2.2	Εντοπισμένα επιφανειακά πλασμόνια (localized surface plasmons, LSPs) . .	22
4	Μελέτη του φαινομένου της οπτικής παγίδευσης σε συνδυασμό με την ανάπτυξη πλασμονικού πεδίου	26
4.1	Οπτική δύναμη και ο Τανυστής τάσεων του Maxwell (Maxwell's stress tensor)	26
4.2	Δισδιάστατη Μοντελοποίηση Οπτικής Παγίδευσης και Πλασμονικού Πεδίου	29
4.3	Τρισδιάστατη Μοντελοποίηση του προβλήματος και Παράμετροι Προσομοίωσης .	32
4.4	Επιβεβαίωση Προηγούμενων Πειραματικών Μετρήσεων	34
4.5	Επιβεβαίωση υπολογιστικών μελετών άλλων ερευνητικών ομάδων	39
4.6	Αποτελέσματα Τρισδιάστατων Προσομοιώσεων και Παρατηρήσεις	42
4.6.1	Προσομοίωση υποστρώματος χωρίς μεταλλική νανοδομή	42
4.6.2	Προσομοίωση νανοδομής αποτελούμενης από μεταλλικές σφαίρες	44
4.6.3	Προσομοίωση νανοδομής αποτελούμενης από μεταλλικούς σφαιρικούς φλοιούς	52
4.6.4	Προσομοίωση νανοδομής αποτελούμενης από μεταλλικούς κώνους	58
4.6.5	Προσομοίωση νανοδομής αποτελούμενης από μεταλλικούς πυλώνες	71
4.6.6	Προσομοίωση νανοδομής αποτελούμενης από μεταλλικά σύρματα ορθογώνιας διατομής	80
4.7	Συμπεράσματα τρισδιάστατων προσομοιώσεων	83
5	Τρισδιάστατες Προσομοιώσεις με χρήση της μεθόδου Πεπερασμένων Διαφορών στο Πεδίο του Χρόνου (finite-difference time-domain, FDTD)	85
5.1	Προσομοίωση φαινομένου οπτικής παγίδευσης, με τη χρήση της μεθόδου FDTD . .	86
5.2	Προσομοίωση φαινομένου πλασμονίων επιφάνειας, με τη χρήση της μεθόδου FDTD	90
6	Πειραματικές Μετρήσεις Συμβατικής Οπτικής Παγίδευσης	93

Επιλογος	101
Ευχαριστιες	103
Βιβλιογραφια	103

Κεφάλαιο 2

Το φαινόμενο της Οπτικής Παγίδευσης

2.1 Ορισμός της Οπτικής Παγίδευσης

Ως οπτική παγίδευση ορίζεται η ακινητοποίηση ενός σωματιδίου μέσω ακτινοβολίας, και συννηθέστερα μιας δέσμης laser. Το μέγεθος του σωματιδίου που παγιδεύεται εξαρτάται από τα χαρακτηριστικά της δέσμης καθώς και από τις οπτικές ιδιότητες του υλικού του σωματιδίου. Μετά την επίτευξη της παγίδευσης, υπάρχει η δυνατότητα μικροχειρισμού του παγιδευμένου σωματιδίου, μετακινώντας τη δέσμη laser με τη βοήθεια των κατάλληλων οπτικών. Γι' αυτό το λόγο, για το φαινόμενο της οπτικής παγίδευσης χρησιμοποιείται ο όρος 'οπτική λαβίδα' (optical tweezers), ανοίγοντας το δρόμο για την ανάπτυξη πολλών εφαρμογών μικροχειρισμού σωματιδίων ιδιαίτερα στους τομείς της ιατρικής, της βιολογίας και της μικροηλεκτρονικής.

2.2 Ιστορία της Οπτικής Παγίδευσης

Το φαινόμενο της οπτικής παγίδευσης φαίνεται να ήταν γνωστό από τον 15^ο αιώνα και για αρκετές εκατοντάδες χρόνια αποτελούσε ένα φυσικό φαινόμενο χωρίς εφαρμογές. Τα τελευταία χρόνια έχει γνωρίσει εφαρμογές σε πολλούς τομείς της επιστήμης.

Η πρώτη καταγεγραμμένη παρατήρηση ότι το φως έχει τη δυνατότητα να ασκεί μηχανικές δυνάμεις στην επιφάνεια σωματιδίων έγινε από τον Johannes Kepler, καθώς παρατηρούσε και μελετούσε τους κομήτες. Ήταν εκείνος που το 1619 εισήγαγε την έννοια της πίεσης ακτινοβολίας, στην προσπάθειά του να εξηγήσει το γεγονός ότι οι ουρές των κομητών είχαν διεύθυνση αντίθετη εκείνη του ήλιου^[1,2]. Συνεχιστής αυτής της θεωρίας σχετικά με την πίεση ακτινοβολίας και ένα από τους πρωτοπόρους της εξήγησης του ζεύγους δυνάμεων ήταν ο John Michell, ο οποίος προσπάθησε να μετρήσει ποσοτικά την πίεση ακτινοβολίας, γύρω στο 18ο αιώνα. Η έννοια της πίεσης ακτινοβολίας εισηγήθηκε θεωρητικά και εξηγήθηκε με μαθηματικό τρόπο από τον James Clerk Maxwell. Η ηλεκτρομαγνητική θεωρία του Maxwell μπόρεσε να προβλέψει την δημιουργία μηχανικών δυνάμεων στην επιφάνεια σωματιδίων, εξαιτίας

της μεταβολής της ορμής των φωτονίων της προσπίπτουσας, στο σωματίδιο, ακτινοβολίας.

Παρόλο που υπήρχε η θεωρία πάνω στην πίεση ακτινοβολίας, η πρώτη πειραματική επιβεβαίωση δόθηκε από τους Ledebew και Nichols & Hull στις αρχές του 20ου αιώνα. Ακόμα και μετά την πειραματική επιβεβαίωση, το φαινόμενο της πίεσης της ακτινοβολίας δεν μπορούσε να βρει πρακτικές, τεχνολογικές εφαρμογές. Αυτό συνέβαινε, κατά κύριο λόγο, εξαιτίας του γεγονότος ότι η δύναμεις που αναπτύσσονται λόγω της πίεσης της ακτινοβολίας είναι πολύ ασθενείς (της τάξης των pN).^[1]

Η πρώτη εφαρμογή της οπτικής παγίδευσης ήρθε το 1969 από τον Arthur Ashkin, ο οποίος παγίδευσε μικρά σωματίδια με τη χρήση μίας απλής δέσμης laser, καθώς και με δύο αντιδιαμετρικές δέσμες^[3]. Η προσπάθεια παγίδευσης και μικροχειρισμού σωματιδίων συνεχίστηκε, με αποτέλεσμα να παγιδευτούν κύτταρα από τον ίδιο (Ashkin 1997)^[4]. Η αρχική ιδέα του Ashkin ήταν ότι παρόλο που οι δυνάμεις που προκύπτουν από την πίεση της ακτινοβολίας ήταν μικρές, η μετατόπιση και ο χειρισμός μικρών σωματιδίων απαιτούσαν κι αυτά μικρές δυνάμεις. Οι αρχικές παγίδες δεν ήταν ολοκληρωτικά οπτικές, αφού ήταν αποτέλεσμα της ισορροπίας μεταξύ της βαρύτητας και της δύναμης της οπτικής αιώρησης, ενώ οι δύναμη βαθμίδας παρατηρήθηκε και στα αρχικά πειράματα.

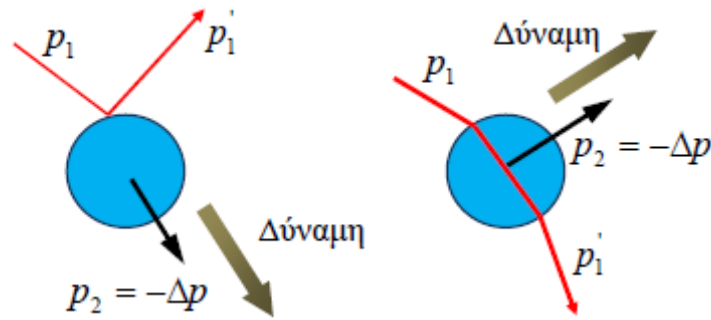
Εκτός από την παγίδευση και τον μικροχειρισμό σωματιδίων, μέσω του φαινομένου της οπτικής παγίδευσης δίνεται η δυνατότητα περιστροφής του σωματιδίου, κάτι το οποίο επιτεύχθηκε από τους Sato *et al.* (1991) καθώς και από τους He *et al.* (1995). Οι τελευταίοι χρησιμοποίησαν μια δέσμη Laguerre-Gauss, ώστε η γωνιακή στροφορμή της δέσμης να μεταφερθεί στο σωματίδιο, με σκοπό την περιστροφή του. Η περιστροφή των σωματιδίων βοήθησε στη μέτρηση της ροπής κυρίως βιολογικών υλικών, όπως κύτταρα και οργανίδια κυττάρων. Ακόμα, η ανάπτυξη των ολογραφικών οπτικών παγίδων (Dufrense *et al.*, 2001; Grier and Roichman, 2006; Leach *et al.* 2004)^[1] αποτέλεσε μια από τις εφαρμογές της οπτικής παγίδευσης και έδωσε τη δυνατότητα για τριδιάστατη, πολλαπλή ακινητοποίηση σωματιδίων.

Τέλος, τα φαινόμενα πίεσης ακτινοβολίας δεν εφαρμόστηκαν μόνο για το μικροχειρισμό σωματιδίων και κυττάρων, αλλά και για την παγίδευση και τη ψύξη ατόμων. Το 1997 απονεμήθηκε το Νόμπελ Φυσικής στους Chu, Cohen-Tannoudji, Phillips, για την παγίδευση ενός ατόμου για πρώτη φορά.

2.3 Φυσικές Αρχές της Οπτικής Παγίδευσης

Η φυσική αρχή της οπτικής παγίδευσης βασίζεται στο φαινόμενο διατήρησης της ορμής. Η δέσμη του laser, και γενικότερα η ακτινοβολία, είναι ένα ηλεκτρομαγνητικό κύμα το οποίο μεταφέρει ορμή $p_{\text{αρχ}} = \frac{nE}{c}$, ανάλογη της ενέργειας της φωτεινής ακτινοβολίας και του δείκτη διάθλασης του περιβάλλοντος, και αντιστρόφως ανάλογη της ταχύτητας του φωτός. Καθώς η ακτινοβολία προσπίπτει πάνω σε ένα σωματίδιο με διαφορετικό δείκτη διάθλασης από εκείνον του περιβάλλοντος, ένα μέρος της ανακλάται στην επιφάνεια του σωματιδίου, ενώ ένα άλλο διαθλάται στο σωματίδιο. Η ορμή που ανακλάται είναι η αρχική μειωμένη κατά ένα ποσοστό R, και άρα να

εκφράζεται από τη σχέση $p_{\tau\epsilon\lambda} = R\frac{nE}{c}$.



Σχήμα 2.1: Εφαρμογή οπτικών δυνάμεων σαν αποτέλεσμα της πίεσης ακτινοβολίας^[5]

Λόγω της αρχής διατήρησης της ορμής, η ορμή του συστήματος φωτόνια-σωματίδιο θα πρέπει να παραμένει σταθερή πριν και μετά την πρόσπτωση του φωτός στο σωματίδιο. Η απώλεια της ορμής λόγω ανάκλασης δεν χάνεται, αλλά μεταφέρεται στο σωματίδιο, το οποίο και επιταχύνεται προς την αντίθετη κατεύθυνση από εκείνη της ανάκλασης. Η δύναμη που αναγκάζει το σωματίδιο να μετατοπιστεί, επειδή επιδρά πάνω σε συγκεκριμένη επιφάνεια, έχει τη μορφή πίεσης. Έτσι, έχουμε τη δημιουργία πίεσης ακτινοβολίας, μιας πίεσης που προέρχεται από τη δέσμη laser.

Εκτός όμως από την ανάκλαση, ένα μέρος της προσπίπτουσας δέσμης διαθλάται όταν το σωματίδιο στο οποίο προσπέσει είναι μερικώς διαπερατό. Τα φωτόνια της δέσμης διαθλώνται και η ορμή τους αλλάζει, καθώς παίρνουν από το ένα υλικό σε άλλο. Λόγω της αρχής διατήρησης της ορμής, η ορμή των φωτονίων θα μεταφερθεί στο σωματίδιο, με αποτέλεσμα την ανάπτυξη μιας δύναμης με διεύθυνση ίδια εκείνης της προσπίπτουσας ακτινοβολίας. Και στις δύο περιπτώσεις, αυτές οι οπτικές δυνάμεις ασκούνται στην επιφάνεια του σωματίδιου με αποτέλεσμα να έχουν τη μορφή πίεσης, ως αποτέλεσμα της παρουσίας της ακτινοβολίας. Η μαθηματική σχέση που περιγράφει την επαγόμενη οπτική δύναμη, λόγω της μεταφοράς της ορμής των φωτονίων στο σωματίδιο, είναι:

$$F = \frac{n}{c}P$$

με c να συμβολίζει την ταχύτητα του φωτός, n το δείκτη διάθλασης του περιβάλλοντος υλικού και P την ισχύ της φωτεινής δέσμης. Η απόδοση της οπτικής παγίδευσης, δηλαδή το πόσο ισχυρά είναι παγιδευμένο ένα σωματίδιο, περιγράφεται από την αδιάστατη ποσότητα Q , μετατρέποντας την προηγούμενη σχέση στην εξής:

$$F = Q\frac{n}{c}P$$

Για μικρά διηλεκτρικά και μεταλλικά σωματίδια, η τιμή του συντελεστή Q κυμαίνεται μεταξύ 0.03 και 0.1^[6]

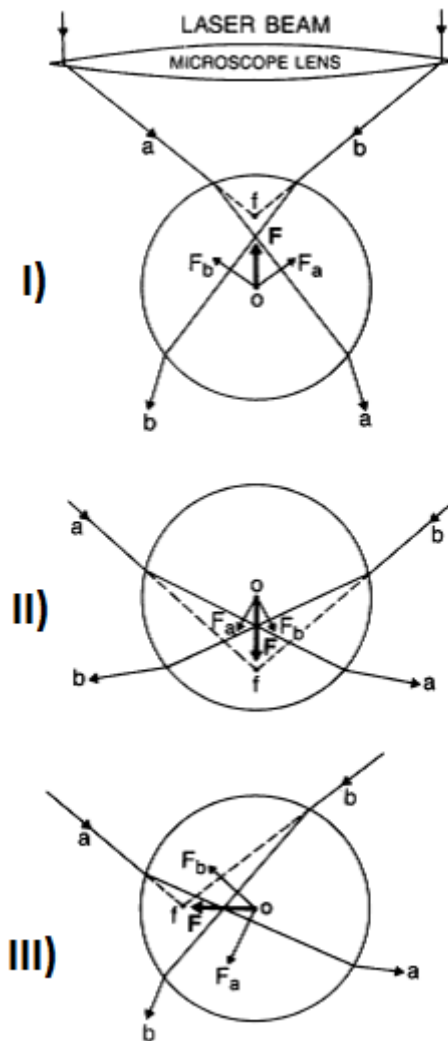
Η οπτική παγίδευση δημιουργείται από μια ισχυρά εστιασμένη δέσμη laser, η εστίαση της οποίας επιτυγχάνεται με τη βοήθεια ενός φακού μεγάλου αριθμητικού ανοίγματος (NA). Η συνολική δύναμη που ασκείται στο σωματίδιο από την ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία, αναλύεται σε δύο αλλές οπτικές δυνάμεις: τη δύναμη βαθμίδας

και τη δύναμη σκέδασης. Η ανάλυση της συνολικής οπτικής δύναμης έγινε ώστε να διευκολύνουμε την εξήγηση του φαινομένου της οπτικής παγίδευσης. Το άθροισμα αυτών των δύο δυνάμεων ισούται με την συνολική δύναμη που 'αισθάνεται' ένα παγιδευμένο σωματίδιο, ενώ και οι δύο αυτές δυνάμεις είναι αποτέλεσμα της πίεσης ακτινοβολίας.

Η δύναμη σκέδασης έχει κατεύθυνση ίδια με εκείνη της φωτεινής δέσμης της ακτινοβολίας και μοιάζει σαν να σπρώχνει το σωματίδιο στην κατεύθυνση της διάδοσης του φωτός. Η προσπίπτουσα στο σωματίδιο ακτινοβολία, σχεδιάζεται καθώς προσπίπτει σε κάποιο σωματίδιο, ενώ ένα μέρος της απορροφάται από το υλικό του σωματιδίου. Στην περίπτωση ισοτροπικού σκεδαστή, οι σχεδιάσεις στο χώρο αλληλοαναιρούνται εκτός από εκείνες που υφίσταται στην κατεύθυνση της διάδοσης της φωτεινής ακτινοβολίας. Μια τέτοια ισοτροπική σκέδαση οδηγεί σε μια δύναμη σκέδασης η οποία είναι, στη γενική περίπτωση, μεγαλύτερη από οποιαδήποτε άλλη δύναμη που ασκείται στο σωματίδιο.

Η δύναμη βαθμίδας δημιουργείται λόγω της έντονης βαθμίδας πεδίου που αναπτύσσεται σε μια περιοχή, κοντά στην εστία της δέσμης του laser. Κάθε ηλεκτρομαγνητικό κύμα, όπως είναι και το φως στη δική μας περίπτωση, δημιουργεί πόλωση σε κάθε υλικό το οποίο βρίσκεται μέσα σε αυτό^[7]. Αυτή η πόλωση αλληλεπιδρά με το ανομοιογενές πεδίο στην εστία της δέσμης, με αποτέλεσμα να δημιουργείται και να ασκείται η δύναμη βαθμίδας στην επιφάνεια του σωματιδίου. Η κατεύθυνση αυτής της δύναμης είναι προς την εστία της δέσμης του laser, όταν ο δείκτης διάθλασης του σωματιδίου είναι μεγαλύτερος από εκείνον του περιβάλλοντος υλικού. Σε αντίθεση περίπτωση, όταν δηλαδή ο δείκτης διάθλασης του σωματιδίου προς παγίδευση είναι μικρότερος από εκείνον του περιβάλλοντος, η δύναμη βαθμίδας έχει την τάση να οδηγεί το σωματίδιο που επιθυμούμε να παγιδεύσουμε, σε σημεία όπου η βαθμίδα του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου είναι ασθενέστερη.^[8,9] Η δύναμη βαθμίδας είναι ανάλογη με την πολωσιμότητα και τη βαθμίδα της έντασης του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου, όπως φαίνεται και από τη σχέση που την ορίζει:

$$F_{grad} = \frac{a}{2} \nabla E^2$$



Σχήμα 2.2: Συνολικές δυνάμεις στην οπτική παγίδευση. I) Η εστία της δέσμης βρίσκεται πάνω από το κέντρο του σωματιδίου, με τη συνολική δύναμη να το τραβάει προς εκείνη την περιοχή. II) Η εστία της δέσμης βρίσκεται κάτω από το κέντρο του διηλεκτρικού σωματιδίου ενώ III) η εστία βρίσκεται σε σημείο εκτός του κάθετου άξονα. Σε αυτή την τελευταία περίπτωση, το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο της ακτινοβολίας του ασκεί μια δύναμη που το φέρνει πάλι στον άξονα της δέσμης.^[6]

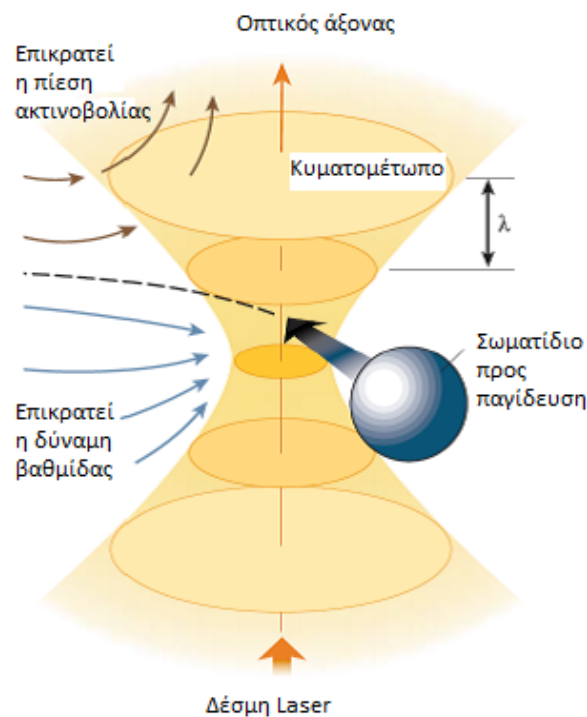
Ικανή και αναγκαία συνθήκη για να έχουμε μια σταθερή οπτική παγίδα είναι ότι η δύναμη βαθμίδας θα πρέπει να είναι μεγαλύτερη κατά μέτρο από τη δύναμη σκέδασης. Με αυτό τον τρόπο, η δύναμη που ασκείται στο σωματίδιο στη φορά της διεύθυνσης της δέσμης, δηλαδή η δύναμη σκέδασης ($F_{scattering}$) υπερνικάται από τη δύναμη βαθμίδας ($F_{gradient}$) που τραβά το σωματίδιο στην περιοχή της εστίας της δέσμης. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα το σωματίδιο να μένει σταθερό και ακινητοποιημένο στην εστία της δέσμης του laser. Στην περίπτωση που το σωματίδιο βρεθεί πάνω από την εστία της δέσμης, τότε τόσο η δύναμη σκέδασης όσο και η δύναμη βαθμίδας συμβάλλουν στην παγίδευση του σωματιδίου. Αν πάλι το σωματίδιο βρεθεί σε μια θέση κοντά στη φωτεινή δέση, αλλά όχι κατά μήκος του κεντρικού της άξονα, τότε η δύναμη βαθμίδας που θα ασκηθεί πάνω του θα είναι τέτοια που θα το τραβάει προς την ε-

στία της δέσμης, φέρνοντάς το μέσα στον οπτικό άξονα της δέσμης του laser. Αυτή η συμπεριφορά προϋποθέτει ότι η δύναμη σκέδασης είναι μικρότερη από τη δύναμη βαθμίδας. Η δύναμη βαθμίδας συμπεριφέρεται σαν δύναμη επαναφοράς, όταν μετατοπίσουμε ένα ήδη παγιδευμένο σωματίδιο. Εάν μετακινήσουμε κάποιο σωματίδιο από το σταθερό σημείο παγίδευσης του και εφόσον η οπτική παγίδα είναι σταθερή, τότε η δύναμη βαθμίδας θα τείνει να το επαναφέρει στο σημείο παγίδευσης.^[1,10,11] Η δύναμη επαναφοράς περιγράφεται από τη γνωστή σχέση:

$$F = -kx$$

όπου x η μετατόπιση του σωματιδίου μακριά από το σημείο παγίδευσης και k ο συντελεστής ακαμψίας της οπτικής παγίδας. Αυτός ο συντελεστής αποτελεί το μέτρο σύγκρισης μεταξύ των οπτικών παγίδων για τον προσδιορισμό της ισχύς τους.

Για να ασκηθεί οποιαδήποτε δύναμη από την ακτινοβολία πάνω στο διηλεκτρικό σωματίδιο, θα πρέπει αυτό να βρίσκεται μέσα στα όρια της φωτεινής δέσμης, είτε εξ' ολοκλήρου μέσα σε αυτή είτε σε κάποια μικρή απόσταση από τον κεντρικό άξονα της δέσμης. Διαφορετικά δεν μπορεί να παγιδευτεί ή να μεταφερθεί στον άξονα της δέσμης, αφού καμία πίεση ακτινοβολίας δεν επιδρά πάνω του.



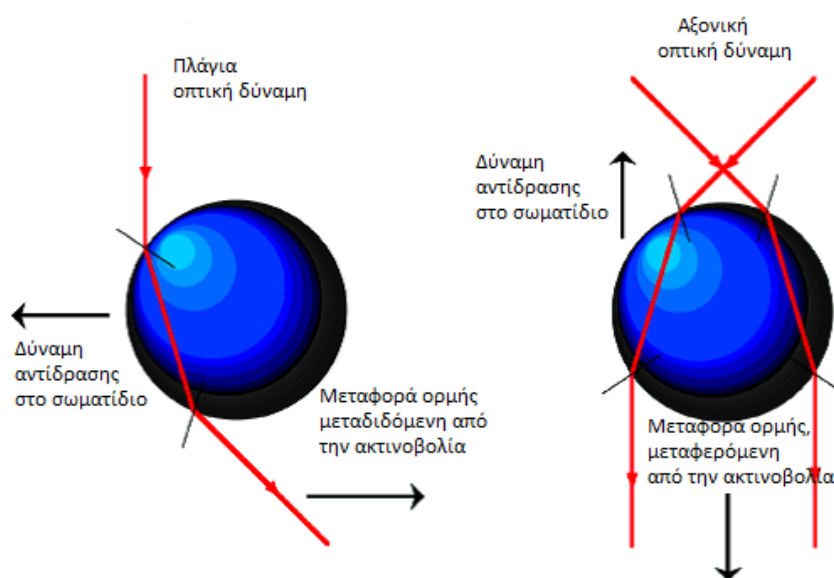
Σχήμα 2.3: Απεικόνιση παγίδευσης ενός διηλεκτρικού σωματιδίου^[12]

2.4 Ο Ρόλος του Μεγέθους του Σωματιδίου στην Οπτική Παγίδευση

Η επιτυχής ακινητοποίηση ενός σωματιδίου λόγω φαινομένων πίεσης ακτινοβολίας, εκτός των άλλων, επηρεάζεται και από το μέγεθος του σωματιδίου που επιθυμούμε

να παγιδεύσουμε. Το σύνηθες μέγεθος για το οποίο μπορούμε να δημιουργήσουμε μια σταθερή οπτική παγίδα είναι δέκατα του μικρόμετρου (10-100 μm περίπου). Για να μπορούμε να υπολογίσουμε την οπτική δύναμη θεωρητικά και να πάρουμε την κατάλληλη προσέγγιση κάθε φορά, κατηγοριοποιούμε το μέγεθος του σωματιδίου με βάση την ακτίνα του και τη σχέση της με το μήκος κύματος της προσπίπτουσας ακτινοβολίας. Έτσι, για σωματίδιο με ακτίνα r πολύ μεγαλύτερη του μήκος κύματος του laser ($r \gg \lambda$) έχουμε την εμφάνιση φαινομένων σκέδασης Mie και ο υπολογισμός των δυνάμεων μπορεί να γίνει με βάση την κλασική γεωμετρική οπτική. Η ίδια προσέγγιση λαμβάνεται υπόψη όταν το μέγεθος του σωματιδίου είναι συγκρίσιμο με το μήκος κύματος της ακτινοβολίας, όπως συμβαίνει και στην περίπτωση της δικής μας μελέτης. Στην περίπτωση όμως που η ακτίνα του σωματιδίου είναι αρκετά μικρότερη από το μήκος κύματος του laser ($r \ll \lambda$), τότε η γεωμετρική οπτική αποτυγχάνει και η ανάλυση των οπτικών δυνάμεων πραγματοποιείται, λαμβάνοντας υπόψη φαινόμενα σκέδασης Rayleigh.

Κατά τη σκέδαση Mie, η θεωρητική ανάλυση των οπτικών δυνάμεων γίνεται με βάση τη γεωμετρική οπτική και τα αποτελέσματα που παίρνουμε συμφωνούν σε μεγάλο βαθμό με σχετικά πειράματα. Η αρχή διατήρησης της ορμής των φωτονίων της προσπίπτουσας στα σωματίδια ακτινοβολίας, εφαρμόζεται σε αυτή την περίπτωση με μεγάλη επιτυχία. Καθώς η ακτινοβολία προσπίπτει πάνω στο σωματίδιο, ένα μέρος της ανακλάται προκαλώντας μια δύναμη πάνω στο σωματίδιο, που το αναγκάζει να μετατοπιστεί προς την κατεύθυνση διάδοσης της φωτεινής δέσμης. Τα φαινόμενα διάθλασης και γενικά τα φαινόμενα σκέδασης του φωτός, παίζουν κι αυτά ρόλο, δημιουργώντας μια οπτική δύναμη σ' ένα επίπεδο κάθετο στη διάδοση της ακτινοβολίας.



Σχήμα 2.4: Αξονική και πλάγια δύναμη, κατά τη σκέδαση Mie^[11]

Οι μαθηματικές σχέσεις της δύναμης σκέδασης και της δύναμης βαθμίδας προ-

κύπτουν από τις εξισώσεις Fresnel, λόγω των φαινομένων ανάκλασης και διάθλασης στο σωματίδιο, και είναι οι εξής:

$$F_z = F_{grad} = \frac{n_1 P}{c} \left\{ 1 + R \cos 2\theta - \frac{T^2 [\cos(2\theta - 2r) + R \cos 2\theta]}{1 + R^2 + 2R \cos 2r} \right\}$$

$$F_y = F_{scattering} = \frac{n_1 P}{c} \left\{ R \sin 2\theta - \frac{T^2 [\sin(2\theta - 2r) + R \sin 2\theta]}{1 + R^2 + 2R \cos 2r} \right\} [6]$$

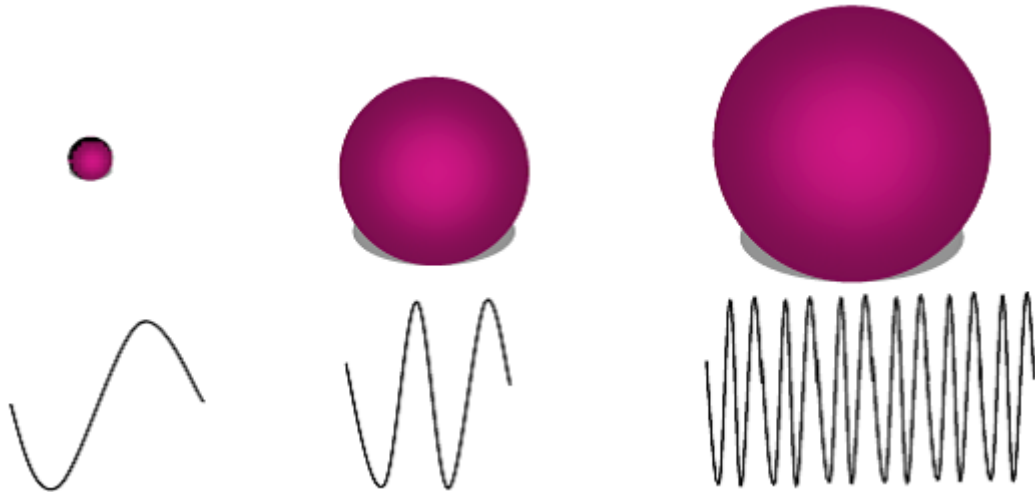
όπου n_1 ο δείκτης διάθλασης του υλικού, P η ισχύς της δέσμης του laser, c η ταχύτητα του φωτός, R, T οι συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης, r η γωνία διάθλασης, θ η γωνία πρόσπτωσης

Τα φαινόμενα διάθλασης έχουν νόημα στα διηλεκτρικά σωματίδια τα οποία έχουν κάποιο ποσοστό διαπερατότητας. Στην περίπτωση που τα σωματίδια προς παγίδευση ήταν μεταλλικά, τότε οι εξισώσεις των οπτικών δυνάμεων θα ήταν διαφορετικές, λόγω της έντονης ανάκλασης της ακτινοβολίας αλλά και λόγω απορρόφησης που παρουσιάζουν τα μέταλλα. Όσον αφορά σωματίδια των οποίων το μέγεθος τους είναι πολύ μικρότερο σε σύγκριση με το μήκος κύματος της φωτεινής δέσμης ($r \ll \lambda$), οι σχέσεις που δίνουν τη δύναμη σκέδασης και τη δύναμη βαθμίδας αντίστοιχα είναι:

$$F_{scattering} = \frac{I_0}{c} \frac{128\pi^5 r^6}{3\lambda^4} \left(\frac{N^2 - 1}{N^2 + 2} \right)^2 n \text{ και } F_{grad} = -\frac{n^3 r^3}{2} \left(\frac{N^2 - 1}{N^2 + 2} \right) \nabla (|E|^2) [11]$$

με I_0 η ένταση του laser, n ο δείκτης διάθλασης του περιβάλλοντος υλικού, r η ακτίνα του σωματιδίου, N το πηλίκο του δείκτη διάθλασης του σωματιδίου προς παγίδευση ως προς το δείκτη διάθλασης του περιβάλλοντος, E το ηλεκτρικό πεδίο της ακτινοβολίας. Όπως γίνεται κατανοητό από τις παραπάνω εξισώσεις, οι οπτικές δυνάμεις είναι ανάλογες της έντασης της δέσμης του laser. Ωστόσο, η αύξηση της έντασης της ακτινοβολίας δεν συνεπάγεται σε αύξηση της οπτικής δύναμης. Αντιθέτως, η βαθμίδα του πεδίου θα πρέπει να είναι έντονη ώστε η δύναμη βαθμίδας να υπερνικά τη δύναμη σκέδασης και να δημιουργείται μια σταθερή οπτική παγίδα. Μια αυξημένη ισχύς θα είχε ως αποτέλεσμα μια πολύ μεγάλη αύξηση στη δύναμη σκέδασης, με αποτέλεσμα η παγίδευση να μην είναι σταθερή και το σωματίδιο να παρασύρεται από αυτήν, κατά τη διεύθυνση διάδοσης της δέσμης.

Επιπλέον, στη σκέδαση Rayleigh, δηλαδή όταν θέλουμε να ακινητοποιήσουμε πολύ μικρά σωματίδια, υπάρχει ένα κάτω όριο όσον αφορά το μέγεθος του σωματιδίου.



Σχήμα 2.5: Σύγκριση μεγέθους σωματιδίου με το μήκος κύματος της προσπίπτουσας ακτινοβολίας^[5]

Στην περίπτωση που το μέγεθος του σωματιδίου είναι αρκετές φορές μικρότερο από το μήκος κύματος της ακτινοβολίας, το κύμα μπορεί να παρασύρει το σωματίδιο, χωρίς η δύναμη βαθμίδας να είναι σε θέση να το συγκρατήσει στην περιοχή της εστίασης, εξαιτίας και πάλι του μικρού του μεγέθους. Αντίθετα, σωματίδια με μέγεθος συγκρίσιμο ή μεγαλύτερο του μήκους κύματος δεν μπορούν να παρασυρθούν από αυτό, δημιουργώντας έτσι κατάλληλες συνθήκες για την επιτυχία της οπτικής παγίδευσης.

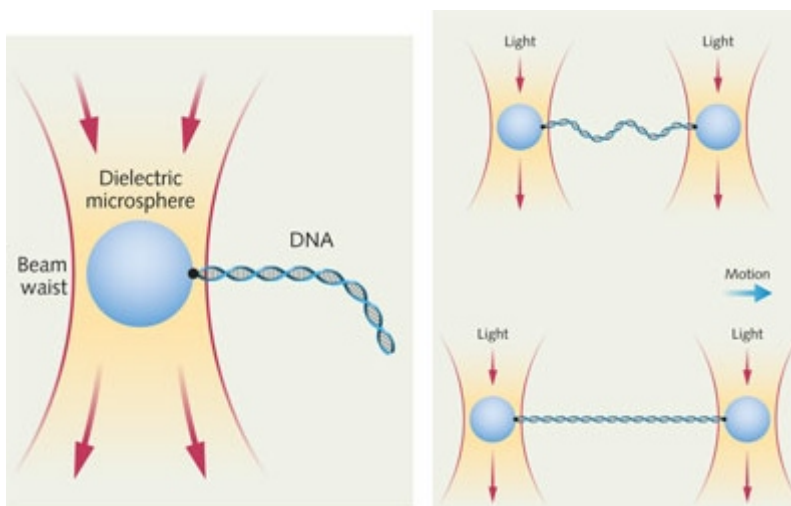
Μέχρι τώρα έχει δοθεί έμφαση στο ρόλο που παίζει το μέγεθος του σωματιδίου στην οπτική παγίδευση, όσον αφορά τα διηλεκτρικά σωματίδια. Ωστόσο, μπορούμε να δημιουργήσουμε σταθερές παγιδεύσεις χρησιμοποιώντας ακτινοβολία laser, και να παγιδεύσουμε μεταλλικά σωματίδια. Η διαφορά των μεταλλικών σωματιδίων από τα διηλεκτρικά, είναι ότι ανακλούν το φως σε πολύ μεγαλύτερο βαθμό. Αυτό μεταφράζεται σε διαφορετική συμπεριφορά της δύναμης σκέδασης, η οποία είναι ανάλογη του τετραγώνου του όγκου ($\sim r^6$) για μεταλλικά σωματίδια, και ανάλογη του όγκου ($\sim r^3$) για τα διηλεκτρικά σωματίδια, ενώ η δύναμη βαθμίδας είναι ανάλογη του r^3 και στις δύο περιπτώσεις.^[1] Έτσι, μπορούμε να έχουμε σταθερές παγιδεύσεις μεταλλικών σωματιδίων όταν το μέγεθός τους είναι αρκετά μικρό, αφού η δύναμη σκέδασης προκύπτει να είναι μικρότερη από την τιμή της δύναμης βαθμίδας. Αντίθετα, οι οπτικές δυνάμεις κατά την παγίδευση ενός διηλεκτρικού σωματιδίου διαφέρουν ελάχιστα, κάνοντάς το δυσκολότερο να παγιδευτεί ένα διηλεκτρικό σωματίδιο με μέγεθος πολύ μικρότερο από το μήκος κύματος της ακτινοβολίας.

2.5 Εφαρμογές της Οπτικής Παγίδευσης

Η οπτική παγίδευση είναι ένα πολύ χρήσιμο εργαλείο που βρίσκει εφαρμογές σε πολλούς τομείς της επιστήμης, από τη βιολογία και την ιατρική, μέχρι τη μικροηλεκτρονική και τη χημεία. Ο μικροχειρισμός και ο προσδιορισμός των μηχανικών ιδιοτήτων της ύλης, τόσο για μεταλλικά όσο και για διηλεκτρικά υλικά, ήταν πολύ χρήσιμος σε

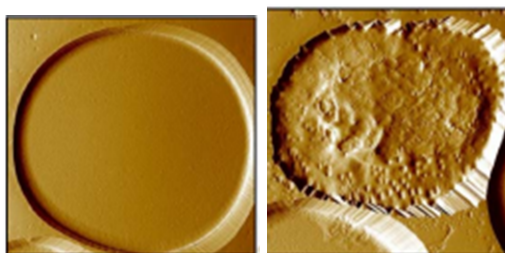
επιστήμες όπως η χημεία και η βιολογία, ώστε να μπορέσουν να μελετηθούν ιδιότητες που πρωτίτερα ήταν αδύνατον.

Μία τέτοια εφαρμογή αφορά την περιοχή της βιολογίας και συγκεκριμένα την μοριακή βιολογία. Με την ανάπτυξη διατάξεων οπτικής παγίδευσης, δόθηκε η δυνατότητα μελέτης των μηχανικών ιδιοτήτων του γενετικού υλικού (DNA). Τα δύο ελεύθερα άκρα του γενετικού υλικού αποτελούνται από αζωτούχες βάσεις, οι οποίες είναι αρνητικά φορτισμένες. Με χημικούς κυρίως τρόπους προσδένονται πάνω σε σωματίδια, τα οποία με τη σειρά τους παγιδεύονται σε δύο διαφορετικές οπτικές παγίδες. Αφού βεβαιωθούμε ότι τα σωματίδια είναι καλά παγιδευμένα, δηλαδή έχουμε σταθερά σημεία παγίδευσης, τότε ξεκινάμε και αποκρύνουμε το ένα σε σχέση με το άλλο. Το μόριο του DNA που βρίσκεται ανάμεσά τους αρχίζει να επιμηκύνεται και να εφελκύεται, καθώς η απομάκρυνση των δύο σφαιρών γίνεται όλο και μεγαλύτερη. Έτσι, με κατάλληλο χειρισμό των παγίδων, δίνεται η δυνατότητα μέτρησης της αντοχής του DNA, με σκοπό την μελέτη των μηχανικών ιδιοτήτων σε διάφορες φάσεις του κυτταρικού κύκλου^[13,14] καθώς και την αλληλουχία των βάσεων του γενετικού υλικού^[15]



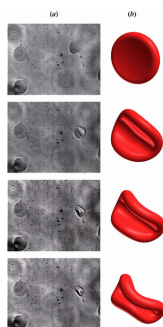
Σχήμα 2.6: Μέτρηση μηχανικών ιδιοτήτων του γενετικού υλικού με τη χρήση οπτικής παγίδευσης^[13]

Άλλη εφαρμογή της οπτικής παγίδευσης στο χώρο της ιατρικής είναι η χρήση τους για την διάγνωση του βακτηρίου του πλασμοδίου, το οποίο ευθύνεται για την πρόκληση ελονοσίας. Αυτό το βακτήριο μεταφέρεται μέσω μολυσμένων κουνουπιών και μπορεί να βρίσκεται μέσα στον οργανισμό, χωρίς να υπάρχουν συμπτώματα της ελονοσίας ή να μπορεί να διαγνωσθεί η ασθένεια με άλλο τρόπο. Το πλασμόδιο προσβάλλει τα ερυθρά αιμοσφαίρια, αλλάζοντάς τους τις μηχανικές ιδιότητες και κάνοντάς τα πιο άκαμπτα.



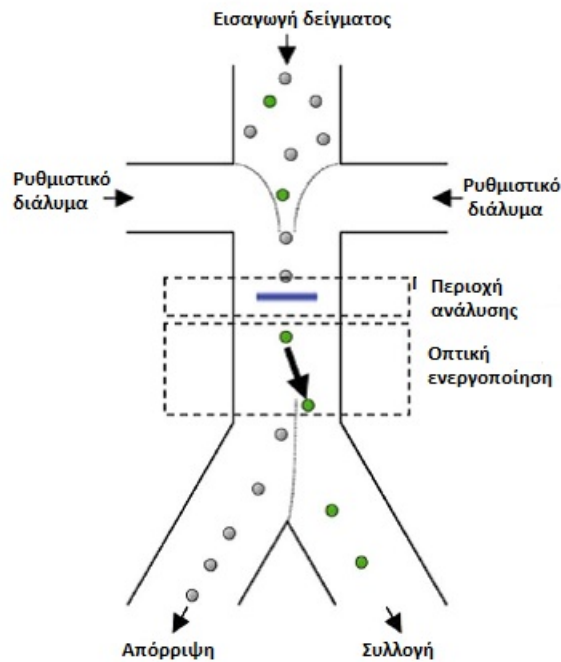
Σχήμα 2.7: Υγιές ερυθρό αιμοσφαίριο (αριστερα) και αιμοσφαίριο προσβλημένο από πλασμοδίο (δεξιά)^[16]

Με την οπτική παγίδευση, προκαλείται η παραμόρφωση των ερυθρών αιμοσφαιρίων και προσδιορίζεται η παρουσία ή μη του πλασμοδίου. Στην περίπτωση που η φωτεινή ακτινοβολία μπορεί να τα αναδιπλώσει κατά μήκος του πεπλατυσμένου επιπέδου τους, έχουμε απουσία του βακτηρίου, ενώ όταν αυτά είναι τελείως άκαμπτα, έχουμε την προσβολή του οργανισμού από πλασμοδίο, το οποίο μπορεί να εξελιχθεί σε ελονοσία. Αυτή η μέθοδος παρέχει έναν εύκολο, φθηνό και άμεσο τρόπο για την πρόωρη διάγνωση της ελονοσίας, τη στιγμή που άλλες μεθόδους αποτυγχάνουν και τα φάρμακα για την καταπολέμηση της ασθένειας είναι πολύ ακριβά^[16,17]. Στην εικόνα που ακολουθεί παρουσιάζεται η πίεση που ασκεί η ακτινοβολία στα ερυθρά αιμοσφαίρια, με αποτέλεσμα να τα αναδιπλώνει, δίνοντας τη δυνατότητα εφαρμογής της μεθόδου για τη διάγνωση της ελονοσίας.



Σχήμα 2.8: Συμπίεση των ερυθρών αιμοσφαιρίων χρησιμοποιώντας οπτική παγίδευση^[18]

Τέλος, μια άλλη εφαρμογή της οπτικής παγίδευσης είναι ο οπτικός διαχωρισμός (optical sorting/optical micromanipulation).^[19,20,21] Όπως είδαμε, το μέγεθος καθώς και το υλικό από το οποίο αποτελείται το σωματίδιο προς παγίδευση παίζουν καθοριστικό ρόλο για την παγίδευσή του. Επιπλέον, τα χαρακτηριστικά του σωματιδίου χρειάζεται να συνδυαστούν κατάλληλα με τις ιδιότητες της δέσμης του laser, για να πετύχουμε μια σταθερή οπτική παγίδευση. Μια συγκεκριμένη ακτινοβολία επιδρά διαφορετικά πάνω σ' ένα σωματίδιο, ασκώντας μεγαλύτερη ή μικρότερη δύναμη σε αυτό, ανάλογα με τις οπτικές ιδιότητές του. Εχμεταλλευόμενοι το γεγονός αυτό, καθώς και το ότι η οπτική παγίδευση μπορεί να επέμβει σ' ένα δείγμα ανέπαφα, μπορούμε να διαχωρίσουμε σωματίδια με διαφορετικά χαρακτηριστικά και να τα διαχειριστούμε χρησιμοποιώντας μια φωτεινή ακτινοβολία. Ο οπτικός διαχωρισμός μπορεί να γίνει με μία ή με δύο δέσμες laser, ενώ η χρήση αισθητήρων είναι απαραίτητοι^[21]. Αυτή η εφαρ-



Σχήμα 2.9: Απεικόνιση οπτικού διαχωρισμού. Τα σωματίδια που μας ενδιαφέρουν, τα διαχειριζόμαστε μέσω του φαινομένου της οπτικής παγίδευσης. (Τροποποιημένη εικόνα από [19])

μογή του φαινομένου της οπτικής παγίδευσης, βρίσκει εφαρμογές στην ιατρική και τη βιολογία, αλλά και στη βιομηχανία των υλικών. Όσον αφορά τον τομέα της βιολογίας, μέσω του οπτικού διαχωρισμού δίνεται η δυνατότητα διαχώρισης των συστατικών του αίματος και διαχείρισής τους, ακόμα και διαχωρισμού κυττάρων^[22], προσφέροντας την ικανότητα ταυτοποίησης βιολογικών υλικών και ανίχνευσης ασθενειών. Έτσι, το φαινόμενο της οπτικής παγίδευσης έδωσε τη δυνατότητα να συλλέγουμε υλικά, χωρίς την επέμβαση κάποιου εργαλείου, σε πραγματικό χρόνο, με μικρό κόστος και μεγάλη διακριτική ικανότητα, αφού η φύση του φωτός μπορεί να ξεχωρίσει ακόμα και πολύ μικρές διαφορές μεταξύ των σωματιδίων με τα οποία έρχεται σε επαφή.

Η οπτική παγίδευση έχει αναρίθμητες και σημαντικές εφαρμογές, ιδιαίτερα όσον αφορά τους τομείς της ιατρικής και της βιολογίας, λόγω του μη επεμβατικού χαρακτήρα του φωτός. Με τον οπτικό διαχειρισμό μικρών σωματιδίων, μπορούμε να ακόμα και να μεταφέρουμε φάρμακα (drug delivery) ή γενικά άλλες χημικές ουσίες και να τις τοποθετήσουμε επιλεκτικά πάνω σε κύτταρα.^[23] Με αυτό τον τρόπο, δίνεται η δυνατότητα διαχείρισης βιολογικών μορίων που δεν ήταν δύσκολο να διαχειριστούν πρωτίτερα, ενώ ταυτόχρονα οι ουσίες μπορούν είτε να μελετηθούν στο εργαστήριο *in vitro*, είτε να εισαχθούν σε ζωντανό οργανισμό *in vivo*. Εκτός όμως από τις πολλαπλές βιολογικές εφαρμογές, η οπτική παγίδευση μπορεί να χρησιμοποιηθεί και στον τομέα της μικροηλεκτρονικής, όπου με τη βοήθεια μιας δέσμης laser, δίνεται η δυνατότητα μετακίνησης και διαχειρισμού σωματιδίων πολύ μικρών διαστάσεων.

Κεφάλαιο 3

Διέγερση Πλασμονικού Πεδίου σε Μεταλλικές Επιφάνειες

Είναι γνωστό πως τα μέταλλα, όταν βρίσκονται στη βασική τους κατάσταση, αποτελούνται από ένα νέφος ελεύθερων ηλεκτρονίων, τα οποία δεν ανήκουν στα άτομα του στοιχείου, αλλά είναι μέρος του συνολικού όγκου του μετάλλου. Αυτά τα ελεύθερα ηλεκτρονία είναι υπεύθυνα για την ανακλαστικότητα και την υψηλή αγωγιμότητα που συναντάμε στα μέταλλα. Όταν αυτά τα ηλεκτρονία βρεθούν κάτω από την επίδραση ενός ηλεκτρομαγνητικού πεδίου, αρχίζουν να ταλαντώνονται. Στην περίπτωση συντονισμού της ταλάντωσης των ηλεκτρονίων με τη συχνότητα διέγερσης τους, και κάτω από κατάλληλες συνθήκες, δημιουργείται ένα πεδίο ηλεκτρομαγνητικής φύσης πάνω στη μεταλλική επιφάνεια. Το κβαντικό σωματίδιο της ταλάντωσης του πλάσματος ονομάζεται πλασμόνιο και αυτά τα ηλεκτρομαγνητικά κύματα ονομάζονται πλασμόνια επιφανείας. Όταν η ανάπτυξη των πλασμονίων γίνεται στην επιφάνεια μεταλλικών νανοσωματιδίων, τότε το πλασμονικό πεδίο που έχει δημιουργηθεί, έχει τη δυνατότητα συμβολής με το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο που το διέγειρε αρχικά, κάτω από ορισμένες συνθήκες. Αυτή η συμβολή συνεπάγεται σε τοπική και μικρής εμβέλειας, ωστόσο ισχυρή ενίσχυση του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου.

Η ενίσχυση του πεδίου που επιτυγχάνεται μέσω της διέγερσης των πλασμονίων επιφάνειας, υπόσχεται πολλές εφαρμογές. Όσον αφορά τη δική μας έρευνα και τη συγκεκριμένη μελέτη, τα πλασμόνια συνδυάζονται με την οπτική παγίδευση, με σκοπό την παγίδευση μικρότερων σωματιδίων, σε μεγέθη κάτω του ορίου Rayleigh όπου η κλασική οπτική παγίδευση αποτυγχάνει. Εκτός όμως από αυτό, η διέγερση των πλασμονίων βρίσκει πολλές εφαρμογές και στον τομέα της βιολογίας, όπου χρησιμοποιούνται μεταλλικά νανοσωματίδια με σκοπό την επισήμανση διάφορων βιολογικών δομών^[24].

3.1 Οπτικές Ιδιότητες Μετάλλων

Για την κατανόηση και την επεξήγηση του φαινομένου της διέγερσης των πλασμονίων επιφανείας, είναι αναγκαίο να γίνει μια υπενθύμιση στις οπτικές ιδιότητες των

μετάλλων. Η αλληλεπίδραση της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας με τα μέταλλα μπορεί να μελετηθεί επιλύοντας τις εξισώσεις του Maxwell στην κλασική προσέγγιση. Ακόμα και μεταλλικές δομές, το μέγεθος των οποίων δεν ξεπερνά μερικά νανόμετρα, μπορούν να περιγραφούν χωρίς χβαντικές διορθώσεις, αφού λόγω της υψηλής συγκέντρωσης των ελεύθερων φορέων στα μέταλλα, τα ενεργειακά επιπέδα στα οποία μπορούν να βρεθούν τα ηλεκτρόνια απέχουν μικρή απόσταση, συγκριτικά με τις θερμικές διεγέρσεις των ηλεκτρονίων, σε θερμοκρασία δωματίου.

Είναι γνωστό από την εμπειρία μας ότι τα μέταλλα το οπτικό φάσμα της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας δεν διεισδύει στα μέταλλα, αφού ανακλούν σχεδόν όλο το ποσό ακτινοβολίας που προσπίπτει σε αυτά. Στο κοντινό υπέρυθρο φάσμα της ακτινοβολίας, η διείσδυση του πεδίου στα μέταλλα αυξάνεται σημαντικά, ενώ στην υπεριώδη ακτινοβολία, τα μέταλλα αποκτούν διηλεκτρικό χαρακτήρα αφήνοντας το ηλεκτρομαγνητικό κύμα να διεισδύσει και να προχωρήσει μέσα από αυτά. Τέτοια φαινόμενα διασποράς, μπορούν να περιγραφούν από μια μιγαδική διηλεκτρική συνάρτηση της μορφής $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$. Η διηλεκτρική συνάρτηση του μετάλλου έχει μια ισχυρή εξάρτηση από τη συχνότητα της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας και γενικότερα, δείχνει την επίδραση ενός ηλεκτρομαγνητικού πεδίου πάνω σε κάποιο υλικό. Το πραγματικό της μέρος αντιστοιχεί στην πραγματική τιμή της συνάρτησης για κάθε τιμή της συχνότητας, ενώ το φανταστικό της μέρος εκφράζει τις διηλεκτρικές απώλειες στα μέταλλα, δηλαδή την απορρόφηση της ακτινοβολίας από το μέταλλο. Στις χαμηλές συχνότητες και συνηθέστερα σε θεωρητικές μελέτες, χρησιμοποιείται η αγωγιμότητα των μετάλλων για την περιγραφή των φαινομένων που προκύπτουν από την αλληλεπίδρασή τους με την ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία. Ωστόσο, στις οπτικές συχνότητες και σε πειραματικές μελέτες χρησιμοποιείται ευρύτερα η διηλεκτρική συνάρτηση των μετάλλων. Οι δύο αυτές φυσικές ποσότητες συνδέονται μεταξύ τους, μέσω της παρακάτω σχέσης:

$$\epsilon(k, \omega) = 1 + \frac{i\sigma(k, \omega)}{\epsilon_0 \omega}$$

όπου $\epsilon(k, \omega)$ η διηλεκτρική συνάρτηση του υλικού σε συνάρτηση με το κυματόνισμα και τη συχνότητα μιας ακτινοβολίας, $\sigma(k, \omega)$ η αγωγιμότητα του υλικού, ϵ_0 η διηλεκτρική σταθερά του κενού και ω η συχνότητα του ηλεκτρομαγνητικού κύματος. Η παραπάνω σχέση εξάγεται από τις εξισώσεις του Maxwell στην ύλη, όταν σε αυτή έχουμε σταθερά φορτία. Όταν το μήκος κύματος της ακτινοβολίας είναι μεγαλύτερο από τις διαστάσεις της μεταλλικής δομής, όπως συμβαίνει και στις προσομοιώσεις που υπολογίστηκαν στα πλαίσια αυτής της διπλωματικής εργασίας, τότε η διηλεκτρική συνάρτηση εξαρτάται αποκλειστικά από τη συχνότητα της ακτινοβολίας και άρα μπορούμε να πάρουμε την προσέγγιση: $\epsilon(k, \omega) = \epsilon(\omega)$. Επιπλέον, η παραπάνω σχέση δεν μπορεί να περιγράψει ξεχωριστά την απόκριση των ελεύθερων ηλεκτρονίων από εκείνη των δέσμιων ηλεκτρονίων, όταν το μέταλλο είναι εκτεθειμένο σε ένα ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Ωστόσο, για τις συχνότητες των δικών μας προσομοιώσεων είναι κάτι που δεν μας ενοχλεί, αφού στις οπτικές συχνότητες, η διάκριση μεταξύ ελεύθερων και δέσμιων ηλεκτρονίων είναι συγκεχυμένη^[15] Στις περιπτώσεις των χαμηλών συχνο-

τήτων, η διηλεκτρική συνάρτηση ϵ περιγράφει την απόκριση των δέσμιων ηλεκτρονίων ενώ η αγωγιμότητα σ την απόκριση των ελεύθερων ηλεκτρονίων στο μέταλλο κάτω από μια ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία. Έτσι, στη γενικότερη περίπτωση και για μια πιο ακριβέστερη περιγραφή της διηλεκτρικής απόκρισης των μετάλλων, χρειάζεται να εισάγουμε στο πρόβλημα τις κατάλληλες τιμές των ϵ και σ κάθε φορά. Ακόμη, η διηλεκτρική συνάρτηση μπορεί να εκφραστεί και μέσα από το δείκτη διάθλασης του υλικού, αφού:

$$n(\omega) = n_1(\omega) + i\kappa(\omega) = \epsilon(\omega)$$

καταλήγοντας στις σχέσεις:

$$\epsilon_1 = n^2 - \kappa^2 \text{ και } \epsilon_2 = 2n\kappa$$

με το n να εκφράζει το δείκτη διάθλασης και κ το συντελεστή απορρόφησης του υλικού.

3.2 Φυσικές Αρχές των Πλασμονίων

Οι οπτικές ιδιότητες των μετάλλων, για ένα μεγάλο εύρος συχνοτήτων, μπορούν να περιγραφούν από ένα μοντέλο πλάσματος (plasma model), όπου το ηλεκτρονιακό νέφος μπορεί να κινηθεί ως προς ένα συγκεκριμένο πυρήνα θετικών ιόντων.^[24] Τα ηλεκτρόνια ταλαντώνονται όταν διεγερθούν από ένα εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο και η εξίσωση που περιγράφει αυτή την ταλάντωση, στη γενική περίπτωση, είναι:

$$m\ddot{x} + m\gamma\dot{x} = -eE$$

όπου m η μάζα του κάθε ηλεκτρονίου, γ ο συντελεστής απόσβεσης της ταλάντωσης, e το φορτίο του ηλεκτρονίου και E το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο που προκαλεί την ταλάντωση. Ο συντελεστής απόσβεσης καλείται και συχνότητα σύγκρουσης, επειδή η απόσβεση της ταλάντωσης των ηλεκτρονίων σθένους οφείλεται σε συγκρούσεις μεταξύ των ηλεκτρονίων. Αυτή η συχνότητα σύγκρουσης (ή συντελεστής απόσβεσης) είναι ίσος με $\gamma = 1/\tau$, με το τ να αποτελεί το χρόνο χαλάρωσης της ταλάντωσης του αερίου ηλεκτρονίων και είναι της τάξης των 10^{-14} s. Η λύση της παραπάνω διαφορικής εξίσωσης θα έχει τη μορφή εξίσωσης κύματος:

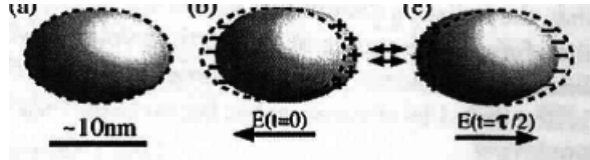
$$x(t) = \frac{e}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)} E(t)$$

και με τη μακροσκοπική πόλωση που επάγεται στο υλικό να παίρνει τη μορφή:

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

Μια άλλη παράμετρος που χρειάζεται να εισάγουμε στο μοντέλο του πλάσματος το οποίο μελετάμε, είναι η συχνότητα του πλάσματος ω_p που ισούται με:

$$\omega_p = \sqrt{\frac{ne^2}{\epsilon_0 m}}$$



Σχήμα 3.1: Ταλάντωση νέφους ηλεκτρονίων σε ένα μεταλλικό νανοσωματίδιο^[24]

με n την πυκνότητα φορέων στο μέταλλο. Ορίζει τη συχνότητα με την οποία ταλαντώνεται το αέριο των ελεύθερων ηλεκτρονίων στο μοντέλο του πλάσματος. Εξαρτάται από τη μάζα και το φορτίο του κάθε ηλεκτρονίου καθώς και από την πυκνότητά τους στο μέταλλο. Αυτό το γεγονός ευθύνεται για την εξάρτηση της διέγερσης των πλασμονίων επιφανείας από τη γεωμετρία της μεταλλικής δομής, όπως θα αναλυθεί στη συνέχεια. Έτσι, εκφράζουμε τη διηλεκτρική συνάρτηση του αερίου των ελεύθερων ηλεκτρονίων (όπως ορίζεται από το μοντέλο) ως εξής:

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

Για μεγάλες συχνότητες κοντά στη συχνότητα πλάσματος, οι ιδιότητες των μετάλλων αρχίζουν να μεταβάλλονται και η παραπάνω εξίσωση παίρνει τη μορφή:

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

Μπορούμε να συνδέσουμε αυτή την εξίσωση με το μοντέλο Drude, που περιγράφει τη μεταβολή του πεδίου λόγω της διαφορετικής αγωγιμότητας του κάθε μετάλλου, η οποία με τη σειρά της συνδέεται με τη διηλεκτρική συνάρτηση του μετάλλου. Το μοντέλο Drude περιγράφει σε ικανοποιητικό βαθμό τις οπτικές ιδιότητες των μετάλλων, όταν η ενέργεια των φωτονίων της προσπίπτουσας ακτινοβολίας δεν ξεπερνά το ενεργειακό κατώφλι των μεταβάσεων των ηλεκτρονίων σε άλλες ενεργειακές στάθμες.^[25] Επιπλέον, η περιγραφή των φαινομένων διασποράς μέσω του μοντέλου Drude και της διηλεκτρικής συνάρτησης δεν είναι ικανοποιητική όσον αφορά τον προσδιορισμό της συνεισφοράς των ελεύθερων ή των δέσμιων ηλεκτρονίων στη δημιουργία των πλασμονίων.

Αυτή η ταλάντωση των ηλεκτρονίων ως προς τον πυρήνα των θετικών ιόντων, οδηγεί στην παρουσία μιας ενέργειας από την οποία προκύπτει η διέγερση των πλασμονίων και επομένως η τοπική ενίσχυση του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου. Επομένως, τα πλασμόνια, στη γενική περίπτωση, μπορούν να περιγραφούν από μια εξίσωση κύματος, με αποτέλεσμα να αποτελούν κυματικά φαινόμενα. Αυτή η κυματική φύση των πλασμονίων επιτρέπει τη σύζευξη μεταξύ τους καθώς και τη σύζευξη πλασμονίων-φωτονίων, όπως θα εξεταστεί στη συνέχεια. Η συχνότητα της ακτινοβολίας που ευθύνεται για αυτή την ταλάντωση θα πρέπει να είναι κοντά στη συχνότητα πλάσματος, ώστε να υπάρξει συντονισμός και να έχουμε τη δημιουργία πλασμονικού πεδίου από μεταλλικές επιφάνειες.

Τα πλασμόνια μπορούν να ταξινομηθούν σε διάφορες κατηγορίες, ανάλογα με τη θέση πάνω στο μέταλλο όπου δημιουργούνται και διαδίδονται. Έτσι, έχουμε τις εξής κυριότερες κατηγορίες:

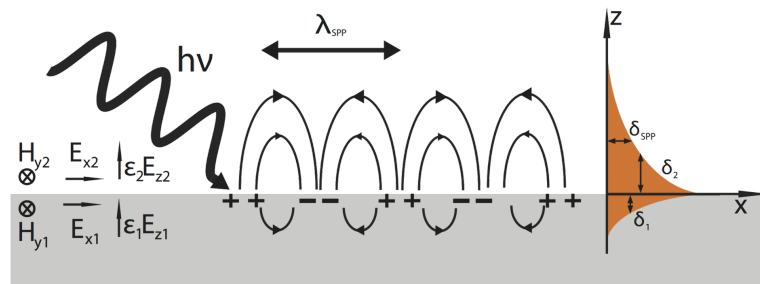
- Πλασμόνια όγκου (bulk plasmons): Αποτελούν το χβαντικό σωματίδιο του πλάσματος. Η διέγερσή τους οφείλεται στην ταλάντωση των ηλεκτρονίων που βρίσκονται σε όλο τον όγκο του μετάλλου.
- Πλασμόνια επιφάνειας (surface plasmons): Οφείλονται στην ταλάντωση του ηλεκτρονιακού νέφους των μετάλλων. Δημιουργούνται στη διεπιφάνεια μεταξύ μετάλλου και διηλεκτρικού υλικού λόγω της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας και διαδίδονται κάθετα στη διεπιφάνεια μετάλλου-διηλεκτρικού με τη μορφή ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων. Στη διεπιφάνεια μετάλλου - διηλεκτρικού, το πραγματικό μέρος της διηλεκτρικής συνάρτησης $\epsilon(\omega)$ αλλάζει πρόσημο, δημιουργώντας αυτό το ηλεκτρομαγνητικό κύμα.

Τα πλασμόνια επιφάνειας είναι εκείνα που μας ενδιαφέρουν στην παρούσα εργασία και τα οποία εκμεταλλευόμαστε με σκοπό την ενίσχυση της έντασης της οπτικής παγίδευσης. Αυτά, με τη σειρά τους, διακρίνονται σε:

- επιφανειακά πλασμόνια - πολαριτόνια (surface plasmons-polaritons, SPPs)
- εντοπισμένα επιφανειακά πλασμόνια (localized surface plasmons, LSPs)

3.2.1 Επιφανειακά Πλασμόνια - Πολαριτόνια (surface plasmons-polaritons, SPPs)

Τα επιφανειακά πλασμόνια - πολαριτόνια είναι ηλεκτρομαγνητικά κύματα που διαδίδονται στη διεπιφάνεια μετάλλου - διηλεκτρικού, τα οποία φθίνουν κάθετα στην επιφάνεια πάνω στην οποία διαδίδονται. Η μείωσή τους σημειώνεται στον κάθετο στη διεπιφάνεια άξονα και σύμφωνα με τη θεωρία είναι εκθετική. Το κύριο χαρακτηριστικό τους είναι η σύζευξή τους με τα φωτόνια της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας η οποία διέγερει αυτές τις ταλαντώσεις του πλάσματος στην αρχή.



Σχήμα 3.2: Αναπαράσταση της διέγερσης και διάδοσης των επιφανειακών πλασμονίων - πολαριτόνιων^[26]

Για τη μελέτη των επιφανειακών πλασμονίων - πολαριτόνιων, χρειάζεται να χρησιμοποιήσουμε την κυματική μορφή των εξισώσεων του Maxwell, πάνω στην επίπεδη επιφάνεια του μετάλλου και του διηλεκτρικού. Έτσι, ξεκινώντας από την εξίσωση στροβιλισμού του ηλεκτρικού πεδίου μιας ακτινοβολίας:

$$\nabla \times \nabla \times E = -\mu_0 \frac{d^2 D}{dt^2}$$

Χρησιμοποιώντας την ταυτότητα: $\nabla \times \nabla \times E = \nabla(\nabla E) - \nabla^2 E$ και υπενθυμίζοντας ότι $\nabla D = 0$, λόγω απουσίας εξωτερικών φορτίων, προκύπτει η παρακάτω εξίσωση:

$$\nabla^2 E - \frac{\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2}$$

Έπειτα, θεωρούμε λύσεις με κυματική μορφή, $E(r, t) = E(r)e^{-i\omega t}$ και λαμβάνουμε υπόψη μας ότι η διάδοση των πλασμονίων γίνεται σε έναν άξονα, έστω κατά μήκος του άξονα x , με αποτέλεσμα η προηγούμενη κυματική εξίσωση να παίρνει τη μορφή $E(x, y, z) = E(z)e^{i\beta x}$, με το β να αποτελεί τη σταθερά διάδοσης του κύματος και το οποίο ισούται με τον κυματαριθμό της ακτινοβολίας στη διάδοση του κύματος (στην προκειμένη περίπτωση στον x άξονα). Λαμβάνοντας υπόψη όλα τα παραπάνω η κυματική εξίσωση του Maxwell, γίνεται ως εξής:

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} + (k_0^2 \epsilon - \beta^2)E = 0$$

Η ίδια εξίσωση προκύπτει και για το μαγνητικό πεδίο:

$$\frac{\partial^2 H}{\partial z^2} + (k_0^2 \epsilon - \beta^2)H = 0$$

Στη συνέχεια, για τον προσδιορισμό του χωρικού προφίλ των κυμάτων που δημιουργούνται λόγω διέγερσης των πλασμονίων επιφανείας, χρειάζεται απλά να υπολογίσουμε τον στροβιλισμό των κυματικών εξισώσεων που προέκυψαν ακριβώς παραπάνω. Επίσης, θεωρούμε αρμονική χρονική εξάρτηση του κύματος ($\frac{\partial}{\partial t} = -i\omega$), διάδοση του κύματος κατά τον άξονα x ($\frac{\partial}{\partial x} = i\beta$) και ομοιογένεια στον άξονα y ($\frac{\partial}{\partial y} = 0$). Έτσι, έχουμε τις εξής εξισώσεις:

$$\frac{\partial E_y}{\partial z} = -i\omega\mu_0 H_x$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - i\beta E_z = i\omega\mu_0 H_y$$

$$i\beta E_y = i\omega\mu_0 H_z$$

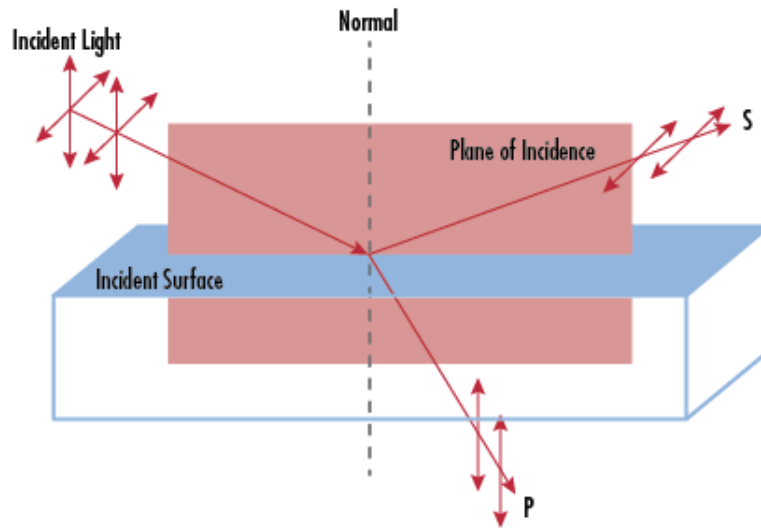
$$\frac{\partial H_y}{\partial z} = i\omega\epsilon\epsilon_0 E_x$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - i\beta H_z = -i\omega\epsilon\epsilon_0 E_y$$

$$i\beta H_y = -i\omega\epsilon\epsilon_0 E_z$$

από τις οποίες οι τρεις πρώτες αντιστοιχούν σε TM πόλωση (ή π-πόλωση) του ηλεκτρομαγνητικού κύματος, ενώ οι τρεις τελευταίες εξισώσεις αντιστοιχούν σε TE πόλωση. Η πόλωση TM (transverse magnetic) ή αλλιώς κάθετη μαγνητική πόλωση ή π-πόλωση, δηλώνει ότι το μαγνητικό πεδίο της ακτινοβολίας είναι κάθετο στο επίπεδο διάδοσης, με τις συνιστώσες E_x, E_z, H_y να είναι μη μηδενικές. Αντιθέτως, στην κάθετη ηλεκτρική πόλωση, δηλαδή για TE πολωμένα κύματα (transverse electric) ή

σ-πόλωση, όπως συνηθίζεται να λέγεται στην οπτική, οι μη μηδενικές συνιστώσες του πεδίου είναι οι H_x, H_z, E_y , με το ηλεκτρικό πεδίο της ακτινοβολίας να είναι κάθετο στο επίπεδο διάδοσής της. Για τη διέγερση πλασμονίων - πολαριτόνιων, η ακτινοβολία που θα πρέπει να προσπέσει στη διεπιφάνεια μετάλλου - διηλεκτρικού θα πρέπει να είναι π-πολωμένη^[25]. Αυτό συμβαίνει επειδή μόνο τα TM κύματα μπορούν να συντηρήσουν ηλεκτρομαγνητικά κύματα, με βαθμιαία μείωση κάθετη στον άξονα z, δηλαδή πλασμόνια-πολαριτόνια.

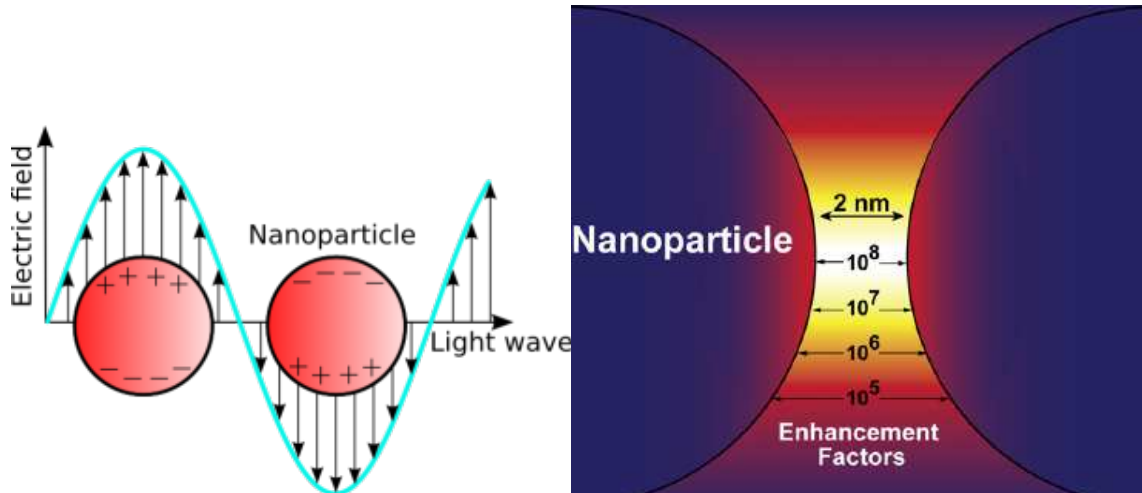


Σχήμα 3.3: Αναπαράσταση της π και σ-πόλωσης^[27]

3.2.2 Εντοπισμένα επιφανειακά πλασμόνια (localized surface plasmons, LSPs)

Τα εντοπισμένα πλασμόνια επιφάνειας, σε αντίθεση με τα επιφανειακά πλασμόνια - πολαριτόνια, είναι διεγέρσεις του ηλεκτρονιακού νέφους των μετάλλων που συζεύγονται με το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο της ακτινοβολίας που τα διεγείρει, χωρίς να διαδίδονται στην επιφάνεια του μετάλλου.

Για την επεξήγηση αυτού του είδους πλασμονίων, θεωρούμε ένα μεταλλικό σωματίδιο και διάμετρο αρκετά μικρότερη από το μήκος κύματος της ακτινοβολίας. Όταν αυτό το σωματίδιο βρεθεί μέσα στο ηλεκτρομαγνητικό πεδίο της ακτινοβολίας, δημιουργείται μία δύναμη επαναφοράς στα ηλεκτρόνια που ταλαντώνονται λόγω του πεδίου. Αυτή η δύναμη επαναφοράς οφείλεται στη σκέδαση του φωτός λόγω της καμπυλότητας στη γεωμετρία του σωματιδίου. Στην περίπτωση που επέλθει συντονισμός στην ταλάντωση της ακτινοβολίας με εκείνη του ηλεκτρονιακού νέφους, παρατηρείται τοπική ενίσχυση του πεδίου, τόσο μέσα στο μεταλλικό νανοσωματίδιο όσο και έξω από αυτό. Η ενίσχυση του πεδίου μειώνεται έντονα και σε σχετικά μικρή απόσταση από το σωματίδιο.



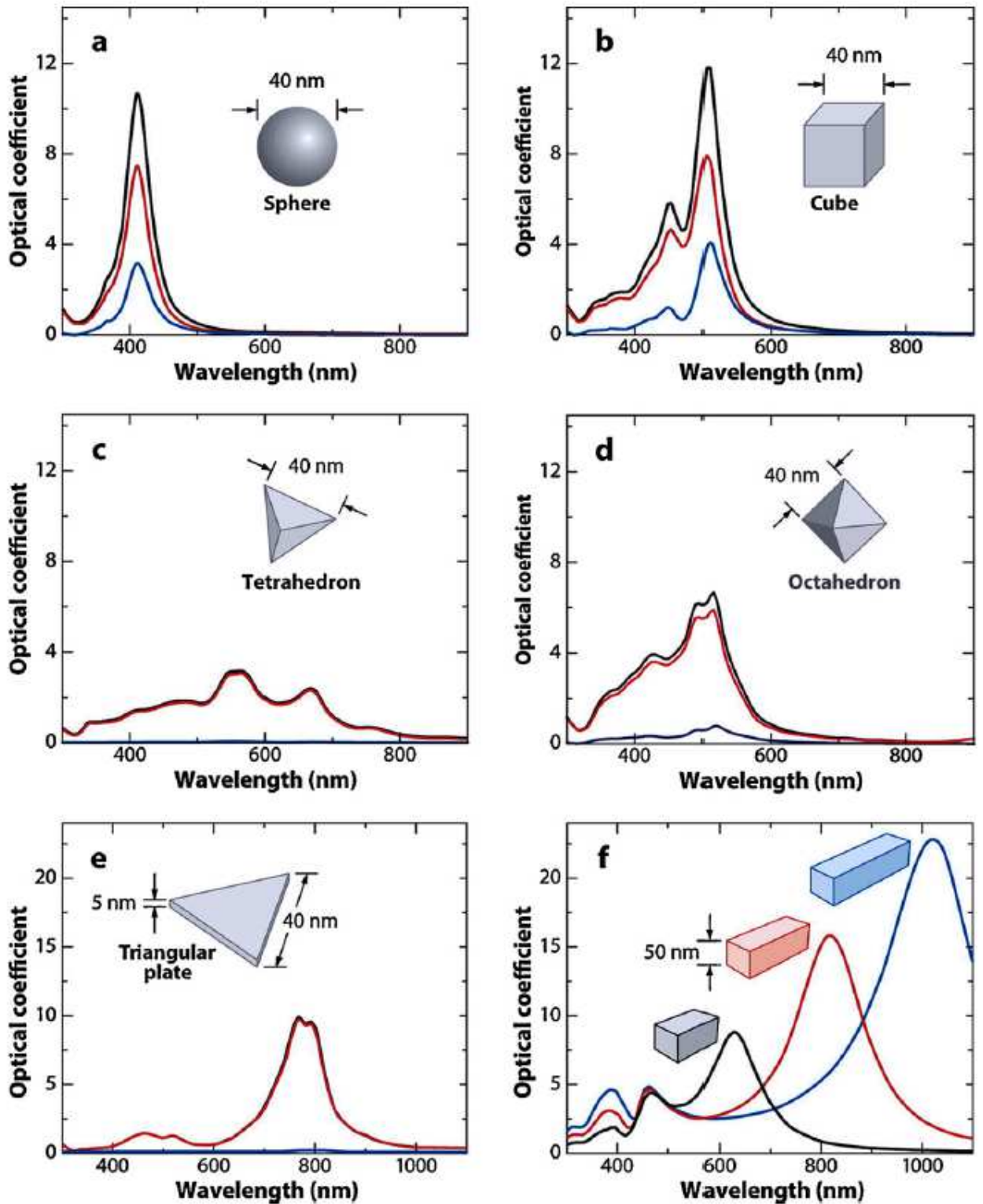
Σχήμα 3.4: Ταλάντωση ηλεκτρονίων κατά τη διέγερση των εντοπισμένων πλασμονίων και απεικόνιση της ενίσχυσης του πεδίου μεταξύ δύο μεταλλικών σφαιρών^[29,30]

Η θεωρητική ανάλυση των εντοπισμένων πλασμονίων είναι περισσότερο πολύπλοκη και εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από το σχήμα του μεταλλικού νανοσωματιδίου. Στην περίπτωση μεταλλικής σφαίρας, διαμέτρου πολύ μικρότερης από το μήκος κύματος της ακτινοβολίας, υπολογίζεται^[30] η ροή της ενέργειας του πεδίου μέσα και έξω από τα όρια της σφαίρας:

$$\Phi_{out} = -E_0 r \cos\theta + \frac{\varepsilon - \varepsilon_m}{\varepsilon + 2\varepsilon_m} E_0 a^3 \frac{\cos\theta}{r^2}$$

$$\Phi_{in} = -\frac{3\varepsilon_m}{\varepsilon + 2\varepsilon_m} E_0 r \cos\theta$$

Ο συντονισμός για την ενίσχυση του πεδίου επέρχεται σε διαφορετικά μήκη κύματος της προσπίπτουσας ακτινοβολίας και καθορίζεται από το μέγεθος και το σχήμα του νανοσωματιδίου. Ανάλογα με το σχήμα του σωματιδίου, η ενίσχυση επέρχεται σε διαφορετικό μήκος κύματος, όπως φαίνεται και στην εικόνα που ακολουθεί. Αυτό οφείλεται στη διαφορετική σκέδαση της ακτινοβολίας λόγω διαφορετικού σχήματος και μεγέθους του σωματιδίου. Επιπλέον, η κατανομή των φορέων, και στην προκειμένη περίπτωση του ηλεκτρονιακού νέφους, διαφέρει ανάλογα με τη γεωμετρία του μεταλλικού νανοσωματιδίου και γι' αυτό το λόγο η γεωμετρία παίζει καθοριστικό ρόλο στη διέγερση των εντοπισμένων πλασμονίων επιφανείας. Σημαντικό ρόλο παίζει επίσης και ο αριθμός τέτοιων σωματιδίων, όταν αυτά βρίσκονται σε μια νανοδομή, το υλικό τους, η μεταξύ τους απόσταση, το υπόστρωμα πάνω στο οποίο έχουν κατασκευαστεί, καθώς και το περιβάλλον όπου γίνεται η διέγερση των εντοπισμένων επιφανειακών πλασμονίων.



Σχήμα 3.5: Εξάρτηση της ενίσχυσης του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου από το σχήμα του νανοσωματιδίου. Η μαύρη γραμμή αντιστοιχεί στη εξάλειψη των πλασμονίων, η κόκκινη στην απορρόφηση της ακτινοβολίας ενώ η μπλέ στο σχεδάζόμενο πεδίο, για κάθε γεωμετρία αντίστοιχα. Τα νανοσωματίδια της μελέτης ήταν κατασκευασμένα από άργυρο (Ag)^[30]



Σχήμα 3.6: Κατά την ακτινοβόληση διαλύματος μεταλλικών νανοσφαιριδίων, αυτά δίνουν διαφορετικό χρώμα ανάλογα με το μέγεθος και το υλικό τους^[31]

Αυτή η ιδιότητα των μεταλλικών νανοσωματιδίων ήταν γνωστή από παλιότερα στην τεχνοτροπία της υαλογραφίας (βιτρώ). Έβαζαν μικρή ποσότητα σφαιριδίων άργυρου ή χρυσού μέσα στο πυρίτιο, πριν αυτό μετραπαπέ σε γυαλί. Καθώς το φως περνούσε μέσα από το γυαλί με τα νανοσφαιρίδια, συντόνιζε τα πλασμονία επιφανείας και ανάλογα με το μέγεθος αυτών των μεταλλικών νανοσφαιριδίων, έδιναν ένα διαφορετικό χρώμα. Έτσι, τα έντονα χρώματα που έχουν οι υαλογραφίες κυρίως σε ναούς της Δυτικής Ευρώπης, το οφείλουν στο μέταλλο που εμπεριέχει το γυαλί και στο συντονισμό των πλασμονίων από το φως του ήλιου.



[32]

Σχήμα 3.7

Κεφάλαιο 4

Μελέτη του φαινομένου της οπτικής παγίδευσης σε συνδυασμό με την ανάπτυξη πλασματικού πεδίου

Η τοπική ενίσχυση του ηλεκτρικού πεδίου που παρατηρείται κατά την διέγερση των πλασμονίων είναι ικανή να αυξήσει την ένταση των οπτικών δυνάμεων, που αναπτύσσονται πάνω στο παγιδευμένο σωματίδιο. Ωστόσο, το φαινόμενο της διέγερσης επιφανειακών πλασμονίων είναι τοπικό και επηρεάζεται από πολλούς παράγοντες, όπως το μέγεθος του παγιδευόμενου σωματιδίου, το μέγεθος και τη γεωμετρία της μεταλλικής νανοδομής καθώς και από το υλικό που περιβάλλει το δείγμα και τη νανοδομή. Γι'αυτό το λόγο, κρίθηκε αναγκαίο να γίνει μια θεωρητική μελέτη, ώστε να προσδιοριστούν και να κατανοηθούν σε βάθος οι παράγοντες που επηρεάζουν το πρόβλημα της οπτικής παγίδευσης. Πιο συγκεκριμένα, χρειαζόταν να προσδιοριστεί η γεωμετρία καθώς και το μέγεθος της μεταλλικής νανοδομής, ώστε οι οπτικές δυνάμεις να ενισχύονται στο μέγιστο βαθμό λόγω της διέγερσης των επιφανειακών πλασμονίων στην μεταλλική νανοδομή. Η θεωρητική μελέτη έγινε μέσω προσομοιώσεων, χρησιμοποιώντας το πρόγραμμα COMSOL Multiphysics^[34].

4.1 Οπτική δύναμη και ο Τανυστής τάσεων του Maxwell (Maxwell's stress tensor)

Στα μοντέλα των προσομοιώσεων, υπήρχε ένα σωματίδιο με τις ιδιότητες του πολυστυρενίου και θεωρούνταν πάντα παγιδευμένο. Οι οπτικές δυνάμεις υπολογίστηκαν μέσω του τανυστή τάσης του Maxwell (Maxwell's stress tensor). Στην υπολογιστική φυσική αυτή η μέθοδος είναι γνωστή ως μέθοδος MST (Maxwell's Stress Tensor method)^[35]. Με τη βοήθεια του τανυστή τάσης του Maxwell, υπολογίστηκαν οι συνολικές οπτικές δυνάμεις που δημιουργεί το πεδίο, καθώς η δύναμη βαθμίδα και η δύναμη σκέδασης ξεχωριστά. Το λογισμικό προσομοίωσης COMSOL

Multiphysics^[34] παρέχει, μέσω αλγορίθμων, τις αντίστοιχες μαθηματικές σχέσεις του τανυστή του Maxwell ώστε να υπολογίζει την συνολική οπτική δύναμη, καθώς και τις επιμέρους συνιστώσες της δύναμης (δύναμη σκέδασης και δύναμη βαθμίδας). Αρκούσε να δοθεί η κατάλληλη εντολή κάθε φορά, μέσω του προγράμματος προσομοίωσης, που παρέχεται από το εγχειρίδιο του λογισμικού (COMSOL documentation). Ακόμη, το πρόγραμμα μας έδινε τη δυνατότητα να καθορίσουμε τη διεύθυνση του διανύσματος της οπτικής δύναμης, προς τα κάτω (downward) ή προς τα πάνω (upward)^[36,37,38]. Οι οπτικές δυνάμεις υπολογίζονταν ξεχωριστά για κάθε άξονα του καρτεσιανού συστήματος (x,y,z άξονες), ενώ για την εξαγωγή των αποτελεσμάτων, γινόταν κατάλληλη επεξεργασία των υπολογιστικών δεδομένων, μέσω του προγράμματος Origin Pro8.

Είναι γνωστό ότι ο τανυστής του Maxwell (Maxwell's stress tensor) μπορεί να υπολογίσει την συνολική μηχανική δύναμη που επιφέρει ένα ηλεκτρομαγνητικό πεδίο πάνω σε έναν όγκο. Η δύναμη ανά μονάδα όγκου είναι:

$$f = \rho E + J \times B$$

Αντικαθιστώντας τις κατάλληλες εξισώσεις του Maxwell, παίρνουμε την παρακάτω εξίσωση:

$$f = \varepsilon_0(\nabla E)E + \left(\frac{1}{\mu_0}\nabla \times B - \varepsilon_0\frac{\partial E}{\partial t}\right) \times B \quad (1)$$

Από το νόμο του Faraday έχουμε:

$$\frac{\partial B}{\partial t} = -\nabla \times E$$

και επειδή: $\frac{\partial}{\partial \tau}(E \times B) = \left(\frac{\partial E}{\partial \tau} \times B\right) + \left(E \times \frac{\partial B}{\partial \tau}\right)$
συνδυάζοντας τα προκύπτει:

$$\frac{\partial E}{\partial \tau} \times B = \frac{\partial}{\partial \tau}(E \times B) + E \times (\nabla \times E)$$

Αντικαθιστώντας στην (1), έχουμε:

$$f = \varepsilon_0[(\nabla E)E - E \times (\nabla \times E)] - \frac{1}{\mu_0}[B \times (\nabla \times B)] - \varepsilon_0\frac{\partial}{\partial \tau}(E \times B) \quad (2)$$

Για να γίνει αυτή η έκφραση πιο συμμετρική, προσθέτουμε τον όρο $(\nabla B)B$, που είναι ίσος με το μηδέν και γράφουμε στην έκφραση (2) τις παρακάτω ταυτότητες:

$$E \times (\nabla \times E) = \frac{1}{2}\nabla(E^2) - (E\nabla)E \text{ και } B \times (\nabla \times B) = \frac{1}{2}\nabla(B^2) - (B\nabla)B$$

Έτσι, η εξίσωση (2) παίρνει τη μορφή:

$$f = \varepsilon_0[(\nabla E)E + (E\nabla)E] + \frac{1}{\mu_0}[(\nabla B)B + (B\nabla)B] - \frac{1}{2}\nabla(\varepsilon_0 E^2 + \frac{1}{\mu_0} B^2) - \varepsilon_0\frac{\partial}{\partial \tau}(E \times B)$$

Λόγω της περίπλοκης μορφής της εξίσωσης, απλοποιούμε την παραπάνω μορφή, εισάγοντας τον τανυστή τάσης του Maxwell, ο οποίος είναι ως εξής:

$$T_{ij} = \varepsilon_0(E_i E_j - \frac{1}{2}\delta_{ij} E^2) + \frac{1}{\mu_0}(B_i B_j - \frac{1}{2}\delta_{ij} B^2)$$

Τελικά, η συνολική δύναμη που ασκείται σε έναν όγκο V είναι το επιφανειακό ολοκλήρωμα της δύναμης πάνω στον όγκο, άρα:

$$F = \oint \vec{T} da - \epsilon_0 \mu_0 \frac{d}{dt} \int S dt \quad [7]$$

όπου S το δυνάμωμα Poynting

Στην περίπτωση όπου το πρόβλημα είναι ανεξάρτητο του χρόνου, όπως συμβαίνει και στις δικές μας περιπτώσεις μοντελοποίησης, ο δεύτερος όρος μηδενίζεται και έτσι η συνολική ηλεκτρομαγνητική δύναμη που ασκείται σε κάποιον όγκο, μπορεί να εκφραστεί εξ' ολοκλήρου από τον ταυυστή του Maxwell στο σύνορο, το οποίο αποτελεί η επιφάνεια αυτού του όγκου. Ο ταυυστής εκφράζει τη δύναμη ανά μονάδα εμβαδού που ασκείται σε μια στοιχειώδη επιφάνεια, κάτι το οποίο αντιστοιχεί σε πίεση. Πιο συγκεκριμένα, το T_{ij} είναι η δύναμη ανα μονάδα εμβαδού στην κατεύθυνση i που ασκείται σ' ένα στοιχείο επιφάνειας προσανατολισμένης κατά την κατεύθυνση j . Επομένως, οι διαγώνιες συνιστώσες του ταυυστή (T_{xx}, T_{yy}, T_{zz}) αναπαριστούν τις κάθετες τάσεις που ασκούνται στον όγκο και αντιστοιχούν σε πιέσεις, ενώ τα μη διαγώνια στοιχεία ($T_{xy}, T_{xz}, T_{yx}, T_{yz}$ κτλ) αναπαριστούν διατμητικές τάσεις που αντιστοιχούν με τη σειρά τους σε 'τεντώματα' της επιφάνειας^[7].

Αυτή η ανάλυση του ταυυστή του Maxwell υπολογίζει τη συνολική οπτική δύναμη πάνω στο παγιδευμένο σωματίδιο, όταν ολοκληρώσουμε την τάση T σε όλη την επιφάνειά του και η δύναμη που προκύπτει από την ανάλυση, όσον αφορά τις δυνάμεις που υπολογίζονται με τη βοήθεια των προσομοιώσεων, είναι:

$$F = \oint \left\{ \frac{\epsilon}{2} \text{Re}[(En)E^*] - \frac{\epsilon}{4} (EE^*n) + \frac{\mu}{2} \text{Re}[(Hn)H^*] - \frac{\mu}{4} (HH^*)n \right\}$$

Για τον υπολογισμό των δυνάμεων βαθμίδας και σκέδασης, οι οποίες αποτελούν τις συνιστώσες της συνολικής οπτικής δύναμης, αρκεί να υπενθυμίσουμε ότι, για τον θεωρητικό τους υπολογισμό και κάνοντας χρήση του ταυυστή τάσεων του Maxwell, η δύναμη βαθμίδας συσχετίζεται με το ηλεκτρικό πεδίο της δέσμης ενώ η δύναμη σκέδασης με το μαγνητικό. Οι αντίστοιχες σχέσεις για τον υπολογισμό της δύναμης βαθμίδας και της δύναμης σκέδασης είναι:

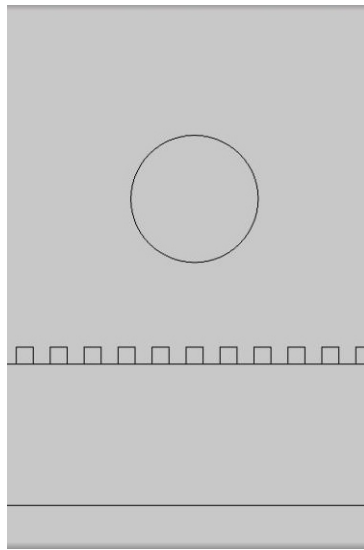
$$F_{grad} = \int \rho(r, t) * E(r, t) dV$$

$$F_{scattering} = \frac{1}{c} \int j(r, t) * H(r, t) dV$$

Το λογισμικό προσομοιώσεων COMSOL Multiphysics^[34] δίνει τη δυνατότητα υπολογισμού της δύναμης της βαθμίδας και της δύναμης σκέδασης ξεχωριστά, ενώ ταυτόχρονα μας παρέχεται η δυνατότητα να υπολογίσουμε και τη συνολική οπτική δύναμη που δέχεται το σωματίδιο. Ο υπολογισμός των τάσεων και των αντίστοιχων δυνάμεων γίνεται μέσω αλγορίθμων ήδη ενσωματωμένων στο λογισμικό, οι οποίοι ενεργοποιούνται με την κατάλληλη εντολή. Εμείς ως χρήστες, απλά εισάγουμε την εντολή και ορίζουμε την επιφάνεια ολοκλήρωσης.

4.2 Δισδιάστατη Μοντελοποίηση Οπτικής Παγίδευσης και Πλασμονικού Πεδίου

Στα αρχικά στάδια των θεωρητικών μελετών, έγινε προσπάθεια προσομοίωσης του προβλήματος σχεδιάζοντας δισδιάστατα μοντέλα με το λογισμικό προσομοιώσεων COMSOL Multiphysics^[34]. Μελετήθηκαν γεωμετρίες μεταλλικών νανοδομών αποτελούμενων από μεταλλικά νανosuρματα (nanowires) τριγωνικής, τετραγωνικής και τραπέζιας διατομής. Το λογισμικό προσομοίωσης, εξαιτίας της δισδιάστατης φύσης του, έδινε την εικόνα της διατομής της μεταλλικής νανοδομής, θεωρώντας πως η άλλη διάσταση του υποστρώματος ήταν πολύ μεγάλη και εκτεινόταν στο άπειρο. Ως προς το μέταλλο της νανοδομής, εξετάστηκαν και μελετήθηκαν δύο διαφορετικά υλικά, ο άργυρος (*Ag*) και ο χρυσός (*Au*), ωστόσο οι περισσότερες προσομοιώσεις έγιναν για το υλικό του αργύρου. Πάνω από τις νανοδομές είχε σχεδιαστεί το σωματίδιο του πολυστυρενίου, ενώ για το υπόστρωμα κάτω από τη μεταλλική νανοδομή σχεδιάσαμε μοντέλα δύο διαφορετικών περιπτώσεων, μοντέλα όπου το υπόστρωμα αποτελούνταν από γυαλί BK7 και μοντέλα όπου υπόστρωμα αποτελούταν από πυρίτιο (*SiO₂* και *Si*). Στα υποστρώματα πυριτίου είναι αδύνατον να υπάρχει μόνο το πυρίτιο (*Si*) αφού κατά την κατασκευή αυτών των υποστρωμάτων, ένα μέρος του υλικού οξειδώνεται όταν έρχεται σε επαφή με το οξυγόνο.



Σχήμα 4.1: Απεικόνιση μοντέλου ορθογώνιων νανosuρμάτων στη δισδιάστατη προσομοίωση

Τα σωματίδια προς παγίδευση είναι σφαίρες πολυστυρενίου, διαμέτρου 900nm, τα οποία βρίσκονται σε ισοτονικό διάλυμα με διαλύτη το καθαρό νερό, και ο δείκτης διάθλασης του ήταν 1.57^[39]. Όσον αφορά τα υλικά, πήραμε υπόψη μας τη διηλεκτρική τους σταθερά, σε συνάρτηση με το δείκτη διάθλασης του κάθε υλικού, όπως δίνει η παρακάτω σχέση:

$$\epsilon_r = (n - ik)^2$$

όπου *n*, *k* το πραγματικό και το φανταστικό μέρος αντίστοιχα του δείκτη διάθλασης

για το κάθε υλικό στην προσομοίωση.

Σε αυτές τις προσομοιώσεις, για τον υπολογισμό των οπτικών δυνάμεων, χρησιμοποιήθηκε ο τανυστής τάσεων του Maxwell (Maxwell's stress tensor) από το οποίο υπολογιζόταν η τάση που ασκούσε η ακτινοβολία πάνω στο σωματίδιο. Η ασκούμενη δύναμη υπολογιζόταν μετά από ολοκλήρωση της τάσης στο σωματίδιο. Σε αυτή την περίπτωση, η ολοκλήρωση γινόταν στη μισή περιφέρεια του σωματιδίου, ενώ στην άλλη μισή θεωρούνταν ότι ασκείται ίση δύναμη με αυτή που υπολογίζαμε. Από το διάγραμμα της συνολικής οπτικής δύναμης κατά μήκος του άξονα z , προσδιορίσαμε τα σημεία ευσταθούς ισορροπίας του σωματιδίου, δηλαδή τα σημεία στα οποία η δύναμη F_z μηδενιζόταν. Είχε γίνει η υπόθεση ότι η πλευρική δύναμη F_r ήταν μηδενική, από τη στιγμή που το σωματίδιο βρισκόταν μέσα στην δέσμη του laser, στην προσομοίωση. Με αυτό τον τρόπο, υπολογίστηκε η θέση και η δύναμη παγίδευσης του σωματιδίου. Όλα τα μοντέλα περικλείονταν από όρια τα οποία έχουν την ιδιότητα να απορροφούν τις ανακλάσεις που προκύπτουν κατά την επίλυση του μοντέλου και είναι ανεπιθύμητα για τους υπολογισμούς μας (Perfectly Matched Layers, PMLs)^[40,41,42]. Ακολουθεί ένας συγκεντρωτικός πίνακας με τις οπτικές δυνάμεις που ασκεί κάθε διαφορετική γεωμετρία της μεταλλικής νανοδομής στο σωματίδιο του πολυστυρενίου.

Νανοςύρματα αργύρου - υπόστρωμα από Si	
Διαστάσεις νανοδομής (nm)	Οπτική δύναμη ($\times 10^{-6} N$)
10x10	-1.26
20x20	-0.40
30x30	0.41
40x40	1.26
50x50	1.94
60x60	2.38
80x80	2.43
90x90	2.27
100x100	2.09

Νανοςύρματα αργύρου - υπόστρωμα από Si			
Κενό (nm)	Οπτική δύναμη ($\times 10^{-6} N$)		
	40ξ40 nm	50ξ50 nm	80ξ80 nm
10	3.18	3.71	2.92
25	1.77	2.82	3.14
60	0.62	1.80	2.74
80	0.35	1.28	2.43
100	0.08	0.85	2.10

Πίνακας 4.1: Συγκεντρωτικός πίνακας των οπτικών δυνάμεων, για μεταλλική νανοδομή τετραγωνικής διατομής

Νανοσύρματα αργύρου		
	υπόστρωμα από <i>Si</i>	υπόστρωμα από γυαλί
Διαστάσεις νανοδομής (nm)	Οπτική δύναμη ($\times 10^{-6} N$)	Οπτική δύναμη ($\times 10^{-6} N$)
20x20	-4.32	7.45
30x30	1.52	10.83
40x40	5.93	13.35
50x50	9.47	15.23
60x60	12.30	16.64
80x80	15.98	18.45
100x100	17.77	19.19
120x120	18.44	19.10
130x130	15.28	17.13

Νανοσύρματα αργύρου - μεταβολή στο ύψος των τριγώνων		
	υπόστρωμα από <i>Si</i>	υπόστρωμα από γυαλί
Ύψος τριγώνων (nm)	Οπτική δύναμη ($\times 10^{-6} N$)	Οπτική δύναμη ($\times 10^{-6} N$)
40	7.68	14.07
60	12.31	16.49
80	14.13	17.70
100	14.15	17.65
110	14.33	17.39
120	18.44	19.10
130	14.41	16.66
140	14.80	16.60
150	15.30	16.82

Νανοσύρματα αργύρου - υπόστρωμα από <i>Si</i>			
	Οπτική δύναμη ($\times 10^{-6} N$)		
Κενό (nm)	40ξ40 nm	50ξ50 nm	120ξ120 nm
0	5.93	9.47	18.44
10	8.87	10.81	14.80
20	6.76	8.77	12.85
30	5.32	7.17	10.56
80	3.010	4.41	8.50

Πίνακας 4.2: Συγκεντρωτικός πίνακας των οπτικών δυνάμεων, για μεταλλική νανοδομή τριγωνικής διατομής

Οι παραπάνω πίνακες περιέχουν δεδομένα από τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων, για τα οποία έχουμε ολοκληρωμένα στοιχεία. Υπήρχαν νανοδομές για τις οποίες το πρόγραμμα COMSOL Multiphysics δεν μπορούσε να υπολογίσει την οπτική δύναμη, εξαιτίας υπολογιστικών περιορισμών.

Παρατηρούμε ότι η τάξη μεγέθους της οπτικής δύναμης, που υπολογίζουν τα παραπάνω διδιάστατα μοντέλα, είναι $\times 10^{-6} N$. Αυτή η τάξη είναι πολύ μεγάλη για οπτικές δυνάμεις, αφού από προηγούμενες μελέτες περιμέναμε να υπολογίσουμε δυνάμεις της τάξης των pN ($\times 10^{-12} N$). Αυτή η διαφορά στην τάξη μεγέθους της μετρούμενης οπτικής δύναμης, οφείλεται στο γεγονός ότι στα διδιάστατα μοντέλα δώσαμε την αναλυτική μορφή των εξισώσεων του ταυστή του Maxwell, χωρίς να χρησιμοποιήσουμε την εντολή που παρέχει το πρόγραμμα COMSOL Multiphysics για την πίεση ακτινοβολίας. Αυτό είχε σαν αποτέλεσμα η τιμή της συνολικής οπτικής δύναμης να υπερεκτιμάται και οι μονάδες να είναι αυθαίρετες.

Επιπλέον, με βάση τις υποθέσεις και τις προσεγγίσεις που πήραμε σε αυτές τις μοντελοποιήσεις, παρατηρήθηκε ότι υπήρχαν πολλαπλά σημεία παγίδευσης του σωματιδίου, τα οποία απείχαν μεταξύ τους 400nm. Κάτι τέτοιο μπορεί να δικαιολογηθεί μέσω της περιοδικότητας της μεταλλικής νανοδομής. Ο υπολογισμός των δυνάμεων γίνεται μέσω του ανακλώμενου από τη νανοδομή πεδίο, ώστε να μετρηθεί η ενίσχυση του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου λόγω διέγερσης πλασμονίων. Η περιοδικότητα της νανοδομής λειτουργεί σαν ένα είδος σχάρας (grating) όπου το φως ανακλάται στα διάφορα νανοσύρματα και συμβάλλει σε διάφορα σημεία, ενισχύοντας το πεδίο σε αυτά τα σημεία.

Τέλος, για κάποια συγκεκριμένα υποστρώματα, παρατηρήθηκε ότι καθώς απομακρυνόμαστε από τη μεταλλική νανοδομή, η συνολική δύναμη πάνω στο πολυστυρένιο αυξανόταν. Αυτό σημαίνει ότι η ενίσχυση του πεδίου, λόγω διέγερσης πλασμονίων δεν ήταν ικανοποιητική με το συγκεκριμένο σωματίδιο, εξαιτίας της μεγάλης διαμέτρου του σε σχέση με τις διαστάσεις των νανοσυρμάτων της νανοδομής. Το κοινό γνώρισμα των νανοδομών για τις οποίες παρατηρήθηκε αυτό το φαινόμενο ήταν ότι έδιναν την ελάχιστη ενίσχυση του πεδίου, για μικρή απόσταση μεταξύ του κατώτατου σημείου του σωματιδίου και του ανώτερου σημείου της νανοδομής.

4.3 Τρισδιάστατη Μοντελοποίηση του προβλήματος και Παράμετροι Προσομοίωσης

Στις προσομοιώσεις έγινε προσπάθεια να μιμηθούμε το πείραμα οπτικής παγίδευσης, με αποτέλεσμα όλες οι παράμετροι είναι οι ίδιες με εκείνες του πειράματος. Επομένως, τα σωματίδια προς παγίδευση είναι σφαίρες πολυστυρενίου, διαμέτρου 900nm και με δείκτη διάθλασης $n = 1.5712$,^[43] τα οποία βρίσκονται σε ισοτονικό διάλυμα με διαλυτή το καθαρό νερό. Η μεταλλική νανοδομή βρίσκεται πάνω σε ένα υπόστρωμα από γυαλί BK7 με δείκτη διάθλασης $n = 1.505$,^[39] ενώ όλες οι δομές που μελετήθηκαν ήταν περιοδικές και απείχαν μεταξύ τους συγκεκριμένη απόσταση μερικών νανομέτρων (50nm - 100nm). Η απόσταση μεταξύ των νανοσωμάτων της μεταλλικής νανοδομής ήταν αναγκαία ώστε σε περίπτωση που κάποια από αυτές τις δομές κατασκευαστεί και χρησιμοποιηθεί για την πειραματική επιβεβαίωση των προσομοιώσεων, να χρησιμοποιηθεί φωτισμός διέλευσης για την απεικόνιση του δείγματος στο μικροσκόπιο. Ο φωτισμός διέλευσης, σε αντίθεση με το φωτισμό ανάκλασης, μειώνει σε μεγάλο βαθμό σφάλματα κατά τη διάρκεια της μέτρησης, τα οποία οφείλονται σε ανακλάσεις του φωτισμού πάνω στο υπόστρωμα της νανοδομής. Για την επίλυση των μοντελοποιήσεων, έγινε μελέτη με βάση το ΡΦ μοδουλε (Ραδιο Φρεχενςψ μοδουλε)^[42], αφού η πλειοψηφία των προσομοιώσεων στο λογισμικό ΉΟΜΣΟΛ Μυλτιπηψις, που μελετούν την επίδραση των πλασμονίων, γίνεται με βάση αυτό το μοντέλο, το οποίο δεν έχει μεγάλες διαφορές σε σχέση με το Ωαε Οπτις μοδουλε.^[44]

Αρχικά, για κάθε διαφορετική γεωμετρία της νανοδομής, μελετήθηκε το μέγεθος εκείνο που επιφέρει την μεγαλύτερη συνολική δύναμη πάνω στο παγιδευμένο σωματίδιο. Επειδή το φαινόμενο των πλασμονίων επιφάνειας είναι τοπικό, το σωματίδιο

τοποθετούταν πολύ κοντά στην νανοδομή, έτσι ώστε το κατώτερο σημείο της περιφέρειάς του να απέχει 10nm - 20nm από το ανώτατο σημείο της μεταλλικής δομής. Έπειτα, για το μέγεθος της δομής που επιφέρει την μέγιστη οπτική δύναμη, γινόταν προσομοίωση της εμβέλειας των πλασμονίων επιφανείας. Το παγιδευμένο σωματίδιο απομακρυνόταν από τη νανοδομή, κατά μήκος του κατακόρυφου άξονα z, και σε κάθε σημείο υπολογίζαμε την συνολική οπτική δύναμη που δεχόταν το σωματίδιο (πολυστυρένιο). Έγιναν επιπλέον μοντελοποιήσεις με σκοπό να μετρηθούν οι οπτικές δυνάμεις όπως μετρώνται και στο εργαστήριο. Σε αυτές τις μοντελοποιήσεις, το παγιδευμένο σωματίδιο του πολυστυρενίου απομακρυνόταν κατά μήκος του άξονα x και σε κάθε σημείο υπολογίζονταν και πάλι οι οπτικές δυνάμεις. Στις προσομοιώσεις υπολογιζόταν η συνολική δύναμη που ασκούσε η δέσμη του laser πάνω στο σωματίδιο του πολυστυρενίου, αλλά σε μερικές νανοδομές, έγιναν επιπλέον υπολογισμοί, για τον προσδιορισμό της δύναμης σκέδασης και της δύναμης βαθμίδας, τις συνιστώσες της συνολικής οπτικής δύναμης.

Η απόκριση του μετάλλου σε σχέση με την προσπίπτουσα ακτινοβολία παίζει πολύ σημαντικό ρόλο για τη διέγερση των πλασμονίων και γι' αυτό χρειαζόταν να εισαχθεί στις μοντελοποιήσεις ένα μοντέλο υπολογισμού της απόκρισης του μεταλλικού υλικού της νανοδομής, σε σχέση με τις ιδιότητες της ακτινοβολίας laser.^[45] Το μοντέλο διασποράς του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου που χρησιμοποιήθηκε ήταν το μοντέλο Drude, το οποίο υπολογίζει τη διηλεκτρική συνάρτηση του μετάλλου σε συνάρτηση με τη συχνότητα διέγερσης, ενώ λαμβάνει υπόψη του και τη συχνότητα ταλάντωσης του πλάσματος. Η εξίσωση του μοντέλου Drude είναι:

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

όπου ω_p η συχνότητα ταλάντωσης του πλάσματος, γ ο συντελεστής εξασθένησης του πεδίου, ω η συχνότητα της ακτινοβολίας.

Υπάρχουν νεότερα μοντέλα από αυτό του Drude, όπως είναι το μοντέλο Drude-Lorentz, όπου έχουν εισαχθεί διορθωτικοί όροι με σκοπό την προσέγγιση της πραγματικής μορφής της οπτικής απόκρισης των μετάλλων. Παρόλα αυτά, έχει παρατηρηθεί ότι τα αποτελέσματα από το μοντέλο Drude-Lorentz δεν είναι σε απόλυτη συμφωνία με αντίστοιχες πειραματικές μετρήσεις, ακόμα και όταν έχουν εισαχθεί 5 διορθωτικοί όροι.^[24,46,47] Επιπλέον, το μοντέλο Drude-Lorentz δεν είναι κατάλληλο στην περίπτωση νανοδομών με έντονες κορυφές, όπως οι κώνοι και οι πυλώνες που θέλαμε να προσομοιώσουμε.^[24] Επιπλέον, το μέγεθος των μεταλλικών νανοσωματιδίων από τα οποία αποτελούταν η νανοδομή, ήταν μεγαλύτερο των 10nm. Επειδή το μήκος ελεύθερης διαδρομής για τα ηλεκτρόνια είναι περίπου 10nm σε θερμοκρασία δωματίου, θέλαμε να είμαστε σίγουροι ότι κατά την ταλάντωση του ηλεκτρονιακού νέφους από τη δέσμη του laser, τα ηλεκτρόνια θα ταλαντώνονται μέσα στον όγκο του υλικού, χωρίς να ξεφύγουν από αυτόν. Για αυτό τόσο η ακτίνα όσο και το ύψος των μεταλλικών νανοδομών της μελέτης ήταν μεγαλύτερα των 10nm.

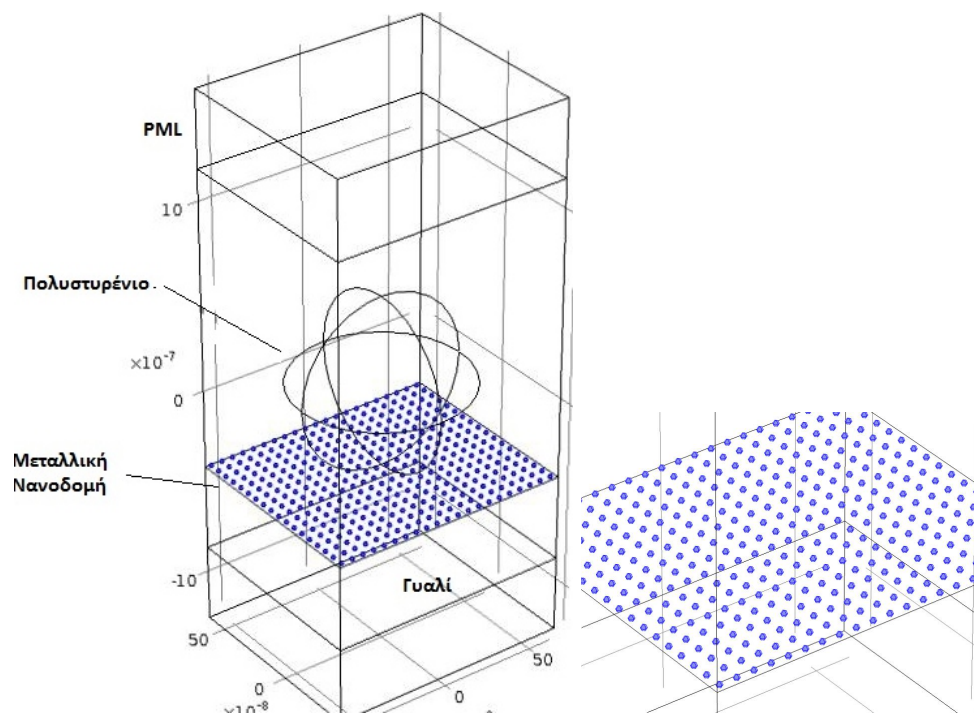
Οι γεωμετρίες που μελετήθηκαν ήταν σφαίρες, κώνοι, πυλώνες και λεπτά, μεταλλικά σύρματα ορθογώνιας διατομής, ενώ το υλικό τους ήταν χρυσός. Επιπλέον,

προσομοιώθηκαν σφαιρικοί φλοιοί γεμάτοι με γυαλί, το οποίο έπαιζε το ρόλο του διηλεκτρικού.

4.4 Επιβεβαίωση Προηγούμενων Πειραματικών Μετρήσεων

Σε αυτή τη διπλωματική εργασία, έγινε μια προσπάθεια επιβεβαίωσης κάποιων πειραματικών αποτελεσμάτων μιας προηγούμενης μεταπτυχιακής εργασίας^[48], χρησιμοποιώντας τρισδιάστατα μοντέλα προσομοίωσης. Το πρόγραμμα προσομοίωσης ήταν το COMSOL Multiphysics.

Το μοντέλο που κατασκευάστηκε για την προσομοίωση απεικονίζεται παρακάτω. Το υπόστρωμα που είχε κατασκευαστεί και μετρήθηκε πειραματικά αποτελούνταν από σφαίρες αργύρου διαμέτρου 10-20nm, οι οποίες κάλυπταν την επιφάνεια υποστρώματος από γυαλί. Είχε χρησιμοποιηθεί δέσμη laser Nd:YAG στα 1064nm (περιοχή κοντινού υπέρυθρου), ενώ το σωματίδιο προς παγίδευση ήταν πολυστυρένιο, διαμέτρου 900nm μέσα σε υδάτινο περιβάλλον. Το μοντέλο κατασκευάστηκε με ακριβώς αυτά τα χαρακτηριστικά, με τη μόνη διαφορά ότι οι σφαίρες είχαν σταθερή διάμετρο 20nm και απείχαν συγκεκριμένη απόσταση μεταξύ τους, ίση με 40nm. Αυτό έγινε ώστε να μπορέσει να λειτουργήσει η προσομοίωση και ο υπολογιστικός χρόνος να βρίσκεται μέσα στα επιθυμητά πλαίσια.



Σχήμα 4.2: Απεικόνιση μοντέλου για την επιβεβαίωση πειραματικών αποτελεσμάτων

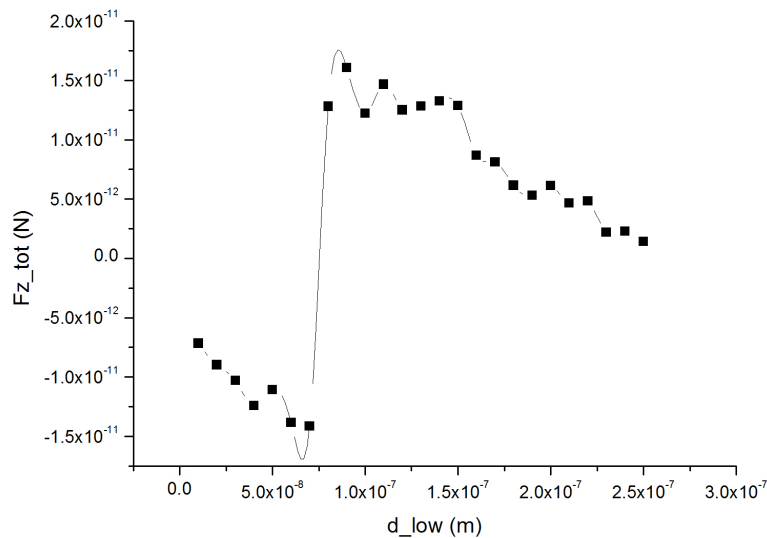
Στο πείραμα είχε μετρηθεί η οπτική δύναμη που ασκείται πάνω στο σωματίδιου του πολυστυρενίου με τη μέθοδο της διαφυγής. Σύμφωνα με αυτή τη μέθοδο, αρχικά το σωματίδιο παγιδεύεται και ύστερα, μετατοπίζοντας κατάλληλα το δείγμα, μετράται

πειραματικά η ταχύτητα (v_{esc}) με την οποία αποδρά από την παγίδα. Η οπτική δύναμη που επιδρούσε πάνω στο σωματίδιο κατά την παγίδευσή του, υπολογίζεται σύμφωνα με τη σχέση:

$$F = K \cdot 6\pi r \eta v_{esc}$$

όπου r είναι η ακτίνα του παγιδευμένου σωματιδίου, η το ιξώδες του περιβάλλοντος, v_{esc} η ταχύτητα διαφυγής και $K \approx 1.33^{[48]}$ ένας διορθωτικός παράγοντας. Για τη συγκεκριμένη νανοδομή, η πειραματική τιμή της οπτικής δύναμης είχε υπολογιστεί ότι είναι $F = 7.48 \times 10^{-13} N$.

Κατά την προσομοίωση, μεταβάλλαμε την απόσταση μεταξύ κατώτατου σημείου περιφέρειας του σωματιδίου και ανώτατου σημείου νανοδομής (d_{low}) ξεκινώντας με την απόσταση 10nm και φτάνοντας μέχρι και τα 250nm, με βήμα 20nm. Σκοπός ήταν να υπολογίσουμε και θεωρητικά την οπτική δύναμη πάνω στο σωματίδιο, ενώ παράλληλα είχαμε την ικανότητα να παρατηρήσουμε την εμβέλεια του αναπτυσσόμενου πλασματικού πεδίου, για τα συγκεκριμένα χαρακτηριστικά του πειράματος. Ακολουθούν τα αποτελέσματα της προσομοίωσης.

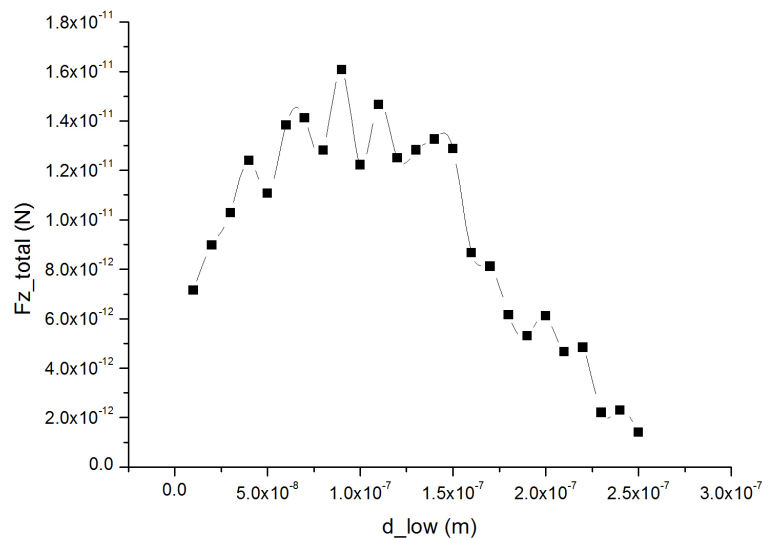


Σχήμα 4.3: Απεικόνιση της κατακόρυφης οπτικής δύναμης F_z σε συνάρτηση με τη απόσταση του σωματιδίου από τη νανοδομή (d_{low})

Στο διάγραμμα 4.3, απεικονίζεται η κατακόρυφη συνιστώσα της οπτικής δύναμης που ασκείται στο σωματίδιο σε συνάρτηση με την απόστασή του από τη νανοδομή (d_{low}). Αυτή η απόσταση είναι μεταξύ του κατώτατου σημείου της περιφέρειας του σωματιδίου και του ανώτατου σημείου της δομής πάνω στο υπόστρωμα. Η μέγιστη δύναμη, σύμφωνα με την προσομοίωση, είναι εκείνη που ασκείται στο σωματίδιο όταν η απόσταση του από τη μεταλλική νανοδομή είναι 80nm, και είναι ίση με $F_{z-total} = 1.61 \times 10^{-11} N$. Αρχικά, για τα πρώτα 70nm, η δύναμη παίρνει αρνητικές τιμές και αυξάνεται κατά απόλυτη τιμή, ενώ μετά το μέγιστο στα 80nm, αρχίζει να μειώνεται αποκτώντας θετικές τιμές. Καθώς το σωματίδιο βρίσκεται μέσα στη δέσμη laser, υποθέτουμε ότι δεν μετακινείται κατά τους άξονες x και y , οι συνιστώσες F_x και F_y

επιδρούν έτσι ώστε να το σταθεροποιούν στο x-y επίπεδο και γι' αυτό εξετάζουμε μόνο τη συνιστώσα F_z .

Όσο περισσότερο απομακρύνεται το σωματίδιο από τη μεταλλική νανοδομή, η οπτική δύναμη μειώνεται καθώς η ενίσχυση του πεδίου τοπικά, λόγω διέγερσης πλασμονίων, εξασθενεί. Πιο συγκεκριμένα, παρατηρούμε μια μικρή καμπύλη όταν η ποσότητα d_{low} είναι στα 50nm. Φαίνεται ότι για απόσταση μεταξύ 10nm-40nm, η οπτική δύναμη συνεχίζει να αυξάνεται ενώ παρατηρείται πτώση στα 50nm. Είναι πιθανό μια τέτοια διακύμανση να οφείλεται σε υπολογιστικό σφάλμα, αφού είναι πολύ μικρή, ωστόσο δεδομένου ότι οι μεταλλικές σφαίρες που αποτελούν τη νανοδομή είναι πολύ μικρές, το παγιδευμένο σωματίδιο πολύ μεγάλο και το μήκος κύματος του laser όχι ιδανικό για διέγερση πλασμονικού πεδίου σε μεταλλικές σφαίρες, θα μπορούσαμε να αποδώσουμε αυτή τη διακύμανση στην εξασθένιση του πλασμονικού πεδίου.

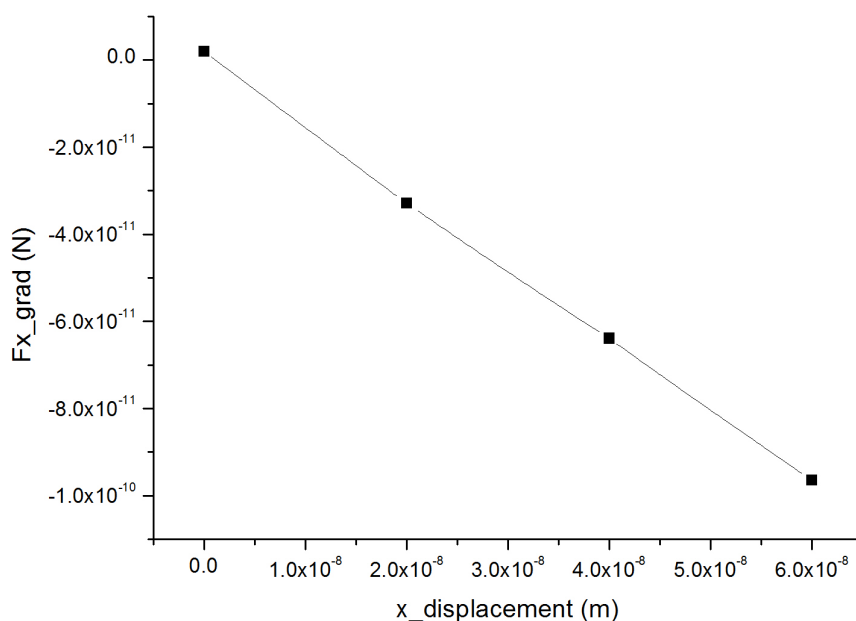


Σχήμα 4.4: Απόλυτη τιμή της κατακόρυφης οπτικής δύναμης F_z σε συνάρτηση με την ποσότητα d_{low}

Στη συνέχεια, θελήσαμε να προσδιορίσουμε την ακαμψία (stiffness) της οπτικής παγίδευσης. Είναι γνωστό, ότι η δύναμη βαθμίδας που ασκείται πάνω στο παγιδευμένο σωματίδιο καθώς απομακρύνεται από το σημείο παγίδευσής του, έχει τη μορφή της δύναμης επαναφοράς, όπως συμβαίνει σε ένα σύστημα απλού αρμονικού ταλαντωτή^[1,9]. Η σχέση που εκφράζει αυτή τη δύναμη είναι:

$$F = -kx$$

όπου F εκφράζει τη δύναμη, x τη μετατόπιση ως προς έναν άξονα και k την ακαμψία της οπτικής παγίδευσης. Το παγιδευμένο σωματίδιο, σε αυτές τις προσομοιώσεις, μετατοπιζόταν κατά μήκος του άξονα x , όπως γίνεται και στο πείραμα κατά τη μέτρηση της οπτικής δύναμης με τη μέθοδο της διαφυγής. Για μικρές αποστάσεις μακριά από την εστία της δέσμης και για στις οποίες το σωματίδιο βρίσκεται ακόμα υπό την επίδραση της ακτινοβολίας laser, η δύναμη βαθμίδας θα προσπαθεί να επαναφέρει

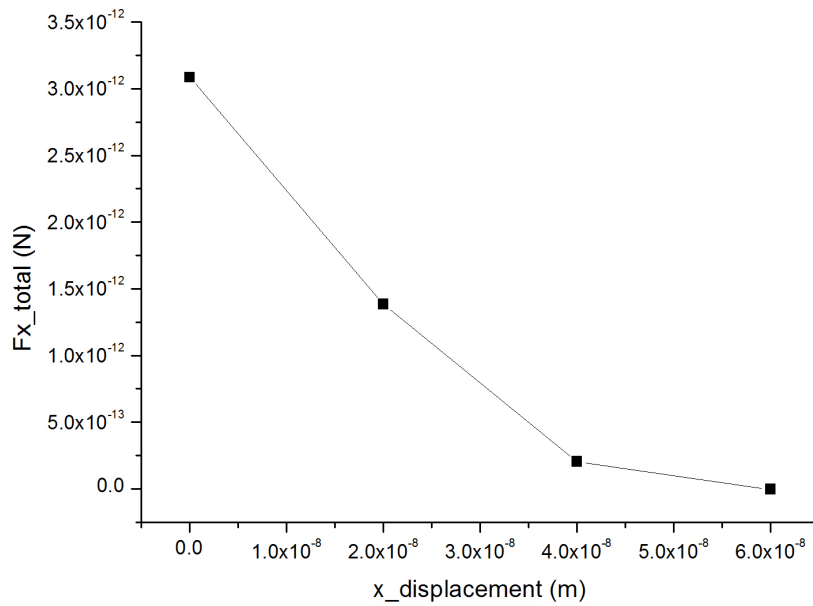


Σχήμα 4.5: Διάγραμμα της συνιστώσας F_{x-grad} για μικρές αποστάσεις μακριά από την εστία της δέσμης.

το σωματίδιο στο σημείο παγίδευσής του. Η εξάρτηση της δύναμης βαθμίδας από την απόσταση του σωματιδίου από την εστία της δέσμης έχει τη μορφή δύναμης επαναφοράς και είναι γραμμική, όπως φαίνεται και από το ακόλουθο διάγραμμα.

Υπολογίζοντας την κλίση της ευθείας, βρίσκουμε ότι $k = (-1.63 \pm 0.027) \times 10^{-3} N/m$. Η ακαμψία της οπτικής παγίδευσης αποτελεί ένα μέτρο σύγκρισης για την ισχύ των οπτικών δυνάμεων και το πόσο ισχυρά συγκρατούνται τα σωματίδια από την παγίδα που δημιουργεί η δέσμη του laser.

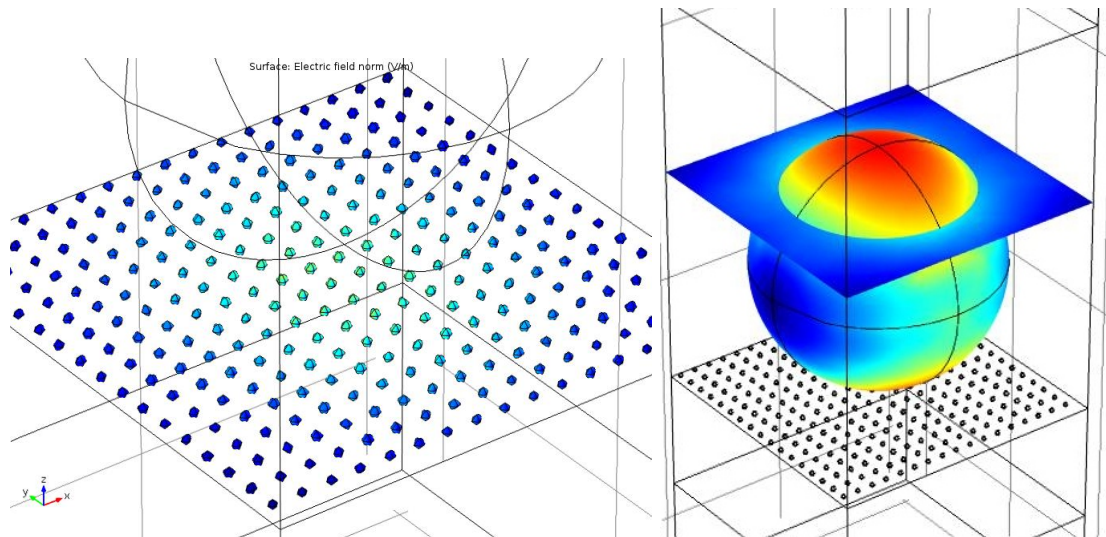
Ακολουθεί το διάγραμμα της συνιστώσας F_x της συνολικής οπτικής δύναμης, για το μοντέλο που εξετάζουμε. Σε αυτό το σημείο θέλαμε να υπολογίσουμε την οπτική δύναμη όπως μετράται στο εργαστήριο με τη μέθοδο της διαφυγής. Κατά την πειραματική μέτρηση των δυνάμεων που ασκούνται στο πολυστυρένιο, επιδρούν πάνω τόσο η δύναμη σκέδασης όσο και η δύναμη βαθμίδας. Γι' αυτό το λόγο, για τον υπολογισμό της τιμής της οπτικής δύναμης μέσω των προσομοιώσεων, αρχικά μετατοπίσαμε το σωματίδιο κατά τον άξονα x και για μικρές μετατοπίσεις, μετρήσαμε τη συνολική δύναμη κατ' αυτόν τον άξονα.



Σχήμα 4.6: Μετατόπιση του σωματιδίου κατά τον άξονα x

Έτσι, έγινε μεταβολή της θέσης του πολυστυρενίου κατά τον άξονα x, ως προς τον κεντρικό άξονα της δέσμης του laser, με μικρή μεταβολή 20nm. Σε αυτό το σημείο, όταν δηλαδή η απόσταση μεταξύ σωματιδίου-νανοδομής είναι 75nm, η διαφορά της οπτικής δύναμης F_x μεταξύ των θέσεων 0nm (κέντρο οπτικού άξονα) και 20nm (μικρή μετατόπιση μακριά από τον οπτικό άξονα), υπολογίζεται να είναι ίση με $F_x = 6.6 \times 10^{-13} N$, το οποίο είναι σε πολύ καλή συμφωνία με την πειραματική τιμή της μέτρησης της οπτικής δύναμης, με το ποσοστό διαφοράς μεταξύ θεωρητικής και πειραματικής τιμής να είναι 13.33%.

Σε όλες τις προσομοιώσεις για την θεωρητική επιβεβαίωση των προηγούμενων πειραματικών μετρήσεων, υπολογίστηκαν οι συνολικές οπτικές δυνάμεις. Ειδικά όσον αφορά την F_x συνιστώσα της δύναμης, κατά την πειραματική μέτρηση, όταν απομακρύνουμε το σωματίδιο από το σημείο παγίδευσής του, η δύναμη που επιδρά πάνω του δεν είναι μόνο η δύναμη βαθμίδας F_{grad} αλλά και η δύναμη σκέδασης $F_{scattering}$, λόγω του πεδίου της δέσμης του laser. Το πρόγραμμα COMSOL Multiphysics δίνει τη δυνατότητα υπολογισμού των οπτικών δυνάμεων τόσο ξεχωριστά όσο και συνολικά.



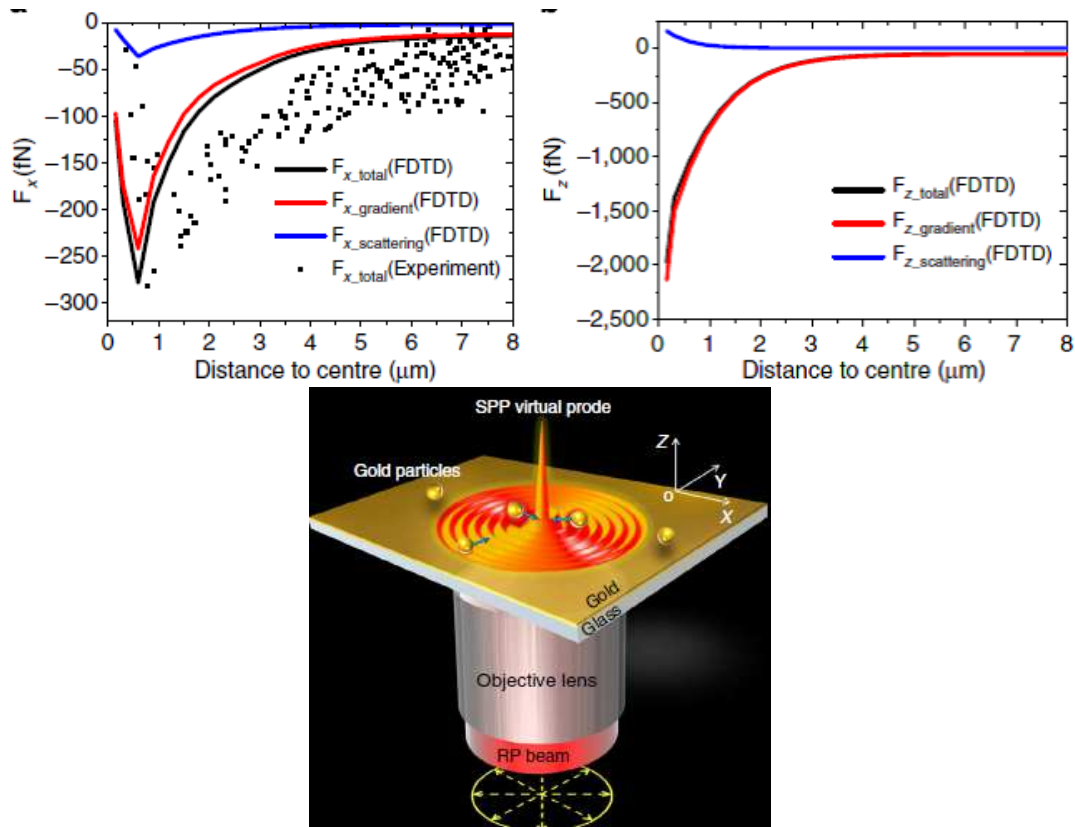
Σχήμα 4.7: Κατανομή ηλεκτρομαγνητικού πεδίου πάνω στη μεταλλική νανοδομή (αριστερά) και στο σωματίδιο του πολυστυρενίου (δεξιά), όταν $d_{low}=75\text{nm}$

Στις εικόνες κατανομής του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου, παρατηρούμε ότι υπάρχει ενίσχυση του πεδίου σε μια περιοχή κάτω από το πολυστυρένιο και όχι σε όλη την έκταση της μεταλλικής νανοδομής. Αυτό συμβαίνει λόγω της υπολογιστικής προσέγγισης επίλυσης του προβλήματος, αφού η δέσμη δεν προσπίπτει πάνω σε όλη τη νανοδομή, αλλά μόνο σε μια περιοχή γύρω από το σωματίδιο. Επιπλέον, παρατηρούμε την ενίσχυση του πεδίου στο κάτω μέρος της νανοδομής λόγω της διέγερσης του πλασμονικού πεδίου, καθώς και στην κορυφή του, εξαιτίας του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου της δέσμης.

4.5 Επιβεβαίωση υπολογιστικών μελετών άλλων ερευνητικών ομάδων

Στην προσπάθειά μας να κατανοήσουμε το πρόβλημα οπτική παγίδευση-πλασμόνια, μελετήθηκαν τα αποτελέσματα άλλων ερευνητικών ομάδων, τόσο τα υπολογιστικά συμπεράσματα προσομοιώσεων όσο και τα πειραματικά αποτελέσματα. Έτσι μοντελοποιήσαμε κι εμείς το δικό τους πρόβλημα, ώστε να κατανοήσουμε το πρόβλημα βαθύτερα και να εφαρμόσουμε ανάλογες τεχνικές στο δικό μας πρόβλημα. Η ομάδα Min *et al.*^[49] μελέτησε την επίδραση του πλασμονικού πεδίου ενός λεπτού υποστρώματος χρυσού, πάχους 45nm, κατά την παγίδευση χρυσών σφαιρών διαμέτρου 500-2200nm. Χρησιμοποίησαν μια γκαουσιανή δέσμη laser Nd:YAG στα 1064nm, ισχύς 100 mW, με τη δέσμη να έχει κατεύθυνση από κάτω προς τα πάνω. Οι μεταλλικές σφαίρες χρυσού βρίσκονταν σε υδατινό περιβάλλον. Αυτή η ομάδα έκανε προσομοιώσεις χρησιμοποιώντας την υπολογιστική μέθοδο FDTD (finite-difference time-domain), ενώ επιβεβαίωσε και πειραματικά τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων. Οι οπτικές δυνάμεις υπολογίστηκαν χρησιμοποιώντας τον τανυστή τάσης του Maxwell (Maxwell's stress tensor). Κατά την προσομοίωση τους, το κατώτατο σημείο του σωματιδίου βρισκόταν 50nm πάνω από το μεταλλικό φιλμ, αφού σύμφωνα με τις παρατηρήσεις

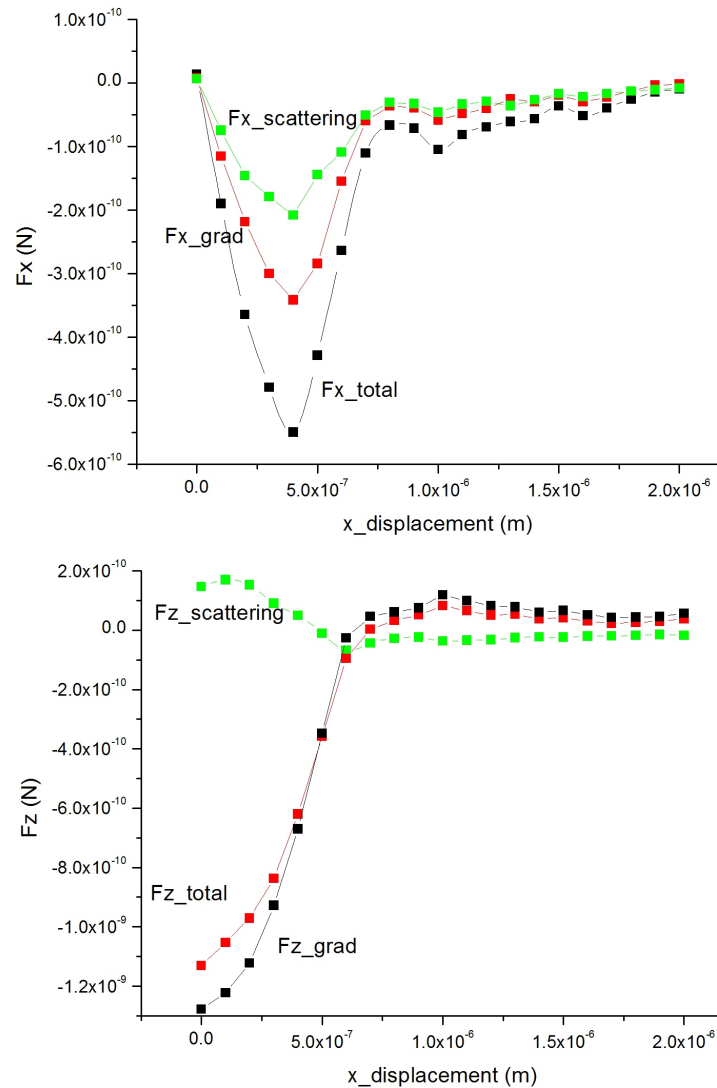
της ομάδας, δεν μπορούσαν να προσδιορίσουν πειραματικά το ύψος παγίδευσης και για τις προσομοιώσεις χρησιμοποίησαν το μήκος Debye, το μήκος για το οποίο οι ηλεκτρομαγνητικές αλληλεπιδράσεις μπορούν να υφίστανται. Η μετατόπιση του σωματιδίου έγινε κατά τον άξονα x, από το σημείο όπου έχουμε την δημιουργία μιας έντονης κορυφής λόγω των πλασμονίων, μέχρι σε μια απόσταση αρκετά μακριά από το κέντρο αυτής της κορυφής.



Σχήμα 4.8: Πάνω: Οι οπτικές δυνάμεις κατά του άξονες x και z αντίστοιχα. Στο διάγραμμα πάνω αριστερά απεικονίζονται και τα πειραματικά αποτελέσματα. Κάτω: Σχηματική αναπαράσταση του προβλήματος^[49]. Η δέσμη laser έχει κατεύθυνση από κάτω προς τα πάνω, ενώ τα κύματα και η έντονη κορυφή που απεικονίζονται στη μεταλλική επιφάνεια, αποτελούν καλλιτεχνική αναπαράσταση των πλασμονίων επιφανείας που αναπτύσσονται λόγω της πρόσπτωσης της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας.

Εμείς προσπαθήσαμε να μοντελοποιήσουμε το παραπάνω πρόβλημα της ομάδας Min *et al.*^[49], χρησιμοποιώντας τις δικές τους παραμέτρους, στο πρόγραμμα COM-SOL Multiphysics. Ο υπολογισμός των οπτικών δυνάμεων έγινε με εφαρμογή του ταυστή τάσεων του Maxwell.

Τα αποτελέσματα της μοντελοποίησης παρουσιάζονται στη συνέχεια.



Σχήμα 4.9: Αποτελέσματα του προβλήματος των Min *et al.* Πάνω: Απεικόνιση της συνολικής δύναμης F_x και των δυνάμεων σκέδασης και βαθμίδας κατά τον άξονα x. Κάτω: Απεικόνιση της συνολικής δύναμης F_z και των δυνάμεων σκέδασης και βαθμίδας κατά τον άξονα z.

Παρατηρούμε ότι τα αποτελέσματα που δίνει η δική μας προσομοίωση στο COM-SOL Multiphysics^[34] είναι πολύ κοντά στα αποτελέσματα της ομάδας των Min *et al.*^[49] Η κύρια διαφορά είναι η αυξημένες τιμές των δυνάμεων που παίρνουμε από τα δικά μας μοντέλα, σε σχέση με εκείνες που υπολόγισαν οι Min *et al.*^[49] Είναι κάτι το οποίο οφείλεται σε υπολογιστικά σφάλματα και σε απλοποιήσεις του προβλήματος, αλλά και στην απόκριση του μετάλλου καθώς αυτό αλληλεπιδρά με το προσπίπτον ηλεκτρομαγνητικό κύμα. Όσον αφορά τη διέγερση πλασμονίων, χρειάζεται να γνωρίζουμε τη κατανομή των ηλεκτρονίων σθένους, καθώς σε αυτά βασίζεται η δημιουργία του πλασμονικού πεδίου. Αυτό μπορεί να υπολογιστεί εισάγοντας στην προσομοίωση μοντέλα υπολογισμού της μετατόπισης του πεδίου στις μεταλλικές επιφάνειες. Στη δημοσίευση της παραπάνω μελέτης, δεν γίνεται λόγος για το μέταλλο και εάν η μοντελοποίηση λάμβανε υπόψη της τη μεταβολή του πεδίου πάνω στη μεταλλική επιφάνεια και γενικότερα δεν γίνεται λόγος για τις ιδιότητες του υλικού των

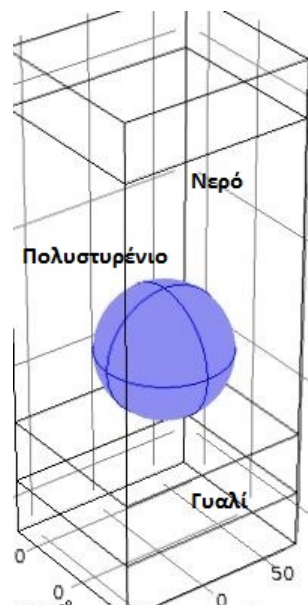
μεταλλικών επιφανειών. Ωστόσο, όταν το πρόβλημα προσομοιώθηκε από εμάς στο χρυσό, από τον οποίο αποτελείται η επιφάνεια του υποστρώματος καθώς και το σωματίδιο προς παγίδευση, χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο Drude, ώστε ο υπολογισμός του πεδίου να περιλαμβάνει και τις ιδιότητες του υλικού (κατανομή ηλεκτρονίων σθένους, συχνότητα πλάσματος κ.α).

Όσον αφορά τις δικές μας προσομοιώσεις, η μετατόπιση του σωματιδίου έγινε μέχρι τα πρώτα 2 μm , αφού για μετατοπίσεις μεγαλύτερων αποστάσεων, η προσομοίωση απαιτούσε πολύ μεγάλο υπολογιστικό χρόνο, καθιστώντας την αδύνατη. Παρόλα αυτά, μπορούμε να εξάγουμε ένα ποιοτικό αποτέλεσμα σχετικά με τα συγκεκριμένα χαρακτηριστικά του προβλήματος και να επιβεβαιώσουμε και με τη χρήση του προγράμματος COMSOL Multiphysics^[34] τα υπολογιστικά και πειραματικά συμπεράσματα της ομάδας. Ταυτόχρονα, υπάρχει η βεβαιότητα ότι με τη χρήση του ταχυστή τάσεων του Maxwell και με τη συγκεκριμένη διεύθυνση του διανύσματος της οπτικής δύναμης, φαίνεται να δίνουν αξιόπιστα αποτέλεσμα, συγκριτικά με εκείνα της ομάδας των Min *et al.*^[49]

4.6 Αποτελέσματα Τρισδιάστατων Προσομοιώσεων και Παρατηρήσεις

Παρακάτω παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των διάφορων μεταλλικών νανοδομών της τρισδιάστατης μοντελοποίησης που έγινε με το λογισμικό COMSOL Multiphysics.

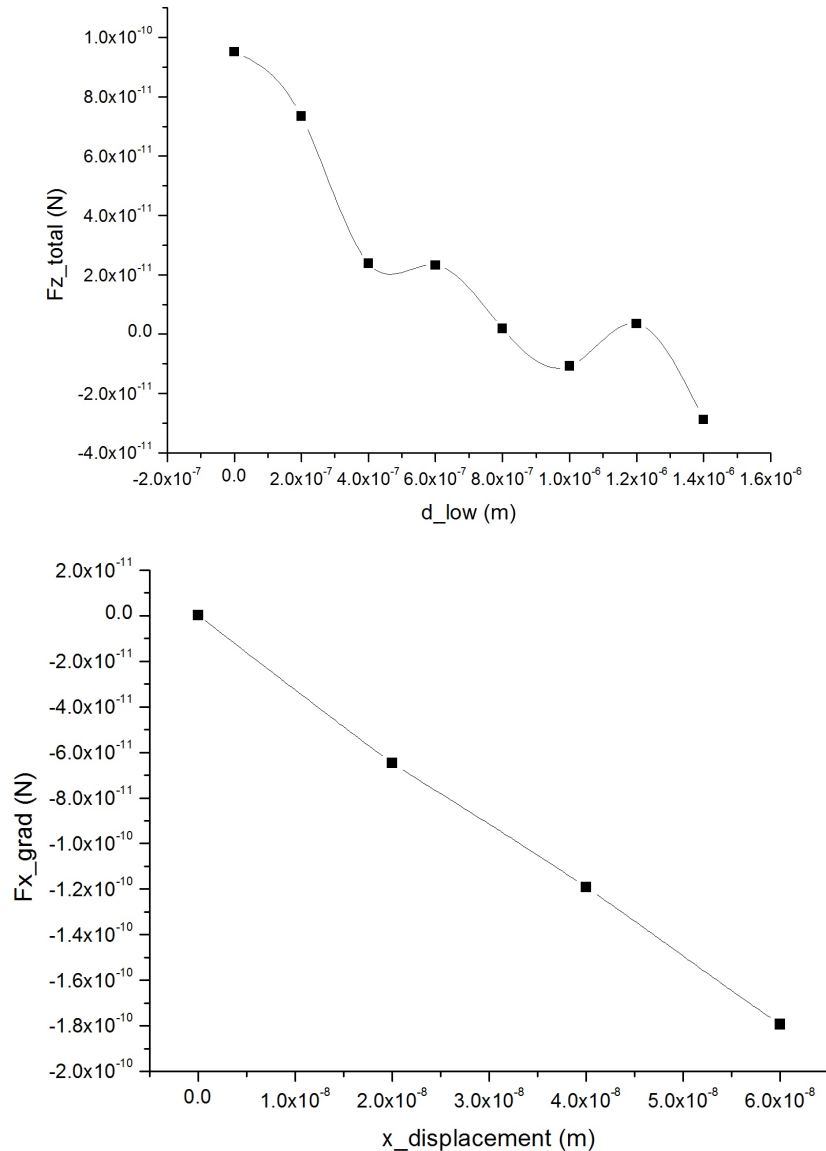
4.6.1 Προσομοίωση υποστρώματος χωρίς μεταλλική νανοδομή



Σχήμα 4.10: Απεικόνιση μοντέλου

Η διάμετρος του πολυστυρενίου ήταν 900nm, ο δείκτης διάθλασης του υλικού ήταν

1.57^[26] και βρισκόταν σε περιβάλλον με νερό. Κάτω από την περιοχή του δείγματος υπάρχει γυαλί BK7 με δείκτη διάθλασης 1.5066^[27], ενώ ολόκληρο το μοντέλο περιβάλλεται από στρώματα (perfectly matched layers, PMLs) που επιτρέπουν την απορρόφηση τυχόν ανακλάσεων της δέσμης του laser κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης. Η δέσμη του laser ήταν μια δέσμη Gauss στα 1064nm, η οποία περνάει από φακό με αριθμητικό άνοιγμα $NA = 0.85$. Επίσης, κατά την προσομοίωση λάβαμε υπόψη και το δείκτη διάθλασης των υλικών. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων παρουσιάζονται παρακάτω.



Σχήμα 4.11: Πάνω: Η συνιστώσα F_z της συνολικής οπτικής δύναμης σε συνάρτηση με το d_{low}
Κάτω: Η συνιστώσα F_x της συνολικής οπτικής δύναμης σε συνάρτηση με τη μετατόπιση εκατέρωθεν του κεντρικού άξονα της φωτεινής δέσμης

Στις παραπάνω εικόνες, απεικονίζονται η συνιστώσα F_x της δύναμης σκέδασης και η συνολική δύναμη F_z , που ασκούνται στο σωματίδιο του πολυστυρενίου, απουσία οποιαδήποτε μεταλλικής νανοδομής. Στο διάγραμμα αριστερά, απεικονίζεται η

συνολική οπτική δύναμη στον άξονα z ανάλογα με τη μεταβολή του ύψους του σωματιδίου από το υπόστρωμα. Παρατηρούμε ότι η δύναμη είναι μεγαλύτερη όταν το σωματίδιο βρίσκεται κοντά στο υπόστρωμα και μειώνεται καθώς απομακρύνεται από αυτό. Η τάξη μεγέθους της δύναμης είναι 10^{-11} και οι μεταβολές που σημειώνονται σε αυτήν κατά την απομάκρυνση του σωματιδίου από το γυαλί απέχουν 6 μονάδες το μέγιστο (μεταξύ μεγαλύτερης και μικρότερης τιμής). Επιπλέον, βλέπουμε ότι στα πρώτα 40nm, η δύναμη μειώνεται με γρηγορότερο ρυθμό συγκριτικά με τα μεγαλύτερα ύψη. Αυτό οφείλεται στις ανακλάσεις του πεδίου εξαιτίας του γυαλιού, αυξάνοντας εντονότερα το πεδίο.

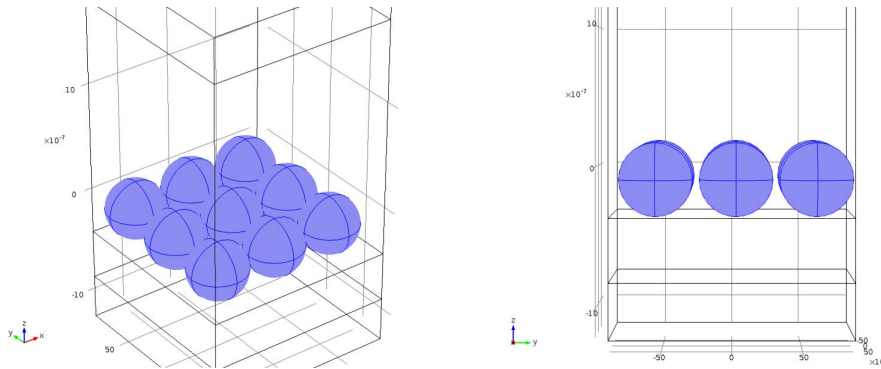
Όσον αφορά το διάγραμμα δεξιά, σε αυτό απεικονίζεται η δύναμη F_x σε συνάρτηση με την οριζόντια θέση του σωματιδίου, για μικρές μετατοπίσεις από την αρχική του θέση. Αρχικά, το πολυστυρένιο βρίσκεται όλο μέσα στη δέσμη του laser και το μετακινούμε κατά μήκος του άξονα x με βήμα 20nm, μέχρι και τη θέση 60nm. Η απόσταση του κατώτατου σημείου του σωματιδίου από το υπόστρωμα είναι 50nm, μια απόσταση που αντιστοιχεί στο μήκος Debye, το οποίο αποτελεί ένα συνηθισμένο μήκος των ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων και χρησιμοποιείται σε προσομοιώσεις ανάλογων περιπτώσεων^[49]. Παρατηρούμε ότι η εξάρτηση της δύναμης από την απόσταση είναι γραμμική, με την ακτινοβολία να ασκεί μια δύναμη επαναφοράς ($F = -kx$) πάνω στο πολυστυρένιο, με σκοπό να το επαναφέρει πάλι στην αρχική του θέση. Η ακαμψία για τη συγκεκριμένη παγίδευση υπολογίζεται ότι είναι ίση με $k = (-2.97 \pm 0.07) \times 10^{-3} N/m$

Ο θεωρητικός υπολογισμός της οπτικής δύναμης, έγινε μέσω της συνιστώσας F_x της συνολικής οπτικής δύναμης, για μικρές μετατοπίσεις του σωματιδίου από τον κεντρικό άξονα της δέσμης του laser. Η διαφορά των οπτικών δυνάμεων μεταξύ της αρχικής θέσης (0nm) και της θέσης του στα 20nm, κατά μήκος του άξονα x , που υπολογίζουμε από την προσομοίωση είναι $F_x = 2.006 \times 10^{-12} N$. Από προηγούμενη πειραματική δουλειά,^[25] η μετρούμενη δύναμη που μετρήθηκε πειραματικά με τη μέθοδο διαφυγής ήταν $F_x = 2.754 \times 10^{-13} N$. Η θεωρητική τιμή που προκύπτει είναι 86.2% μεγαλύτερη σε σχέση με την πειραματικά μετρούμενη τιμή. Η διαφορά αυτή οφείλεται τόσο σε πειραματικά σφάλματα όσο και σε προσεγγίσεις στην προσομοίωση. Επιπλέον, το γεγονός ότι στο πείραμα το δείγμα περιέχει περισσότερα από ένα σωματίδια καθώς και η αύξηση της θερμοκρασίας του δείγματος λόγω της ακτινοβολίας του laser, επηρεάζουν την οπτική παγίδευση, οδηγώντας σε μικρότερη δύναμη παγίδευσης από το θεωρητικά αναμενόμενο. Παρόλα αυτά, μπορούμε να πούμε ότι το μοντέλο έχει την δυνατότητα να δώσει ποιοτικά συμπεράσματα όσον αφορά την οπτική παγίδευση. Τέλος, και σε αυτό το διάγραμμα της συνιστώσας F_x παρατηρώντας τη μορφή της δεξιά του μηδενός, φαίνεται η δύναμη να μειώνεται καθώς το σωματίδιο κινείται κατά μήκος του άξονα x , απομακρυνόμενο από τη δέσμη του laser.

4.6.2 Προσομοίωση νανοδομής αποτελούμενης από μεταλλικές σφαίρες

Το υλικό των σφαιρών που μελετήθηκαν ήταν ο χρυσός και η απόσταση μεταξύ των

περιφερειών των σφαιρών ήταν 50nm και 100nm. Στην αρχή, η απόσταση μεταξύ του κατώτατου σημείου του σωματιδίου και του ανώτερου σημείου της μεταλλικής νανοδομής ήταν 10nm. Αυτή η απόσταση επιλέχθηκε να είναι μικρή, ώστε η τοπική ενίσχυση του πεδίου να είναι σε θέση να επηρεάσει το παγιδευμένο σωματίδιο.



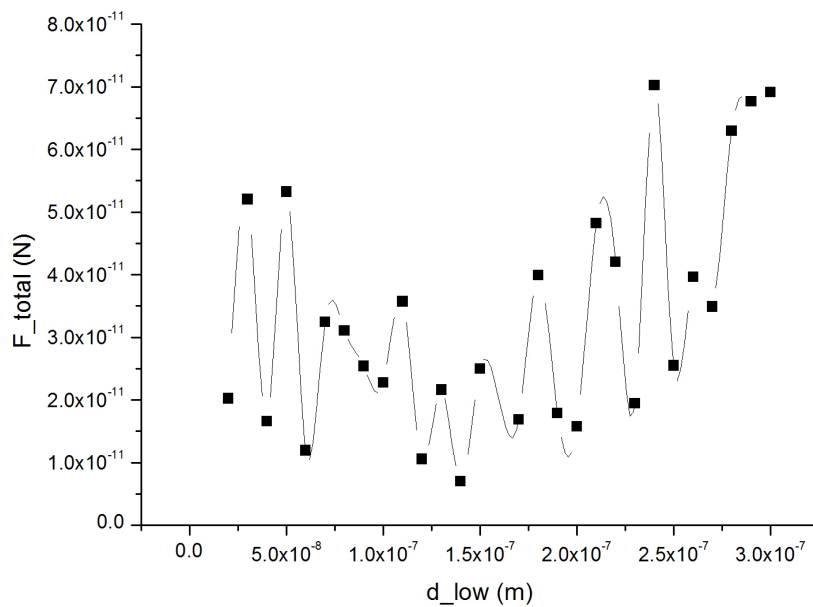
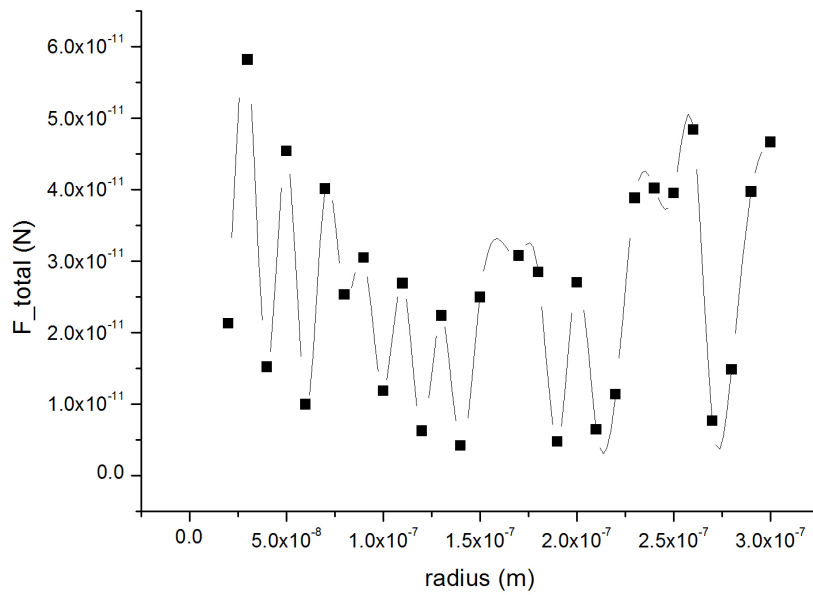
Σχήμα 4.12: Μοντέλο προσομοίωσης μεταλλικών σφαιρών

Αρχικά, η ακτίνα των χρυσών σφαιρών αυξανόταν ανά 10nm, ώστε να προσδιοριστεί το μέγεθος των σφαιρών που δίνει τη μέγιστη οπτική δύναμη πάνω στην επιφάνεια του πολυστυρενίου. Παρακάτω απεικονίζεται το διάγραμμα της συνολικής δύναμης που ασκείται στο παγιδευμένο σωματίδιο στο χώρο, ως προς την ακτίνα των μεταλλικών σφαιρών της νανοδομής, όταν το κενό μεταξύ των σφαιρών ήταν 50nm και στα 100nm, αντίστοιχα. Ο υπολογισμός της συνολικής δύναμης έγινε διανυσματικά σύμφωνα με τη σχέση:

$$F_{total} = \sqrt{F_x^2 + F_y^2 + F_z^2}$$

με τα F_x, F_y, F_z να είναι οι συνιστώσες της δύναμης στο καρτεσιανό σύστημα, και περιελάμβανε και τις τρεις συνιστώσες του χώρου.

Με αυτό τον τρόπο, μπορέσαμε να καθορίσουμε το μέγεθος των σφαιρών της νανοδομής που δίνουν τα καλύτερα αποτελέσματα και βοηθούν στη μέγιστη ενίσχυση της οπτικής παγίδας.

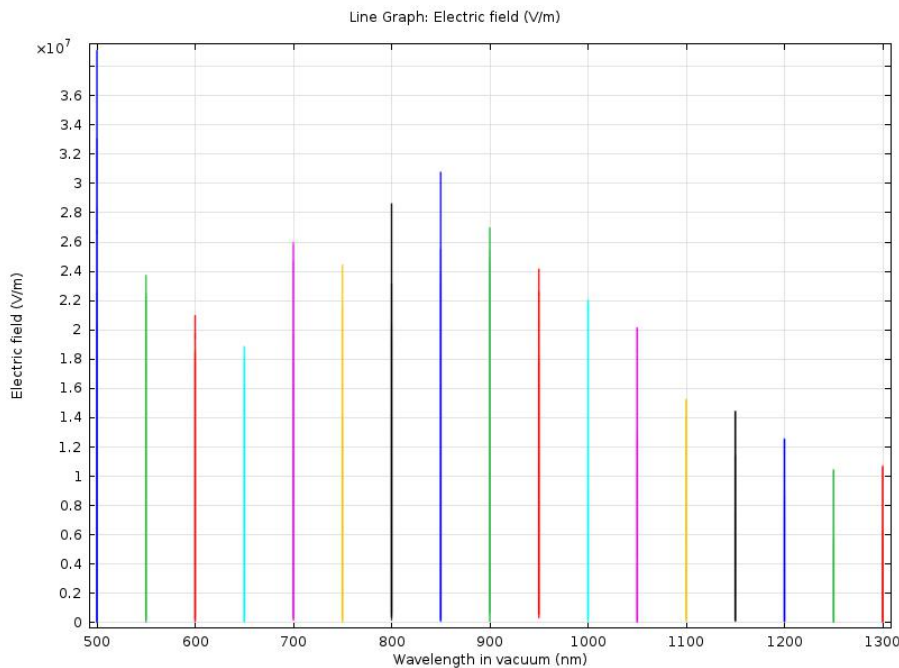


Σχήμα 4.13: Συνολική δύναμη με συνεισφορά και των τριών συνιστωσών, με τις σφαίρες της δομής να βρίσκονται σε απόστασεις 50nm και 100nm αντίστοιχα

Από το παραπάνω διάγραμμα, συμπεραίνουμε ότι στην περίπτωση που το κενό μεταξύ των μεταλλικών σφαιρών είναι 50nm, η ακτίνα τους θα πρέπει να είναι 30nm ώστε να δημιουργηθεί η βέλτιστη δύναμη πάνω στο σωματίδιο που παγιδεύουμε. Παρατηρείται όμως αυξημένη οπτική δύναμη και για ακτίνα 260nm των μεταλλικών σφαιρών. Όταν η απόσταση των σφαιρών είναι διπλάσια (100nm), τότε η ακτίνα των 240nm φαίνεται να επιφέρει την ισχυρότερη ενίσχυση του πεδίου, λόγω δημιουργίας πλασμονικού πεδίου. Παρατηρούμε ότι οι ακτίνες των σφαιρών διαφέρουν κατά

20nm όταν αυξάνεται το κενό ανάμεσά τους, μία διαφορά που στην νανοτεχνολογία θεωρείται απειροελάχιστη. Επιπλέον, η αντίστοιχη συνολική δύναμη που προκύπτει είναι $2.74 \times 10^{-10} N$ για κενό 50nm, και $2.67 \times 10^{-10} N$ για κενό 100nm, μεταξύ των σφαιρών, με τη δύναμη να είναι μεγαλύτερη κατά 2.55% όταν οι σφαίρες βρίσκονται πιο κοντά η μία στην άλλη. Αυτή η διαφορά δεν είναι πολύ μεγάλη και επομένως μπορούμε να πούμε ότι, όσον αφορά τη νανοδομή που αποτελείται από μεταλλικές σφαίρες, η απόσταση μεταξύ των σφαιρών δεν επηρεάζει σημαντικά την δύναμη που αναπτύσσεται πάνω στο παγιδευμένο σωματίδιο, και άρα ούτε την τοπική ενίσχυση του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου. Επομένως, θα μπορούσαν να κατασκευαστούν νανοδομές αποτελούμενες από χρυσές σφαίρες, σε διαφορετικές αποστάσεις, ανάλογα τις ανάγκες εφαρμογής της οπτικής παγίδευσης, χωρίς να υπάρχει σημαντική μεταβολή στο πλασμαονικό πεδίο και την ενίσχυση που αυτό δίνει.

Είναι γνωστό ότι για τη διέγερση των πλασμονίων, θα πρέπει η ταλάντωση των ελεύθερων ηλεκτρονίων του μετάλλου να συντονίζεται με τη συχνότητα της δέσμης laser που προσπίπτει στη μεταλλική επιφάνεια. Έτσι, μελετήθηκε η επίδραση των διαφορετικών μηκών κύματος μια ακτινοβολίας laser στο συντονισμό πλασμαονικού πεδίου, απεικονίζοντας την ένταση του ηλεκτρικού πεδίου, όπως φαίνεται στην ακόλουθη εικόνα:



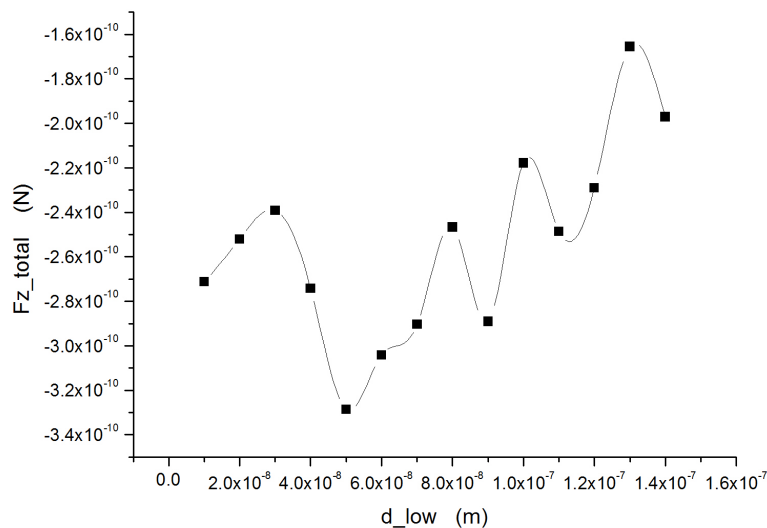
Σχήμα 4.14: Ηλεκτρομαγνητικό πεδίο στην επιφάνεια της νανοδομής σε συνάρτηση με το μήκος κύματος της δέσμης laser, για μεταλλικές σφαίρες ακτίνας 260nm και απόστασης 50nm

Παρατηρούμε ότι ο συντονισμός των χρυσών σφαιρών επιτυγχάνεται με ακτινοβολία στα 500nm. Η ακτινοβολία laser που είχαμε στη διάθεσή μας ήταν στα 1064nm, η οποία δεν ενισχύει στο μέγιστο του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου. Ωστόσο με την εύρεση της κατάλληλης γεωμετρίας της μεταλλικής νανοδομής, μπορούμε να πετύχουμε μια αξιόλογη ενίσχυση του πεδίου. Επομένως, μέσω των προσομοιώσεων, μας δίνεται η δυνατότητα τόσο της μελέτης του φαινομένου των πλασμονίων επιφανείας όσο

και του προσδιορισμού των παραμέτρων του προβλήματος, για να πετύχουμε και να εφαρμόσουμε πειραματικά το φαινόμενο της διέγερσης του πλασμαονικού πεδίου. Το παραπάνω γράφημα απεικόνισης του ηλεκτρικού πεδίου για τη νανοδομή των μεταλλικών σφαιρών, είναι αποτέλεσμα της μελέτης που έγινε με το λογισμικό COMSOL Multiphysics.

Έγινε επίσης μελέτη της εμβέλειας των πλασμαονίων στις μεταλλικές σφαίρες με ακτίνα 30nm και 260nm, αφού σε αυτές τις διαστάσεις παρατηρήθηκε μεγαλύτερη ενίσχυση του πεδίου, κοντά στη μεταλλική νανοδομή. Σκοπός αυτής της μελέτης ήταν να προσδιορίσουμε το σημείο στο οποίο έχει νόημα να μιλάμε για ενίσχυση του πεδίου, καθώς και την ένταση του πλασμαονικού πεδίου σε συνάρτηση με την απόσταση από το υπόστρωμα.

Μελέτη μεταλλικών σφαιρών, ακτίνας $r = 260\text{nm}$



Σχήμα 4.15: Εμβέλεια πλασμαονικού πεδίου για μεταλλικές σφαίρες ακτίνας 260nm

Στο διάγραμμα της προηγούμενης εικόνας, στον άξονα x έχουμε την απόσταση μεταξύ της περιφέρειας του παγιδευμένου σωματιδίου και του ανώτατου σημείου της μεταλλικής νανοδομής, και την οποία ονομάζουμε d_low , ενώ στον άξονα y παριστάνεται η συνολική δύναμη στη z συνιστώσα του χώρου. Οι τιμές του άξονα y είναι αρνητικές, ενώ το d_low (απόσταση σωματιδίου από τη νανοδομή) ξεκινούσε από τα 10nm και έφτανε μέχρι τα 140nm. Κατά την προσομοίωση, το σωματίδιο μετατοπιζόνταν μόνο κατά τον άξονα z, ενώ η θέση του στις άλλες δύο συνιστώσες του χώρου παρέμενε σταθερή. Στα πρώτα 40nm παρατηρούμε μια διακύμανση, με τη δύναμη Fz να μειώνεται και να αυξάνεται 0.04 μονάδες. Μετά τα 50nm, παρατηρείται μια απότομη πτώση της δύναμης πάνω στο σωματίδιο, η οποία, σε αυτή τη μελέτη, φτάνει μέχρι τα $1.6 \times 10^{-10} \text{N}$. Μικρές διακυμάνσεις φαίνεται να υφίστανται ακόμα και όταν η απόσταση σωματίδιο - νανοδομή (d_low) είναι πάνω από τα 50nm, ωστόσο

από το γράφημα παρατηρούμε ότι η δύναμη συνεχώς μειώνεται. Άρα, το πλασμαονικό πεδίο, για το σωματίδιο του πολυστυρενίου με διάμετρο 900nm και τη νανοδομή που αποτελείται από μεταλλικές σφαίρες διαμέτρου 260nm και απόστασης 50nm, φαίνεται να επιδρά για τα πρώτα 50nm.

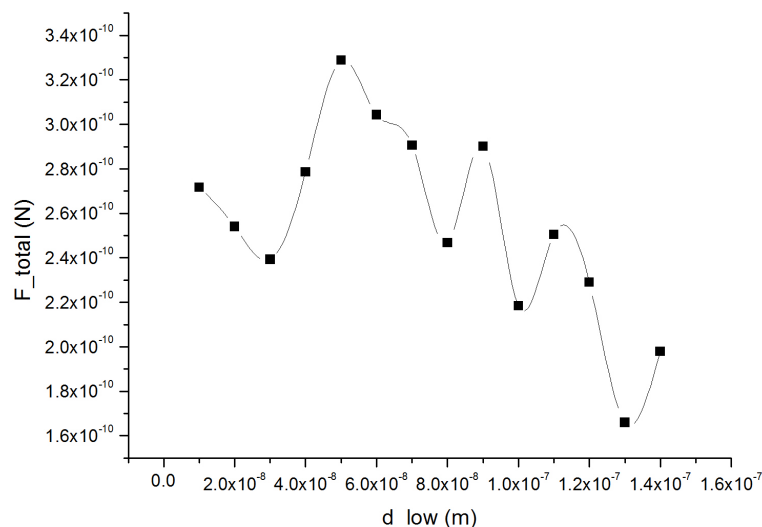
Τα διαγράμματα των συνιστωσών F_x και F_y της συνολικής δύναμης, κατά την μεταβολή της ποσότητας d_{low} , απλά επιβεβαιώνουν το γεγονός ότι το σωματίδιο είναι παγιδευμένο. Η συνάρτηση θυμίζει αρμονική ταλάντωση και οι τιμές των πλατών κυμαίνονται γύρω από το μηδέν. Τυχόν αποκλίσεις, όπως κάποια μέγιστα που παρατηρούνται στο γράφημα, οφείλονται σε υπολογιστικές προσεγγίσεις κατά την προσομοίωση.

Έπειτα, σχεδιάσαμε το γράφημα του διανύσματος στο χώρο της συνολικής δύναμης που ασκείται στο σωματίδιο στις διάφορες αποστάσεις του πολυστυρενίου από τη μεταλλική νανοδομή, πήραμε το γράφημα που φαίνεται παρακάτω. Η σχέση της δύναμης η οποία αναπαρίσταται γραφικά είναι η εξής:

$$F_{total} = \sqrt{F_x^2 + F_y^2 + F_z^2}$$

και αντιστοιχεί στον υπολογισμό του διανύσματος της δύναμης στο χώρο, με τα F_x, F_y, F_z να είναι οι συνιστώσες της δύναμης στο καρτεσιανό σύστημα.

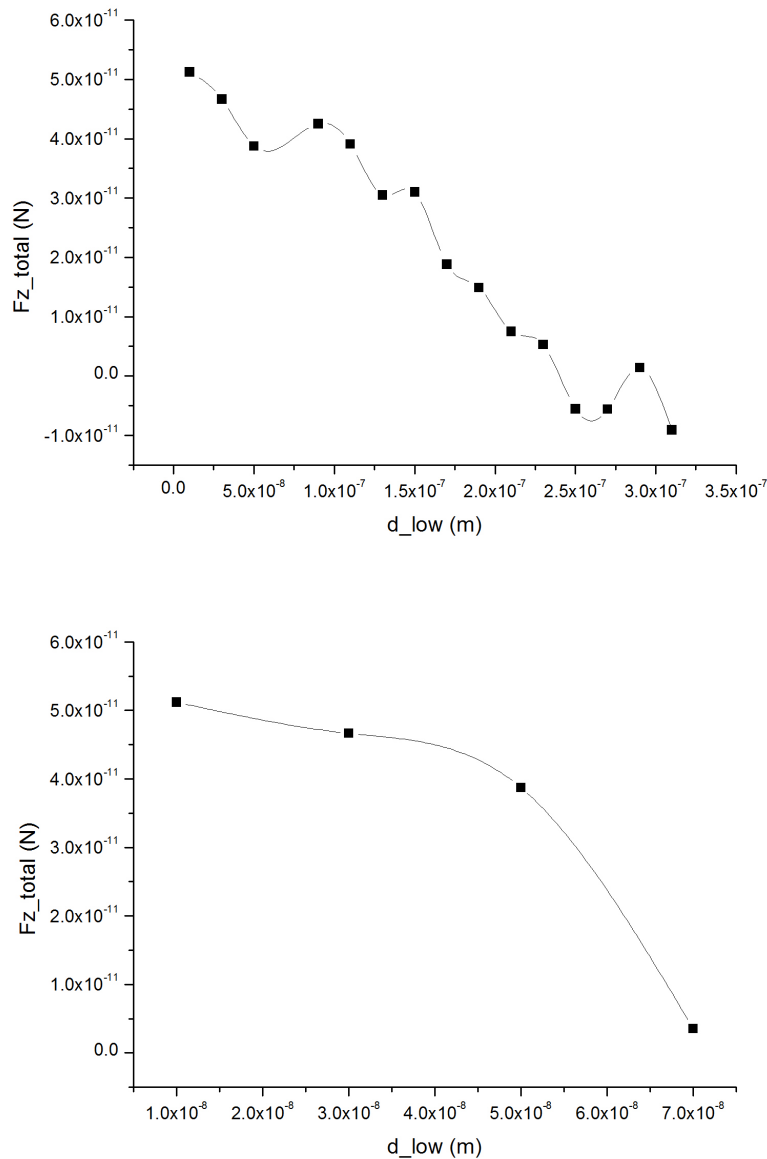
Παρατηρούμε ότι ακριβώς παρατηρήσαμε και στο γράφημα της εμβέλειας του πλασμαονικού πεδίου, όπου απεικονιζόταν μόνο η z συνιστώσα της δύναμης, με τη μόνη διαφορά ότι ο άξονας y έχει θετικές τιμές. Η συμπεριφορά της δύναμης σε συνάρτηση με την απόσταση του πολυστυρενίου από τη μεταλλική νανοδομή είναι ίδια όπως και στην εικόνα 4.15, με τη δύναμη να μειώνεται μετά τα 50nm, και να παρουσιάζει μια κάπως ιδιαίτερη συμπεριφορά για απόσταση μικρότερων των 50nm.



Σχήμα 4.16: Γράφημα της εμβέλειας πλασμαονικού πεδίου, όπου συμμετέχουν όλες οι συνιστώσες της δύναμης, για μεταλλικές σφαίρες ακτίνας 260nm

Μελέτη μεταλλικών σφαιρών, ακτίνας $r = 30\text{nm}$

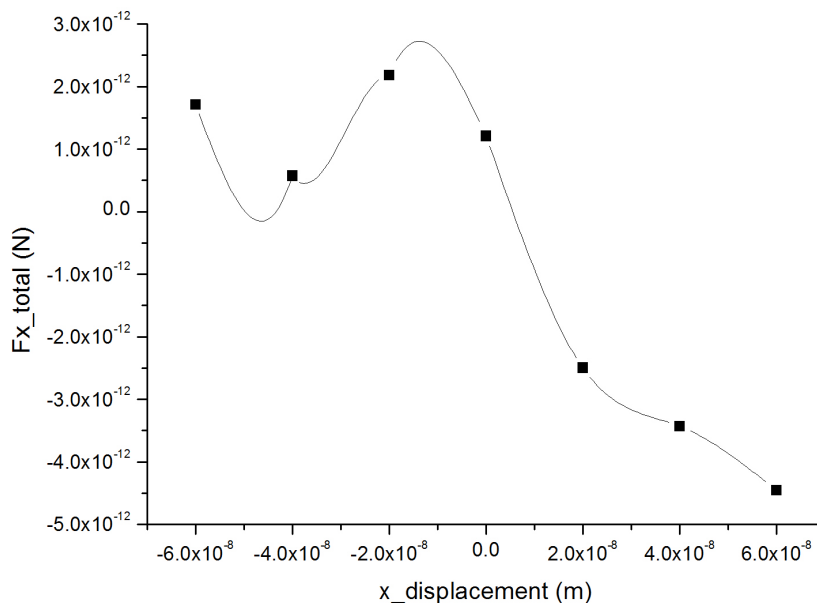
Σύμφωνα με την εικόνα 4.12, η νανοδομή που αποτελείται από μεταλλικές σφαίρες χρυσού, ακτίνας 30nm και απόστασης 50nm μεταξύ των περιφερειών τους, φαίνεται ότι κι εκείνη αυξάνει την επαγόμενη οπτική δύναμη πάνω στο σωματίδιο του πολυστυρενίου, λόγω διέγερσης του πλασμονικού πεδίου. Έτσι, μελετήθηκε η εμβέλεια του πεδίου όταν έχουμε πάνω στο υπόστρωμα από γυαλί τη συγκεκριμένη νανοδομή, δίνοντας τα ακόλουθα διαγράμματα.



Σχήμα 4.17: Γράφημα της εμβέλειας πλασμονικού πεδίου κατά τον άξονα z, για μεγάλη απόσταση σωματιδίου-νανοδομής (πάνω), και σε περιοχές κοντά στο υπόστρωμα (κάτω), για μεταλλικές σφαίρες ακτίνας 30nm

Όσον αφορά το διάγραμμα της παραπάνω εικόνας και την εμβέλεια του πλασμονικού πεδίου, στη δομή από χρυσές σφαίρες ακτίνας 30nm, έχουμε και σε αυτή την περίπτωση παρόμοια συμπεριφορά σε σύγκριση με την εμβέλεια του πεδίου όταν η ακτίνα των μεταλλικών σφαιρών είναι μεγαλύτερη. Η μεταβολή της απόστασης ήταν

ανά 20nm, ξεκινώντας από την τιμή 10nm. Όταν η απόσταση μεταξύ του κατώτατου σημείου της περιφέρειας του σωματιδίου προς παγίδευση και του ανώτατου σημείου της μεταλλικής νανοδομής (d_{low}) είναι 10nm, παρατηρούμε ότι στο σωματίδιο ασκείται η μέγιστη δύναμη $F_{z-total} = 5.12 \times 10^{-11} N$. Η μεγιστοποίηση της οπτικής δύναμης οφείλεται στη διέγερση πλασμονικού πεδίου. Αυτή η δύναμη μειώνεται καθώς το σωματίδιο απομακρύνεται από το υπόστρωμα και τη μεταλλική νανοδομή, αφού η επίδραση του πλασμονικού πεδίου εξασθενεί, και μαζί με αυτό η ενίσχυση που δίνει στο συνολικό ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Από το γράφημα κοντά στο υπόστρωμα, συμπεραίνουμε ότι, για τη συγκεκριμένη μεταλλική νανοδομή, η εμβέλεια του πλασμονικού πεδίου φτάνει μέχρι τα 35nm περίπου πάνω από το ανώτατο σημείο της νανοδομής, ενώ για λίγο μεγαλύτερες αποστάσεις, η οπτική δύναμη που ασκείται στο σωματίδιο μειώνεται με γρήγορο ρυθμό. Για μεγαλύτερες αποστάσεις, η μείωση της δύναμης, άρα και η εξασθένιση του πεδίου, έχει γραμμική συμπεριφορά.



Σχήμα 4.18: Διάγραμμα της συνιστώσας F_x για μικρές μετατοπίσεις του σωματιδίου, ως προς τον κεντρικό άξονα της δέσμης

Οι προσομοιώσεις του παραπάνω μοντέλου περιελάμβαναν τον υπολογισμό των οπτικών δυνάμεων κατά τη μετατόπιση του σωματιδίου στον άξονα x . Η μετατόπιση έγινε δεξιά και αριστερά της δέσμης του laser και έφτασε μέχρι τα 60nm, ενώ το βήμα της μεταβολής της θέσης ήταν 20nm. Η ποσότητα d_{low} ήταν ίση με 50nm, που αντιστοιχεί στο μήκος Debye, ένα τυπικό μήκος αλληλεπίδρασης των ηλεκτρομαγνητικών πεδίων.^[21] Στα πειράματα οπτικής παγίδευσης είναι πολύ δύσκολο (στη διάταξη του δικού μας εργατηρίου είναι αδύνατον) να προσδιορίσουμε το ύψος παγίδευσης του σωματιδίου και γι' αυτό κάναμε αυτή την επιλογή όσον αφορά το ύψος παγίδευσης. Επιπλέον, όπως έδειξαν και τα αποτελέσματα σχετικά με την εμβέλεια του πλασμονικού πεδίου, στα 50nm πάνω από τη μεταλλική νανοδομή υπάρχει ακόμα - αν και

οριακά - η επίδραση των πλασμονίων στην επιφάνεια του παγιδευμένου σωματιδίου. Η δύναμη F_x αποτελεί τη συνολική δύναμη που ασκεί το πεδίο στο σωματίδιο και αντιστοιχεί στη δύναμη που μετράται στο εργαστήριο με τη μέθοδο της διαφυγής. Η συνιστώσα F_x της συνολικής δύναμης του πεδίου, όταν το σωματίδιο μετακινήθει 20nm ως προς την αρχική του θέση (0nm) στον κεντρικό άξονα της φωτεινής δέσμης ισούται με $F_x = -1.58 \times 10^{-12} N$

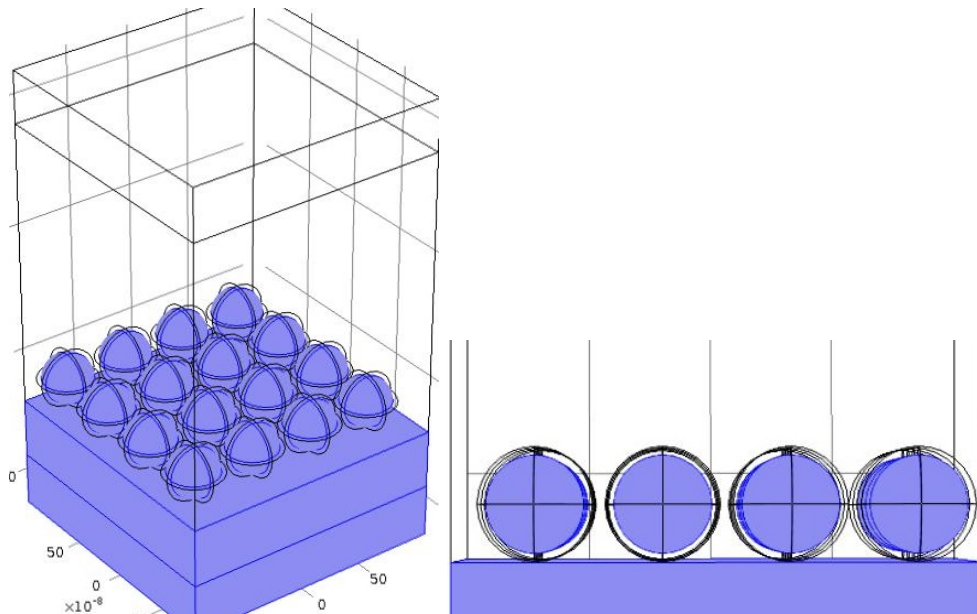
4.6.3 Προσομοίωση νανοδομής αποτελούμενης από μεταλλικούς σφαιρικούς φλοιούς

Είναι γνωστό ότι ο συντονισμός των πλασμονίων επιφανείας με τη χρήση ακτινοβολίας laser, με μήκος κύματος στο κοντινό υπέρυθρο, επιτυγχάνεται όταν τα νανοσωματίδια που αποτελούν τη μεταλλική δομή είναι κέλυφη (nanoshells).^[24] Η μελέτη σφαιρικών φλοιών, δηλαδή σφαιρικών δομών που είναι κενά στο εσωτερικό τους, έγινε με σκοπό να επιβεβαιωθεί αυτό το γεγονός, αλλά και να βρεθεί μια νανοδομή που θα είναι συμβατή με την παράμετρο του μήκους κύματος όσον αφορά το δικό μας εργαστήριο.

Έτσι, μοντελοποιήθηκαν σφαιρικοί φλοιοί με γυαλί στο εσωτερικό τους. Σε αυτές τις μοντελοποιήσεις, το κενό ανάμεσα στις σφαίρες ήταν 50nm και το μέταλλο που χρησιμοποιήθηκε ήταν ο χρυσός. Το γυαλί παίζει το ρόλο του διηλεκτρικού, με σκοπό τη δημιουργία διεπιφάνειας μετάλλου - διηλεκτρικού και τη διέγερση των πλασμονίων επιφανείας, με τη βοήθεια της δέσμης του laser.

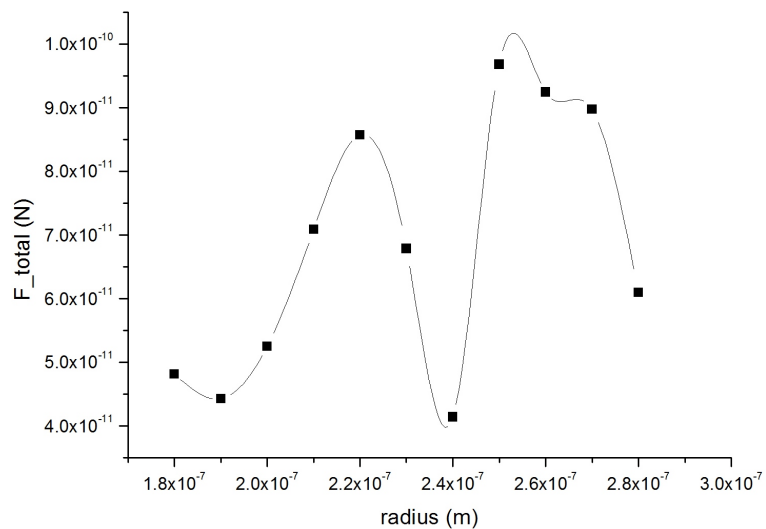
Νανοδομή μεταλλικών σφαιρικών φλοιών με διηλεκτρικό εσωτερικό

Σε αυτή τη γεωμετρία της νανοδομής, το εσωτερικό των φλοιών δεν είναι κενό, αλλά περιέχει γυαλί BK7 το οποίο παίζει το ρόλο του διηλεκτρικού. Το πάχος του μετάλλου, που στην προκειμένη περίπτωση είναι χρυσός, είναι 37.5nm, ενώ ο λόγος των ακτινών του διηλεκτρικού (γυαλί) προς την ακτίνα του μεταλλικού σφαιρικού φλοιού είναι 0.85. Πιστεύεται ότι η επαφή μετάλλου - διηλεκτρικού έχει τη δυνατότητα να δώσει εντόνότερα φαινόμενα πλασμονίων επιφανείας, ενώ παράλληλα το laser μήκους κύματος 1064nm μπορεί να πετύχει τον συντονισμό των πλασμονίων, ενισχύοντας την οπτική δύναμη περισσότερο. Επιπλέον, μία τέτοια δομή, που δεν έχει κενό στο εσωτερικό της ίσως είναι ευκολότερο να κατασκευαστεί.

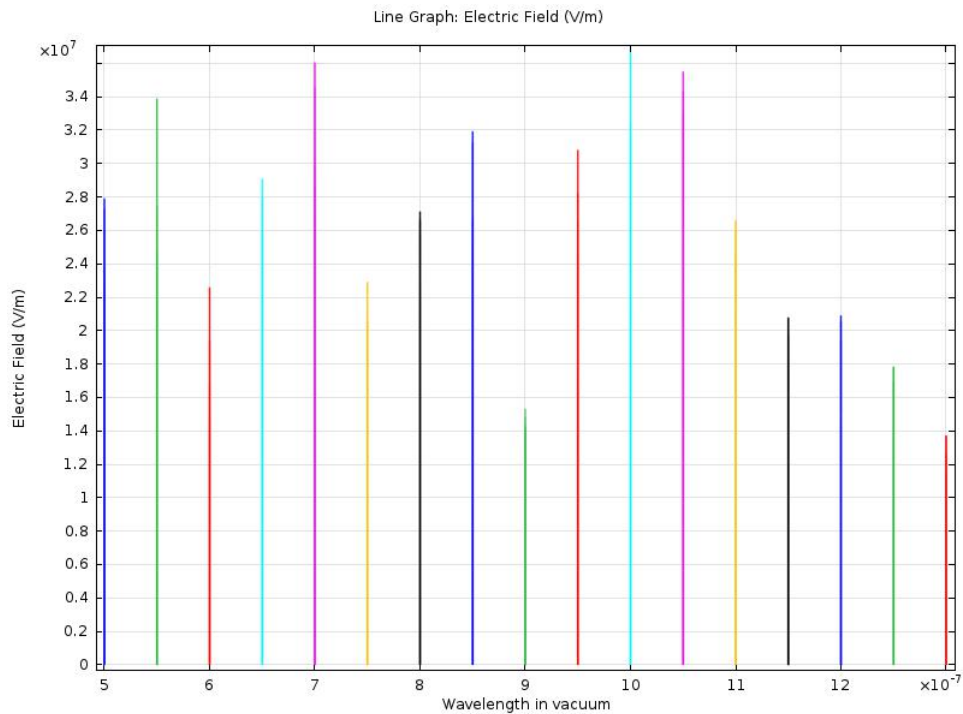


Σχήμα 4.19: Μοντέλο σφαιρών μετάλλου-διηλεκτρικού

Μελετώντας την ακτίνα των σφαιρών που μπορούν να ενισχύσουν μέγιστα το τοπικό ηλεκτρομαγνητικό πεδίο, βρήκαμε ότι η ακτίνα των μεταλλικών κελύφων θα πρέπει να είναι 250nm. Η ακτίνα της γυάλινης σφαίρας που βρίσκεται μέσα σε κάθε μεταλλικό νανοκέλυφος της δομής είναι σε συνάρτηση με την ακτίνα του κελύφους. Επομένως, κατά την προσομοίωση, όταν μεταβαλλόταν η ακτίνα του κελύφους, άλλαζε και η ακτίνα της διηλεκτρικής σφαίρας στο εσωτερικό του σφαιρικού φλοιού.

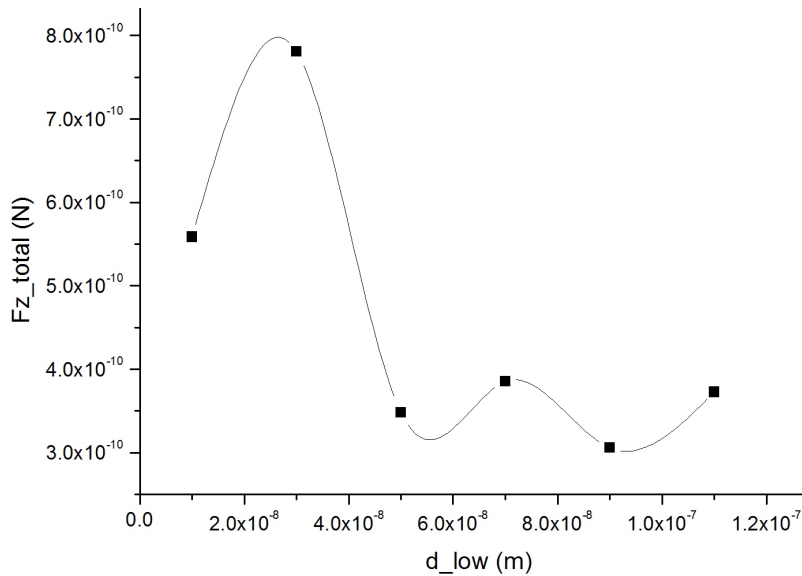


Σχήμα 4.20: Προσδιορισμός του μεγέθους της νανοδομής σφαιρών μετάλλου-διηλεκτρικού



Σχήμα 4.21: Το ηλεκτρικό πεδίο στη νανοδομή σφαιρών μετάλλου-διηλεκτρικού

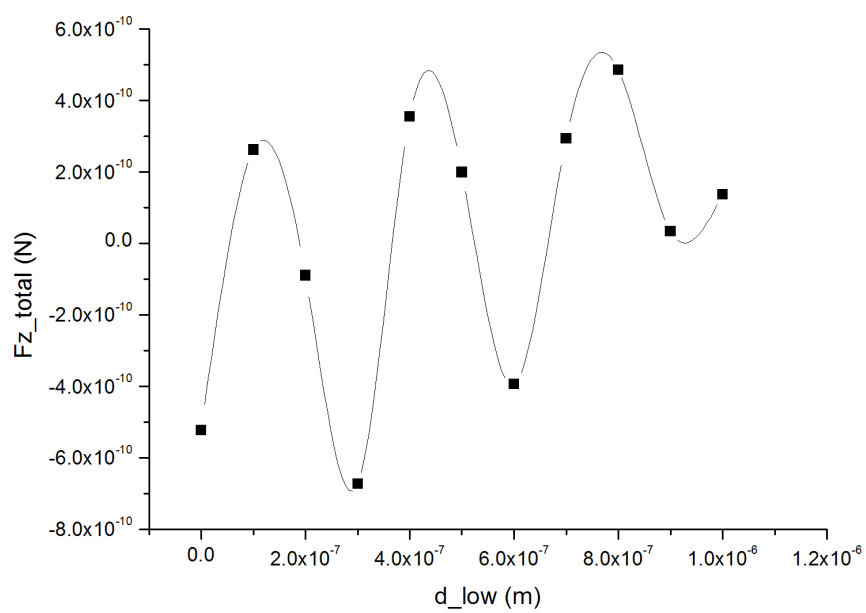
Επιπλέον, μελετήθηκε και το ηλεκτρικό πεδίο πάνω στη μεταλλική νανοδομή των σφαιρικών φλοιών με διηλεκτικό, σε συνάρτηση με το μήκος κύματος της προσπίπτουσας ακτινοβολίας. Σκοπός αυτής της προσομοίωσης ήταν να βεβαιωθούμε ότι ο συντονισμός των πλασμονίων επιφανείας από μια ακτινοβολία laser με μήκος κύματος στο κοντινό υπέρυθρο, επιτυγχάνεται όταν η νανοδομή αποτελείται από μεταλλικούς φλοιούς (nanoshells) και όχι από συμπαγείς μεταλλικές σφαίρες. Στην παραπάνω εικόνα μπορούμε να δούμε ότι όντως όταν το μήκος κύματος συντονισμού του πλασμονικού πεδίου (δηλαδή το μήκος κύματος της ακτινοβολίας laser) είναι στα 1000nm, το ηλεκτρικό πεδίο παίρνει τη μέγιστη τιμή του, για τις συγκεκριμένες παραμέτρους του προβλήματος. Παράλληλα, παρατηρούμε και δύο άλλες κορυφές στα 700nm και 1050nm, αν και σε αυτές τις συχνότητες, το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο δεν ενισχύεται σε μέγιστο βαθμό, όπως συμβαίνει για το μήκος κύματος των 1000nm. Γενικά, παρατηρούνται διάφορες διακυμάνσεις, όμως είναι ξεκάθαρο πως η ένταση του ηλεκτρικού πεδίου μεγιστοποιείται στα μήκη κύματος που αντιστοιχούν στο κοντινό υπέρυθρο. Αυτή η αύξηση του πεδίου οφείλεται στο συντονισμό των πλασμονίων επιφανείας πάνω στη μεταλλική νανοδομή. Το παραπάνω γράφημα απεικόνισης του ηλεκτρικού πεδίου για τη νανοδομή, είναι αποτέλεσμα της μελέτης που έγινε με το λογισμικό COMSOL Multiphysics.



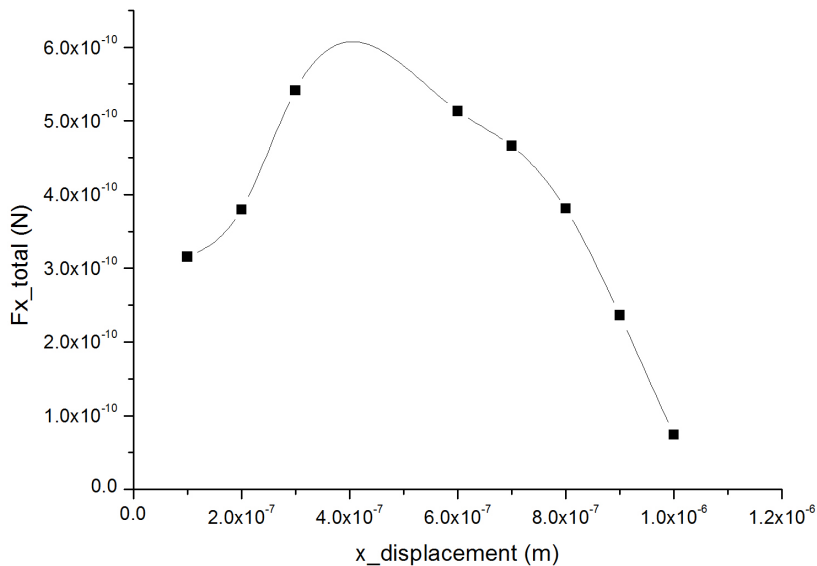
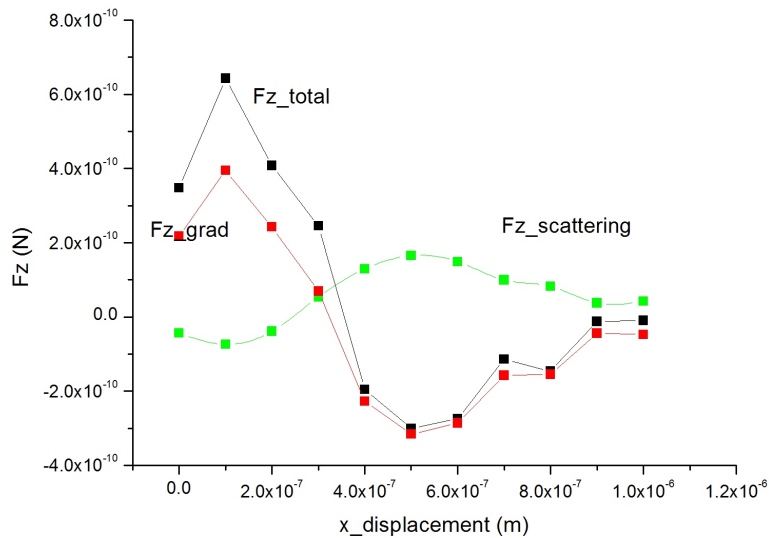
Σχήμα 4.22: Διαγράμματα των δυνάμεων F_z καθώς το σωματίδιο απομακρύνεται από τη μεταλλική νανοδομή

Στα παραπάνω διαγράμματα παριστάνεται η οπτική δύναμη στον άξονα z , σε συνάρτηση με την απόσταση του κατώτατου σημείου της περιφέρειας του σφαιρικού σωματιδίου και του ανώτερου σημείου της μεταλλικής νανοδομής, δηλαδή σε συνάρτηση με την ποσότητα d_{low} . Το d_{low} ήταν μεταβαλλόταν ανά 20nm και έπαιρνε τιμές από 10nm-110nm. Παρατηρούμε ότι η δύναμη F_z παίρνουνει μεγάλες τιμές όταν το σωματίδιο βρίσκεται κοντά στο υπόστρωμα, ενώ οι τιμές της μειώνονται καθώς το σωματίδιο απομακρύνεται από αυτό. Αυτή η μείωση στην τιμή της συνολικής οπτικής δύναμης δεν είναι γραμμική, αλλά παρατηρείται πως μειώνεται απότομα στα 50nm και παραμένει γύρω από μια τιμή, μετά την απόσταση των 50nm. Με αυτό τον τρόπο μπορούμε να προσδιορίσουμε ότι μέχρι τα 50nm περίπου πάνω από τη νανοδομή μπορούμε να αντιληφθούμε τα αποτελέσματα του διεγερμένου πλασμονικού πεδίου, για τα συγκεκριμένα χαρακτηριστικά δέσμης laser, μεταλλικής νανοδομής, μεγέθους και υλικού παγιδευμένου σωματιδίου.

Η εμβέλεια του πλασμονικού πεδίου δεν γίνεται αντιληπτή όταν η μεταβολή στην απόσταση σωματιδίου-νανοδομής γίνεται με μεγάλο βήμα και σε πολύ μεγάλη απόσταση πάνω από το υπόστρωμα. Χαρακτηριστικό παράδειγμα αποτελεί η ακόλουθη γραφική παράσταση, όπου δεν γίνεται αντιληπτό το σημείο όπου παύει να υφίσταται ενισχυμένη οπτική δύναμη. Γι' αυτό το λόγο, σε αυτή την εργασία, πήραμε μικρό βήμα όσον αφορά τη μεταβολή της καταφύρυφης απόστασης του σωματιδίου από τη νανοδομή, με σκοπό τον προσδιορισμό της εμβέλειας των πλασμονίων.



Σχήμα 4.23: Διάγραμμα της οπτικής δύναμης στον άξονα z σε συνάρτηση με την απόσταση από το μεταλλικό υπόστρωμα (d_{low}) με μεταβολή μεγάλου βήματος



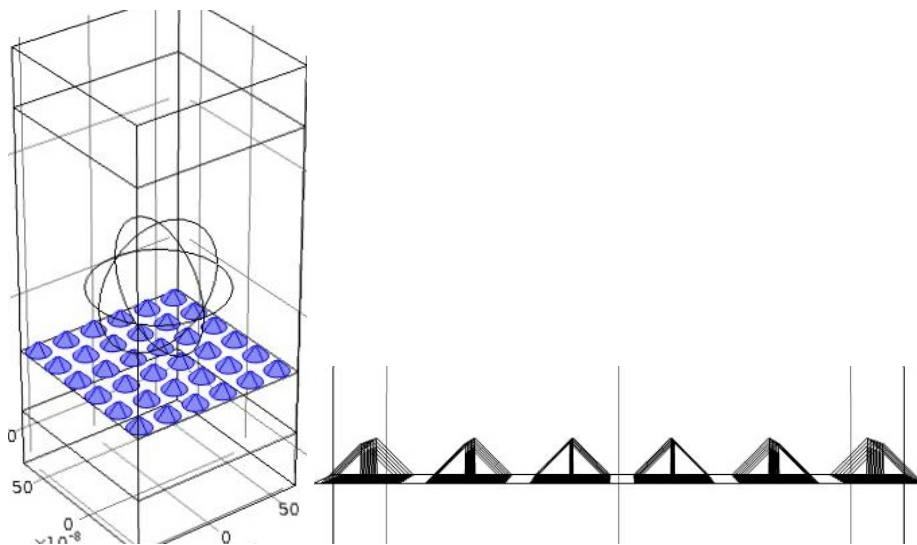
Σχήμα 4.24: Διαγράμματα των δυνάμεων F_z και $|F_x|$ καθώς το σωματίδιο απομακρύνεται από το κέντρο της δέσμης, προς τα θετικά κατά μήκος του άξονα x

Στη συνέχεια, για τη νανοδομή των χρυσών σφαιρικών φλοιών με γυαλί στο εσωτερικό τους, μελετήθηκε η επίδραση του πεδίου όταν το σωματίδιο απομακρύνεται κατά μήκος του άξονα x, μακριά από τον κεντρικό άξονα της δέσμης του laser. Παρατηρούμε ότι καθώς το σωματίδιο απομακρύνεται από τη δέσμη, η δύναμη F_x αυξάνεται κατ' απόλυτη τιμή, ενώ μετά από κάποια σχετικά μεγάλη απόσταση (στα 70nm περίπου) από τον κεντρικό άξονα της φωτεινής δέσμης, το σωματίδιο έχει απομακρυνθεί τόσο που τα φαινόμενα πίεσης ακτινοβολίας έχουν σταματήσει να υφίσταται με αποτέλεσμα η συνολική $|F_x|$ να μειώνεται. Το ίδιο φαινόμενο παρατηρείται και για την οπτική δύναμη F_z που ασκείται κατά τον άξονα z. Επιπλέον, όσον αφορά την F_z έχει γίνει το γράφημα το συνολικής δύναμης αλλά και τον επιμέρους δυνάμεων, δηλαδή της δύναμης βαθμίδας και της δύναμης σκέδασης, κατά τον άξονα z. Με αυτό τον τρόπο,

επιβεβαιώνεται το γεγονός ότι η δύναμη βαθμίδας είναι μεγαλύτερη σε τιμή από τη δύναμη σκέδασης οδηγώντας σε μια σταθερή οπτική παγίδα, ενώ το άθροισμά τους αποτελεί τη συνολική οπτική δύναμη. Η απόσταση σωματίδιο-νανοδομή (d_{low}) για την εξαγωγή των παραπάνω γραφημάτων ήταν 50nm, που αποτελεί το τυπικό μήκος των ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων (μήκος Debye) αλλά και το όριο μέχρι το οποίο υφίσταται το πλασματικό πεδίο.

4.6.4 Προσομοίωση νανοδομής αποτελούμενης από μεταλλικούς κώνους

Μια άλλη γεωμετρία που προσομοιώθηκε ήταν οι μεταλλικοί κώνοι. Το μοντέλο της προσομοίωσης στο COMSOL Multiphysics παρουσιάζεται στην επόμενη εικόνα.

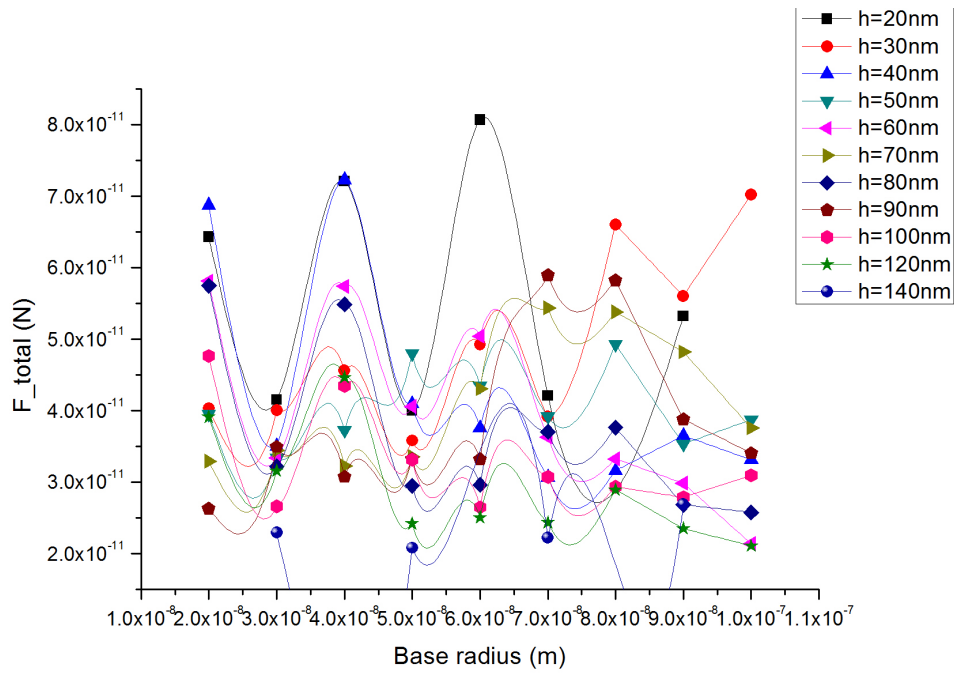


Σχήμα 4.25: Απεικόνιση μοντέλου προσομοίωσης και τομής της μεταλλικής νανοδομής

Μεταλλική νανοδομή με κενό 50nm μεταξύ των μεταλλικών κώνων

Αρχικά, έγινε μελέτη για να προσδιοριστεί η ακτίνα της βάσης και το ύψος των κώνων, για τα οποία η δύναμη παίρνει τη μέγιστη τιμή της. Έτσι, σε αυτό το μέρος της μοντελοποίησης, το κατώτερο σημείο της περιφέρειας του σωματιδίου απείχε 10nm από το ανώτατο σημείο της νανοδομής, ώστε η δύναμη που θα ασκηθεί να οφείλεται εξ' ολοκλήρου στη διέγερση των πλασμονίων. Η μεταβολή της ακτίνας της βάσης των κώνων ήταν μεταξύ 20nm-100nm, ανα 10nm, ενώ το ύψος μεταβλήθηκε από 20nm-100nm, 120nm και 140nm. Υπολογίστηκε η συνολική οπτική δύναμη, σαν διάνυσμα στον τρισδιάστατο χώρο, για κάθε συνδυασμό ακτίνας και ύψους των κώνων της νανοδομής. Το κενό που χωρίζει τον κάθε κώνο από τους γειτονικούς του είναι ίσο με 50nm. Τα αποτελέσματα της παραπάνω μοντελοποίησης παρουσιάζονται στο ακόλουθο διάγραμμα.

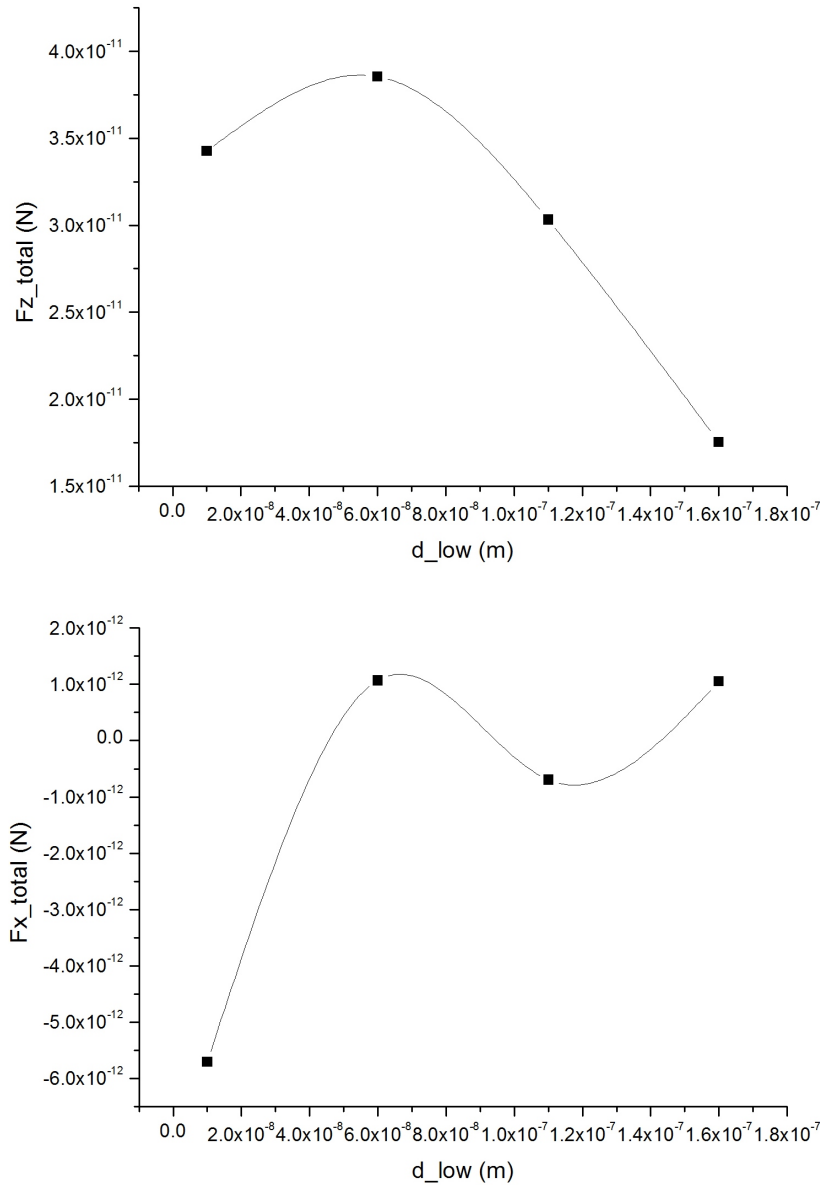
Φαίνεται ότι οι περισσότεροι συνδυασμοί διαστάσεων ακτίνας - ύψους, για τους κώνους που αποτελούν τη μεταλλική νανοδομή, δίνουν κατά κύριο λόγο μια δύναμη μεταξύ 30-40 pN, ενώ φαίνεται να ξεχωρίζουν οι κώνοι με ακτίνα 60nm και ύψος



Σχήμα 4.26: Υπολογισμός της συνολικής δύναμης στο χώρο, όταν $d_{low} = 10\text{nm}$ και το κενό μεταξύ των κώνων είναι $dx = 50\text{nm}$

20nm. Εκείνοι με ακτίνα 40nm και ύψος 40nm φαίνεται πως μπορούν να δώσουν μια σημαντική ενίσχυση στο ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Ωστόσο, η αύξηση του ύψους των κώνων έναντι της ακτίνας τους έχει αντίθετα από τα επιθυμητά αποτελέσματα, αφού, όπως φαίνεται από το παραπάνω διάγραμμα, όταν το ύψος των κώνων αυξάνει σημαντικά σε σύγκριση με την ακτίνα τους, τότε η οπτική δύναμη, άρα και η ένταση του πεδίου που επηρεάζει το σωματίδιο, μειώνεται.

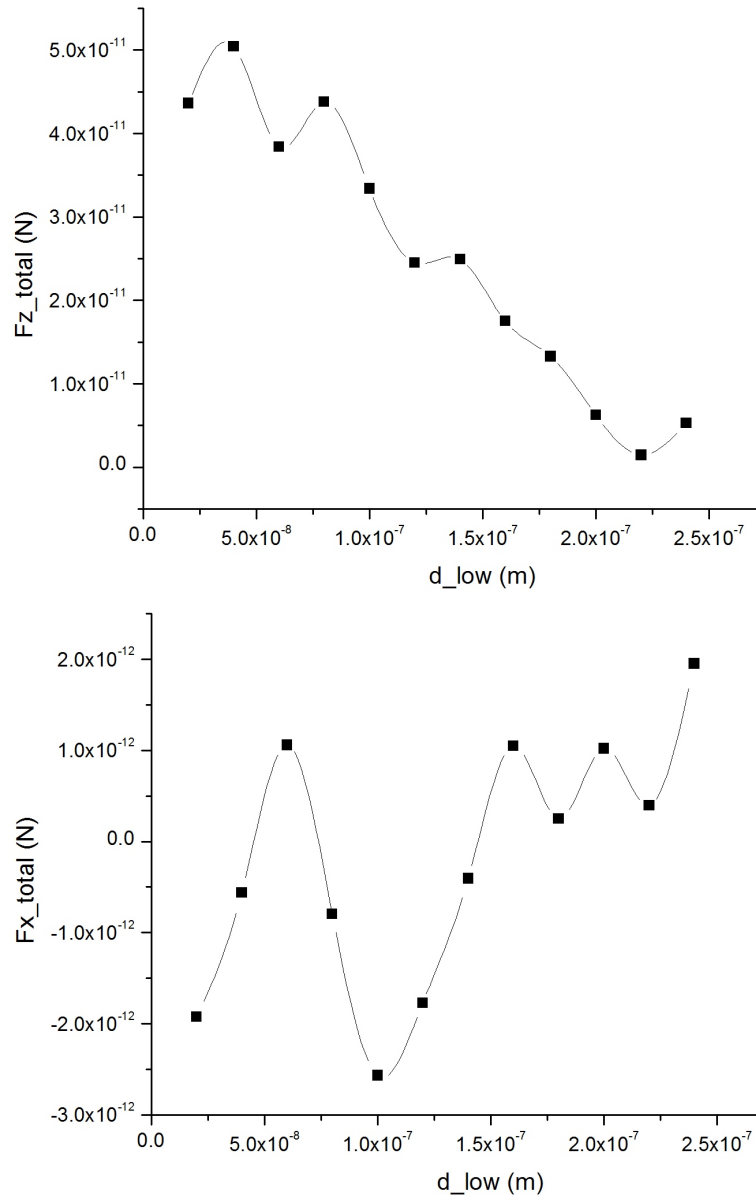
Το επόμενο βήμα ήταν να εξετάσουμε το ύψος πάνω από τη νανοδομή στο οποίο έχει νόημα να κάνουμε λόγο για ύπαρξη πλασμαονικού πεδίου. Με άλλα λόγια, έγινε μια προσπάθεια να προσδιοριστεί η εμβέλεια του αναπτυσσόμενου πλασμαονικού πεδίου. Έτσι, το σωματίδιο μετατοπίστηκε κατά μήκος του άξονα z καθώς η θέση του στο x - y επίπεδο παρέμενε σταθερή. Μετρήθηκαν οι δυνάμεις F_z και F_x για κάθε απόσταση του σωματιδίου πάνω από το υπόστρωμα.



Σχήμα 4.27: Οπτικές δυνάμεις F_z και F_x σε συνάρτηση με την ποσότητα d_{low}

Παρατηρούμε ότι πολύ κοντά στη νανοδομή, τόσο η F_z όσο και η F_x παίρνουν μεγάλες τιμές, κατ' απόλυτη τιμή, κάτι το οποίο αποδίδουμε στη διέγερση του πλασμονικού πεδίου, στην επιφάνεια των κώνων της νανοδομής. Οι ισχυρές δυνάμεις που ασκεί το πεδίο πάνω στο σωματίδιο μειώνονται με γρήγορο ρυθμό, περίπου $2 \times 10^{-4} \text{ N/m}$ όταν η απόσταση μεταξύ του κατώτατου σημείου της περιφέρειας του σφαιρικού σωματίδιου και της κορυφής των κώνων που αποτελούν τη νανοδομή, ξεπεράσει τα 50nm. Κάτι παρόμοιο συμβαίνει και με το διάγραμμα της F_x αριστερά. Για μικρές τιμές της ποσότητας d_{low} , η συνιστώσα x της συνολικής οπτικής δύναμης φαίνεται να έχει μεγάλη τιμή, η οποία και μειώνεται μετά τα 50nm ενώ η μορφή της συνάρτησης παραμένει ομοιόμορφη, καθώς το σωματίδιο συνεχίζει να απομακρύνεται από τους μεταλλικούς κώνους. Ο ρυθμός μείωσης αυτής της συνιστώσας της δύναμης, λόγω της εξασθένισης του πλασμονικού πεδίου είναι $1.35 \times 10^{-4} \text{ N/m}$. Η μεταβολή

της απόστασης μεταξύ σωματιδίου και υποστρώματος ήταν μικρή, ώστε να μπορούμε να εξάγουμε κάποιο συμπέρασμα όσον αφορά την εμβέλεια του αναπτυσσόμενου πλασμονικού πεδίου. Παρακάτω απεικονίζονται οι ίδιες δυνάμεις, όταν η ποσότητα d_{low} φτάνει μέχρι και τα 240nm.



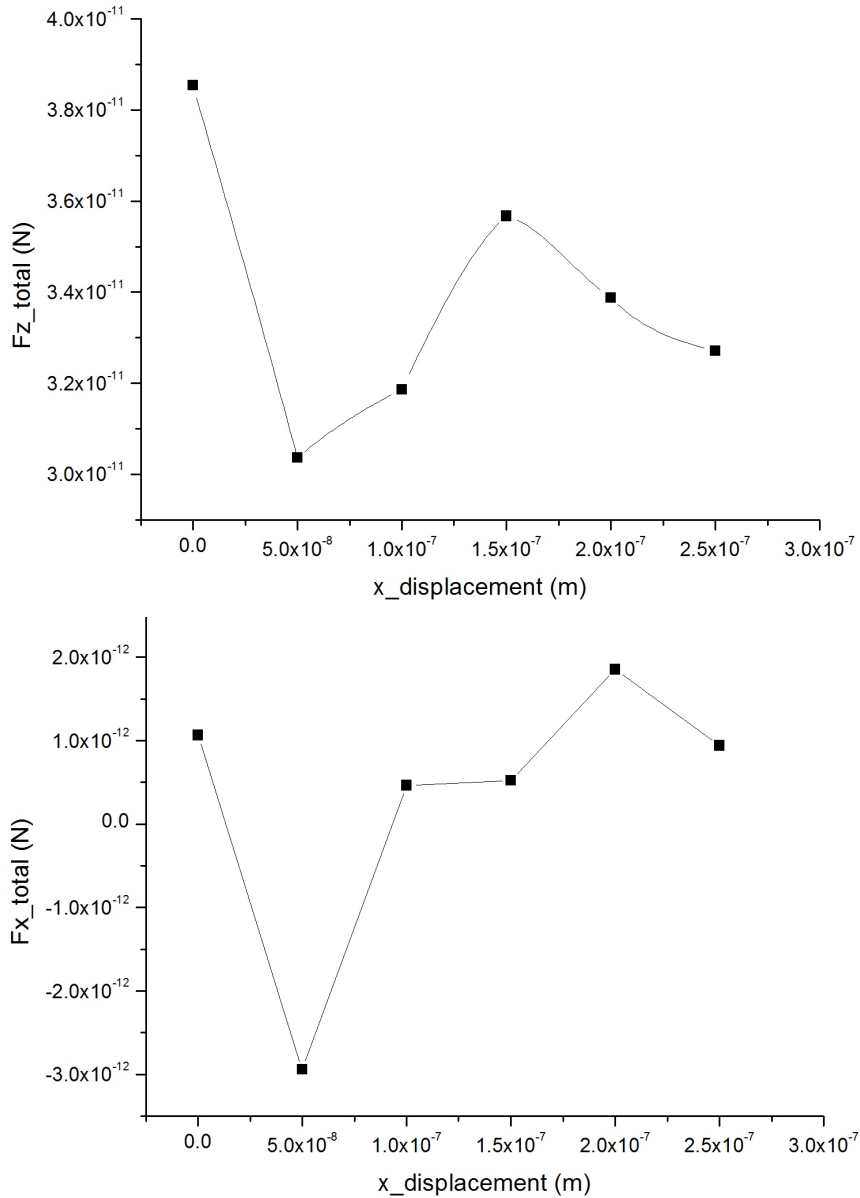
Σχήμα 4.28: Οπτικές δυνάμεις F_z και F_x αντίστοιχα, για μεγάλες τιμές της ποσότητας d_{low}

Συμπεραίνουμε ότι η εμβέλεια των πλασμονίων επιφανείας στη νανοδομή που αποτελείται από χρυσούς κώνους ακτίνας $r = 60\text{nm}$ και ύψους $h = 20\text{nm}$, είναι τα 50nm πάνω από τη κορυφή των μεταλλικών κώνων. Η z συνιστώσα της συνολικής δύναμης είναι ικανή να μας δώσει την εμβέλεια του πλασμονικού πεδίου, ωστόσο παρατηρούμε ότι παρόμοια αύξηση στη δύναμη έχουμε και για τη x συνιστώσα.

Στη συνέχεια, για την ίδια γεωμετρία και μέγεθος της νανοδομής, μεταβάλλαμε τη θέση του πολυστυρενίου κατά τον άξονα x , όταν αυτό βρίσκεται 50nm πάνω από τη νανοδομή (μήκος Debye) λαμβάνοντας τα εξής αποτελέσματα. Η μεταβολή της

θέσης έγινε ανά 50nm από τα 0nm μέχρι τα 300nm.

Παρατηρείται έντονη αύξηση της F_x συνιστώσας της συνολικής οπτικής δύναμης στα 50nm ενώ κατά την απομάκρυνση του σωματιδίου από το κέντρο της δέσμης, αυτή η δύναμη ελαττώνεται, αφού όταν το σωματίδιο απομακρυνθεί σε μεγάλη απόσταση έχει ξεφύγει από τα όρια της δέσμης, η ακτινοβολία δεν ασκεί καμία δύναμη πάνω στην επιφάνειά του, ή έχει πολύ μικρή επίδραση πάνω του, με αποτέλεσμα το σωματίδιο να μην μπορεί να παγιδευτεί.

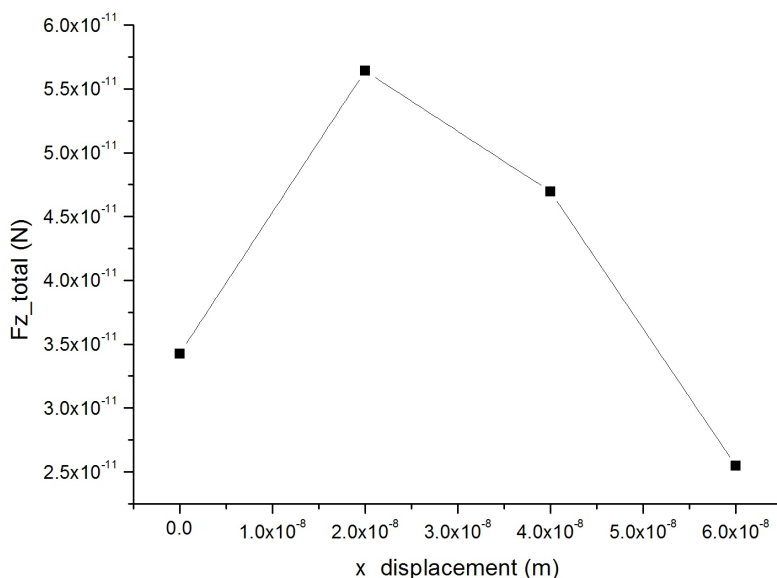


Σχήμα 4.29: Οπτικές δυνάμεις σε συνάρτηση με τη μετατόπιση στον άξονα x.

Παρόμοια συμπεριφορά έχει και η z συνιστώσα της οπτικής δύναμης, καθώς η δέσμη του laser δεν προσπίπτει όλη πάνω στο σωματίδιο του πολυστυρενίου, καθώς αυτό απομακρύνεται από τον κεντρικό της άξονα. Αυτό συμβαίνει λόγω πίεσης της ακτινοβολίας, από την οποία και προκύπτουν οι οπτικές δυνάμεις που μελετώνται. Ο ρυθμός μείωσης της οπτικής δύναμης F_z , εξαιτίας της μετατόπισής του μακριά από

τον οπτικό άξονα της φωτεινής δέσμης, υπολογίζεται ότι είναι $-1.636 \times 10^{-4} N/m$.

Μελετήσαμε τις συνέπειες μιας μικρής μετατόπισης του σωματιδίου προς το θετικό ημιάξονα x , σε απόσταση από 20nm-60nm δεξιά του κεντρικού άξονα της δέσμης, όταν το κατώτατο σημείο της περιφέρειάς του απέχει 50nm από το ανώτατο σημείο της νανοδομής των μεταλλικών κώνων. Η διαφορά μεταξύ των οπτικών δυνάμεων που δρουν στις θέσεις 0nm και 20nm υπολογίζεται, από τις προσομοιώσεις, ότι είναι ίση με $F_x = -1.9366 \times 10^{-12} N$.

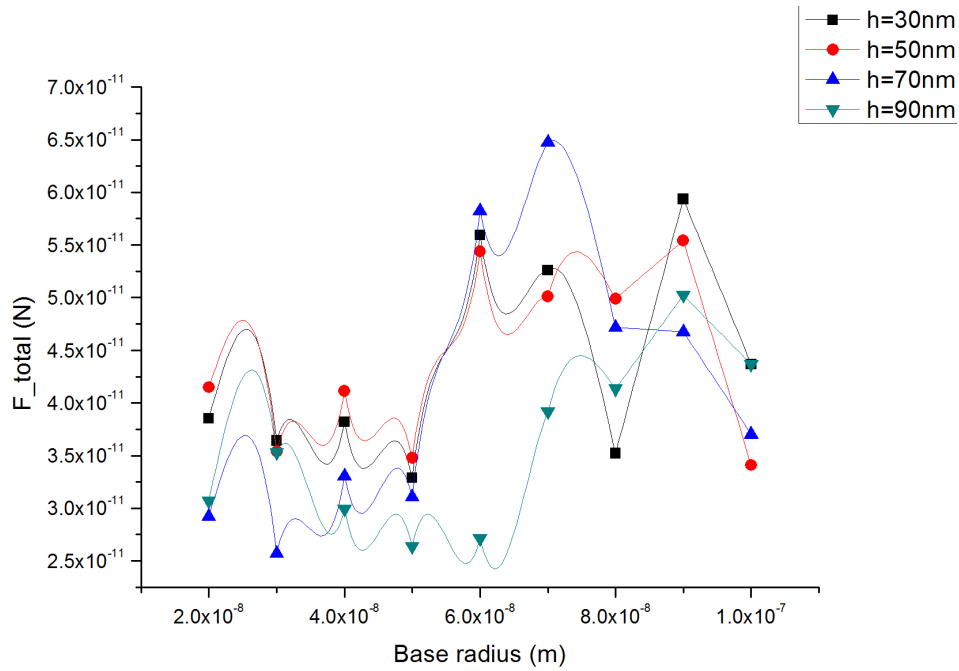


Σχήμα 4.30: Οπτικές δυνάμεις F_z για μικρές μετατοπίσεις κατά μήκος του θετικού ημιάξονα x ,

Μεταλλική νανοδομή με κενό 100nm μεταξύ των μεταλλικών κώνων

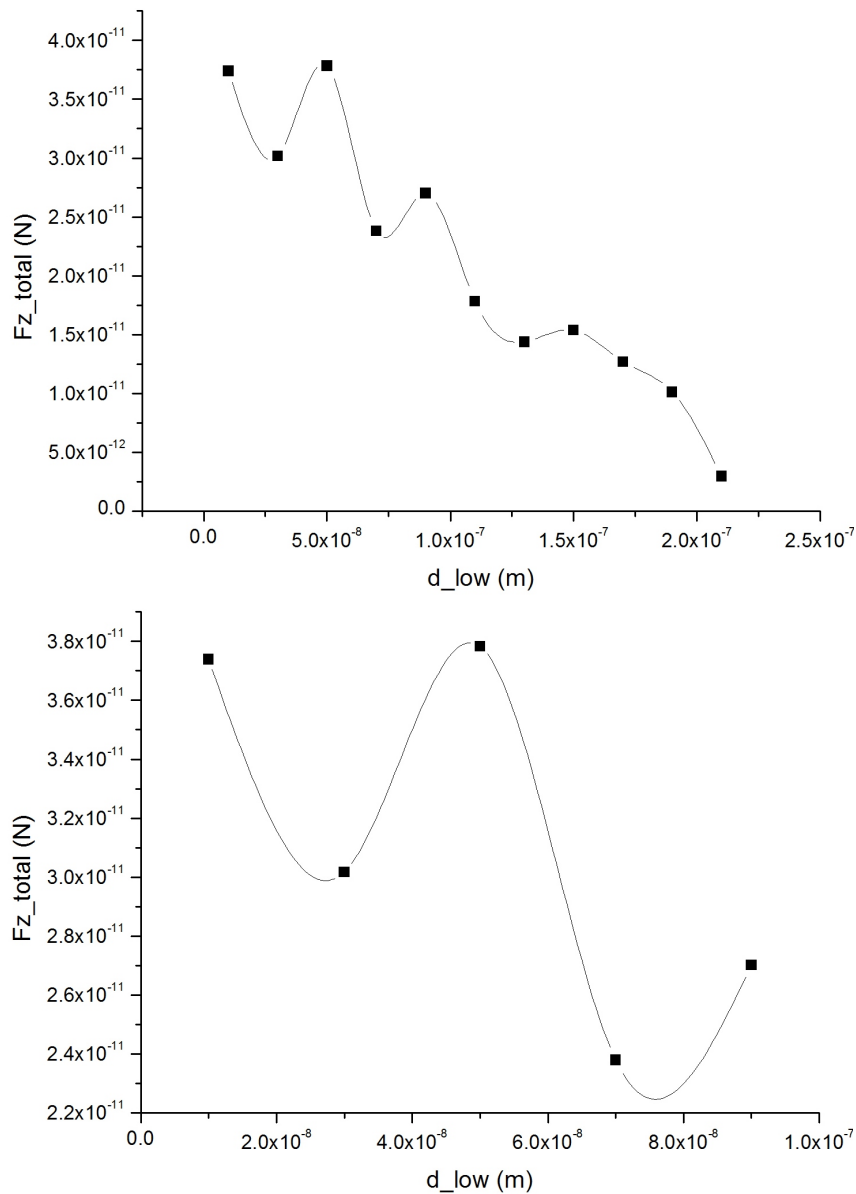
Κατά τον προσδιορισμό του μεγέθους των κώνων που αποτελούν τη νανοδομή, το ύψος των κώνων μεταβαλλόταν με βήμα 20nm, από τα 30nm έως τα 90nm, ενώ η ακτίνα της βάσης τους μεταβαλλόταν με βήμα 10nm, από τα 20nm έως τα 100nm. Η απόσταση του σωματιδίου προς παγίδευση από τη νανοδομή ήταν 10nm, ώστε να υπολογίζεται η ενίσχυση που προκύπτει λόγω της ανάπτυξης πλασμονίων στην επιφάνεια του μετάλλου. Και σε αυτή την περίπτωση το μέταλλο ήταν χρυσός, και η απόσταση μεταξύ των περιφερειών των κώνων πάνω στη δομή, δηλαδή το κενό ανάμεσά τους, ήταν 100nm. Η δύναμη υπολογίστηκε σε όλη την επιφάνεια του παγιδευμένου σωματιδίου και αποτελεί το μέτρο του διανύσματος της δύναμης στο χώρο, λαμβάνοντας υπόψη του και τις τρεις καρτεσιανές συνιστώσες της οπτικής δύναμης, σύμφωνα με τον τύπο:

$$F_{total} = \sqrt{F_x^2 + F_y^2 + F_z^2}$$



Σχήμα 4.31: Υπολογισμός της συνολικής δύναμης στο χώρο, όταν $d_{low} = 10nm$ και το κενό μεταξύ των κώνων είναι $dx = 100nm$

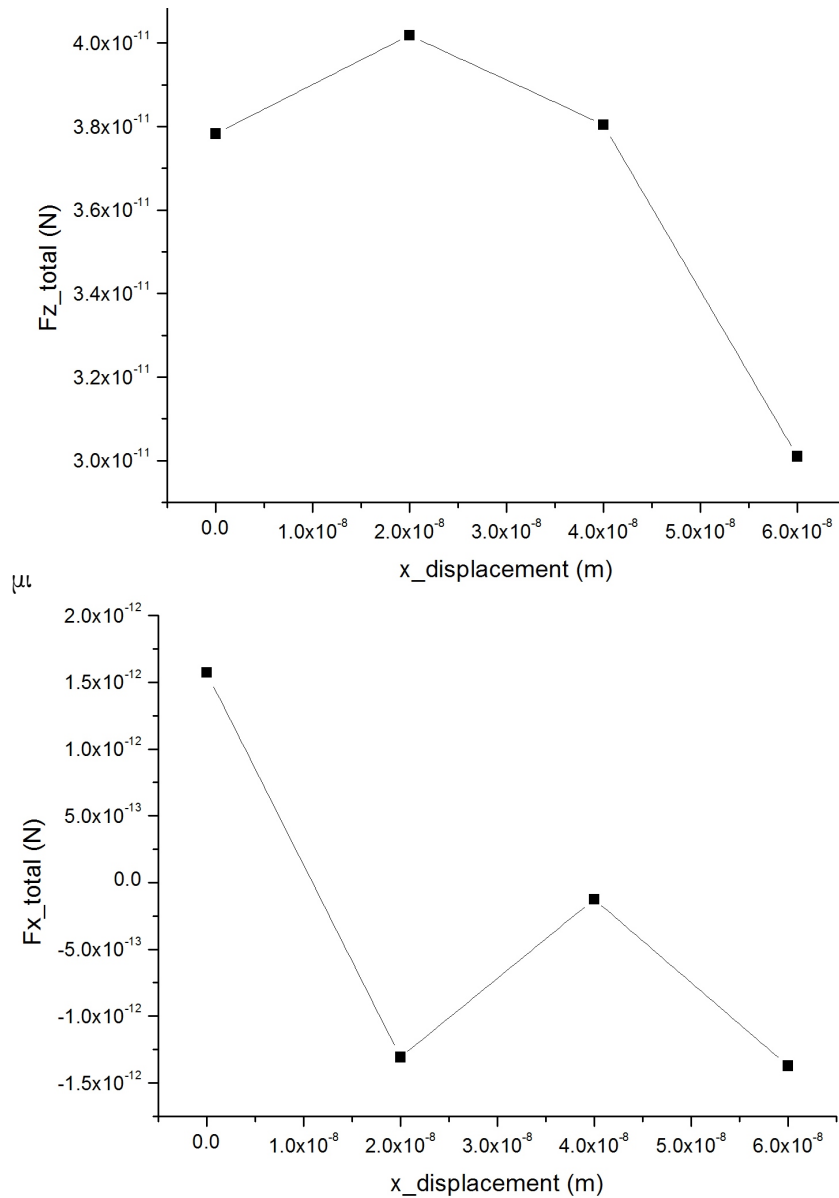
Από το προηγούμενο γράφημα, παρατηρούμε ότι οι διαστάσεις των κώνων που ασκούν τη μέγιστη δύναμη στο πολυστυρένιο, είναι εκείνοι με ακτίνα βάσης $r = 70nm$ και ύψος $h = 70nm$. Η μέγιστη οπτική δύναμη που αναπτύσσεται σε αυτή τη νανοδομή, σε σχέση με τη μέγιστη δύναμη που αναπτυσσόταν στο σωματιδίο για τα ίδια χαρακτηριστικά της νανοδομής, στην οποία όμως οι κώνοι απέχουν τη μισή απόσταση ($dx = 50nm$), είναι κατά 1.5 μονάδες μικρότερη. Αυτό είναι απολύτως λογικό αφού στην προκειμένη περίπτωση, οι μεταλλικοί κώνοι απέχουν περισσότερο, με αποτέλεσμα το πλασματικό πεδίο γύρω από τον κάθε κώνο να μην αλληλεπιδρά έντονα με εκείνο που αναπτύσσεται στους γειτονικούς του κώνους, με αποτέλεσμα η ενίσχυση της δύναμης λόγω του πεδίου να είναι λίγο μικρότερη. Η τάξη μεγέθους της οπτικής δύναμης παραμένει η ίδια και στις δύο περιπτώσεις νανοδομών με κώνους.



Σχήμα 4.32: Απεικόνιση της συνολικής οπτικής δύναμης στον κατακόρυφο άξονα, σε συνάρτηση με την απόσταση μεταξύ σωματιδίου και μεταλλικής νανοδομής. Πάνω: Γράφημα της δύναμης σε μεγάλη απόσταση πάνω από το υπόστρωμα. Κάτω: Γράφημα της δύναμης για αποστάσεις κοντά στο υπόστρωμα (μικρές τιμές της ποσότητας d_{low})

Στη συνέχεια μελετήθηκε η οπτική δύναμη ως προς την απόσταση μεταξύ του κατώτατου σημείου της περιφέρειας του πολυστυρενίου και του ανώτατου σημείου της κωνικής νανοδομής. Όπως και στα αντίστοιχα διαγράμματα σε προηγούμενες νανοδομές με διαφορετική γεωμετρία, έτσι κι εδώ παρατηρούμε ότι όταν η απόσταση σωματιδίου-υπόστρώματος είναι πολύ μικρή (στα 10nm-20nm) η συνολική οπτική δύναμη παίρνει τη μέγιστη τιμή της, παρόλο που υπάρχουν κάποιες διακυμάνσεις. Με την όλο και μεγαλύτερη απομάκρυνση του σωματιδίου από τη μεταλλική νανοδομή, παρατηρείται μείωση της δύναμης που ασκεί η ακτινοβολία στο σωματίδιο, μέχρις ότου αυτή η δύναμη φτάσει σε πολύ μικρές τιμές (πάνω γράφημα). Ειδικότερα μετά τα 50nm σημειώνεται η γρηγορότερη μείωση της οπτικής δύναμης, με ρυθμό $-7.018 \times$

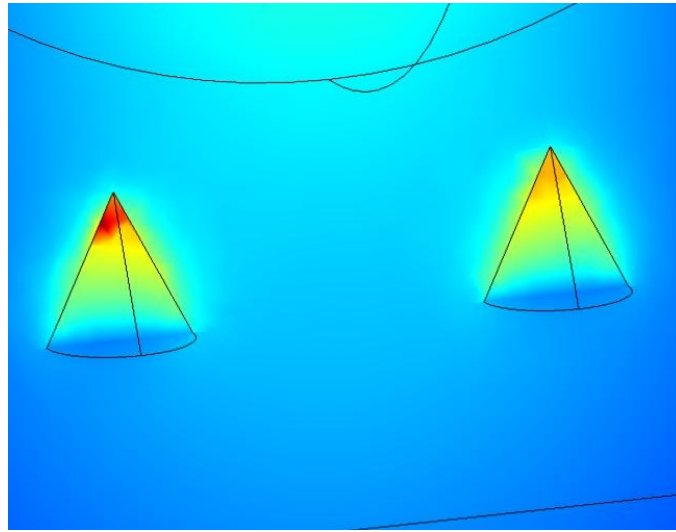
$10^{-4} N/m$.



Σχήμα 4.33: Γραφικές παραστάσεις των δυνάμεων F_z και F_x αντίστοιχα, σε συνάρτηση με την απόσταση από τον άξονα της δέσμης

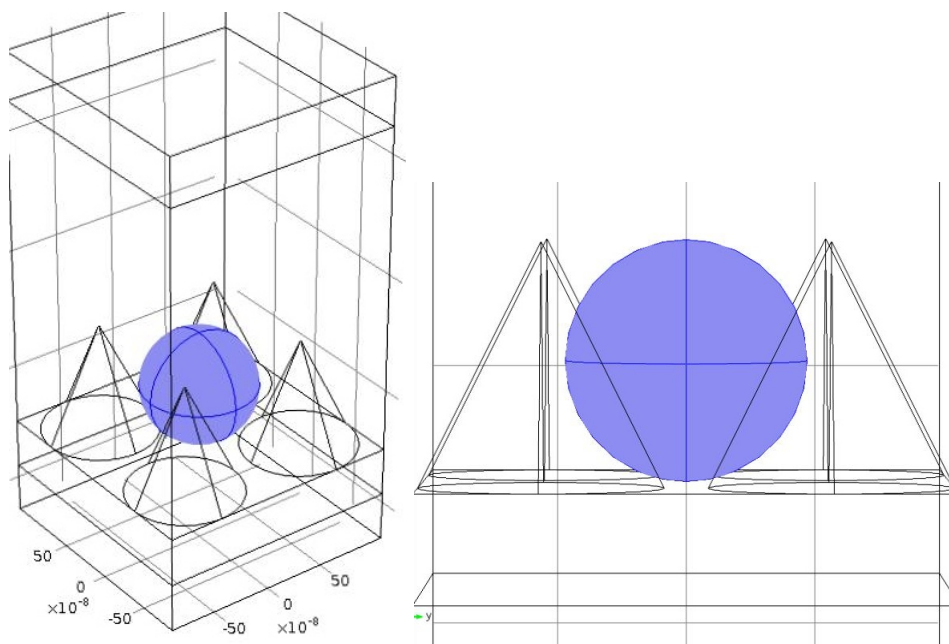
Παρατηρούμε ότι για μικρές μετατοπίσεις του σωματιδίου από τον κεντρικό άξονα της δέσμης του laser, μέχρι τα 20nm δεξιότερα της δέσμης, η συνολική οπτική δύναμη, τόσο κατά τον κατακόρυφο άξονα z όσο και στον άξονα x, παίρνει μεγάλες τιμές ενώ καθώς το σωματίδιο συνεχίζεται να απομακρύνεται, αυτές οι δυνάμεις μειώνονται. Ωστόσο, η τιμή αυτής της δύναμης μειώνεται αφού όταν το σωματίδιο μετατοπίζεται κατά μήκος του άξονα x, απομακρύνεται από τη δέσμη, με αποτέλεσμα αυτή να έχει όλο και μικρότερη επίδραση πάνω, ασκώντας του όλο και μικρότερη δύναμη. Στο παραπάνω διάγραμμα, αυτή η μείωση της δύναμης δεν είναι και τόσο μεγάλη επειδή έχουμε πάρει πολύ μικρές μετατοπίσεις ως προς τον οπτικό άξονα. Ο ρυθμός μείωσης της F_x για τα πρώτα 20nm είναι $-1.44 \times 10^{-4} N/m$, ενώ η διαφορά της συνολικής οπτικής δύναμης κατά τον άξονα x, στις θέσεις 0nm (θέση στο κέντρο του οπτικού

άξονα) και 20nm (μικρή μετατόπιση) υπολογίζεται ότι είναι: $F_x = 2.60 \times 10^{-11} N$.



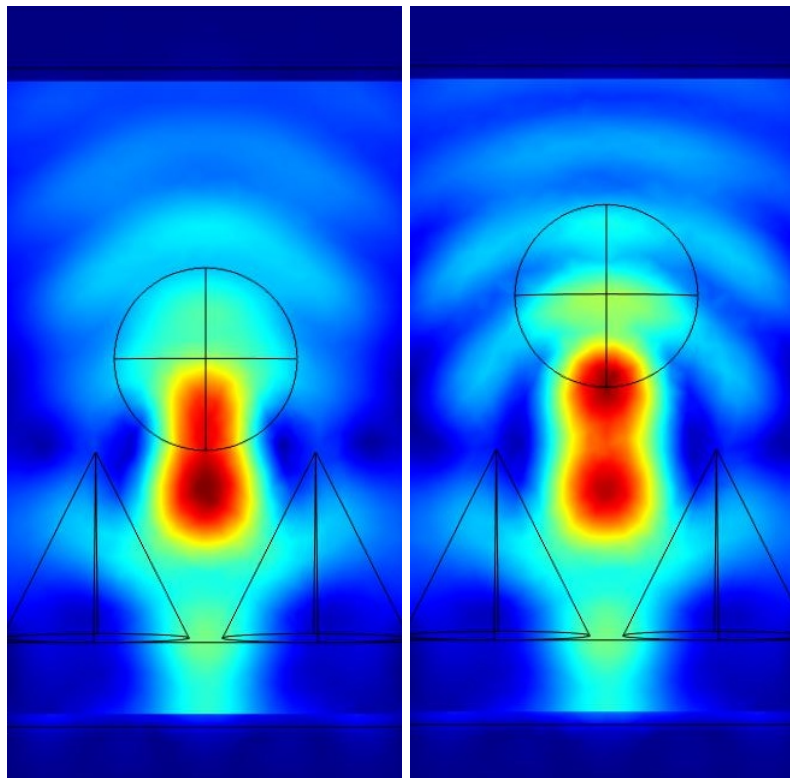
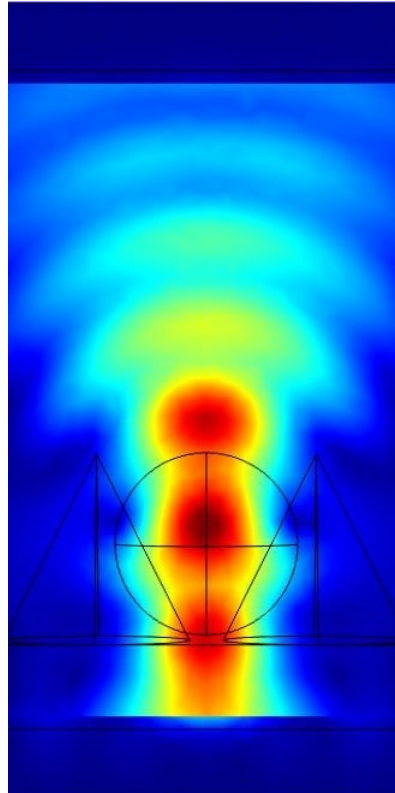
Σχήμα 4.34: Ένταση του πεδίου πάνω στους μεταλλικούς κώνους

Ειδικά για τη γεωμετρία των μεταλλικών κώνων έγιναν επιπλέον προσομοιώσεις, στις οποίες το σωματίδιο του πολυστυρενίου βρισκόταν ενδιάμεσα στους μεταλλικούς κώνους. Το ύψος και η διάμετρος της βάσης των κώνων ήταν 900nm, όσο και η διάμετρος του σωματιδίου. Η νανοδομή των κώνων φαίνεται ότι αναπτύσσει έντονο πεδίο στην κορυφή του κάθε κώνου, ενώ γενικά δεν παρουσίαζε μεγάλη ενίσχυση στην συνολική οπτική δύναμη. Σκοπός αυτής της μοντελοποίησης ήταν να ελέγξουμε αν αυτή η συγκεκριμένη γεωμετρία μπορεί να δώσει ένα τέτοιο πλασματικό πεδίο, το οποίο θα αυξάνει σε μεγαλύτερο βαθμό την επαγόμενη οπτική δύναμη πάνω στο σωματίδιο του πολυστυρενίου, με διάμετρο 900nm. Τα υλικά και οι παράμετροι της δέσμης του laser παρέμειναν τα ίδια, όπως και στις προηγούμενες προσομοιώσεις.

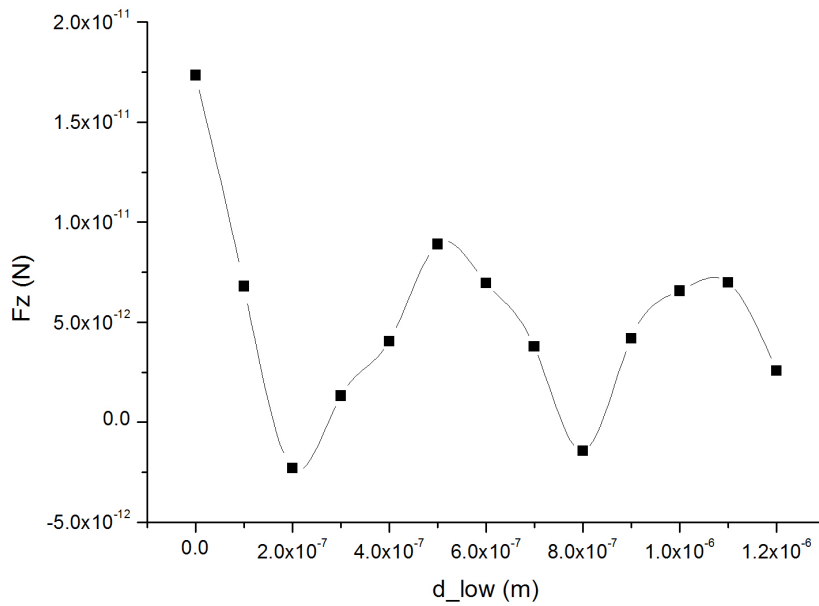


Σχήμα 4.35: Απεικόνιση του μοντέλου για κώνους, ακτίνας $r = 450nm$ και ύψους $h = 900nm$

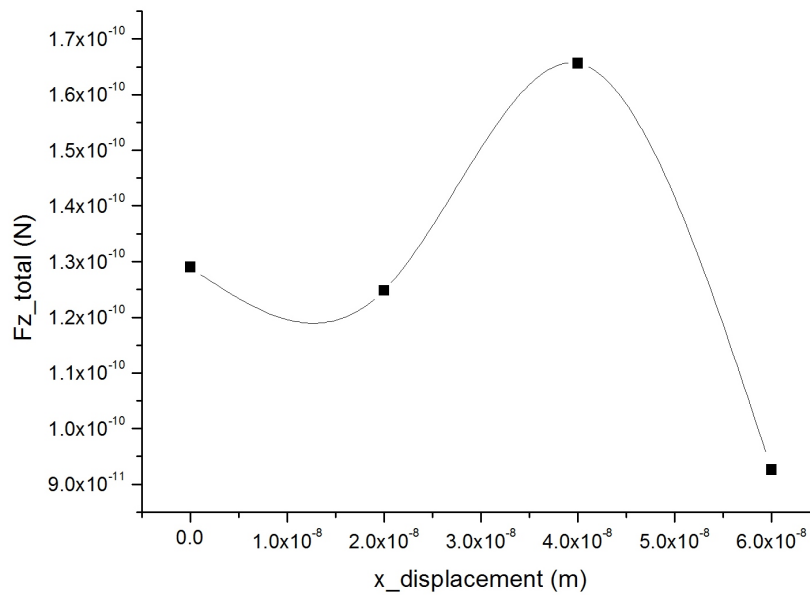
Η μεταβολή στη θέση του σωματιδίου έγινε κατά τον άξονα z καθώς και κατά μήκος του άξονα x , με σκοπό να μελετηθούν οι οπτικές δυνάμεις και το ύψος στο οποίο φτάνει η ενίσχυση του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου. Ακολουθούν οι γραφικές παραστάσεις από τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων αυτής της νανοδομής.



Σχήμα 4.36: Αναπαράσταση της έντασης του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου, για d_{low} 0nm,900nm,1200nm αντίστοιχα, από αριστερά προς τα δεξιά



Σχήμα 4.37: Διάγραμμα της συνολικής οπτικής δύναμης στον άξονα z, σε συνάρτηση με την ποσότητα d_{low}



Σχήμα 4.38: Διάγραμμα της δύναμης F_z καθώς το σωματίδιο απομακρυνόταν κατά μήκος του άξονα x

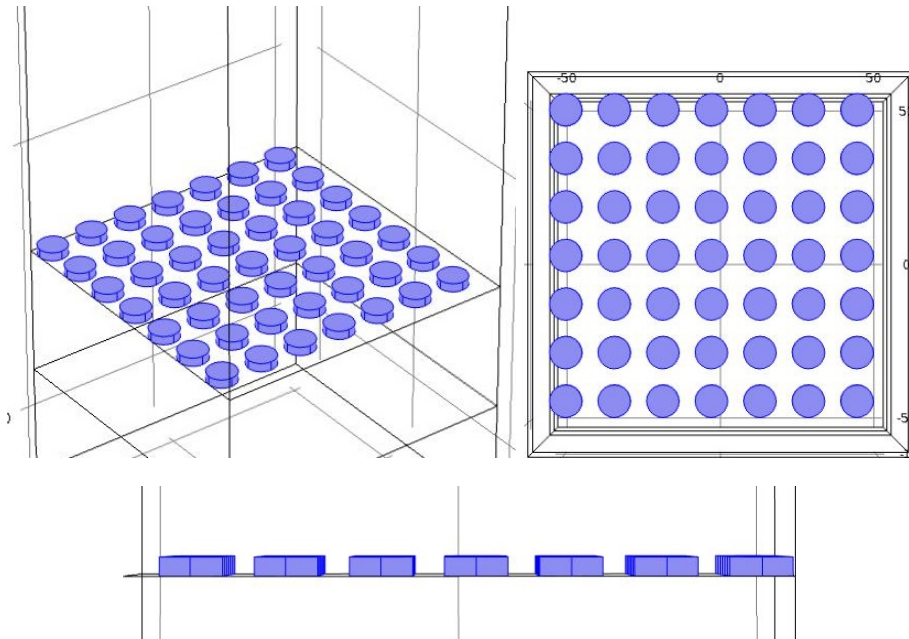
Αρχικά, και όσον αφορά τη μελέτη όπου το ύψος των κώνων είναι 900nm, η απόσταση d_{low} αντιστοιχεί στην απόσταση μεταξύ του κατώτατου σημείου της περιφέρειας του παγιδευμένου σωματιδίου και του γυάλινου υποστρώματος. Για d_{low} ίσο με το μηδέν σημαίνει ότι το σωματίδιο βρίσκεται στο χαμηλότερο σημείο που μπορεί να υπάρξει. Στο διάγραμμα δύναμης F_z και απόστασης σωματιδίου - γυάλινου υποστρώματος (d_{low}) παρατηρούμε μια αυξημένη οπτική δύναμη όταν το σωματι-

δίο βρίσκεται ενδιάμεσα στους μεταλλικούς κώνους, σε μικρές αποστάσεις από το γυάλινο υπόστρωμα και συγκεκριμένα όταν έρχεται σε επαφή με αυτό. Υπάρχει άλλη μία αύξηση της τιμής της δύναμης όταν η απόσταση d_{low} είναι στα 50nm, ενώ όλες οι υπόλοιπες τιμές που ακολουθούν, αντιστοιχούν σε μεγαλύτερα ύψη του πολυστυρενίου πάνω από το γυαλί και πάνω από την κωνική νανοδομή, και ελατώνονται. Έτσι συμπεραίνουμε ότι ολόκληρη η επιφάνεια του μεταλλικού κώνου συμβάλλει στην τοπική ενίσχυση του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου, ωστόσο η κορυφή τους αυξάνει εντονότερα την οπτική δύναμη, λόγω της διέγερσης τοπικών πλασμονίων (localized surface plasmons).

Όσον αφορά το θεωρητικό υπολογισμό των οπτικών δυνάμεων με τη βοήθεια των προσομοιώσεων, μοντελοποιήσαμε τη μέθοδο διαφυγής, την οποία χρησιμοποιούμε για την πειραματική μέτρηση αυτών των δυνάμεων, όταν το σωματίδιο βρίσκεται σε απόσταση 10nm από το γυάλινο υπόστρωμα. Με αυτό τον τρόπο, η μετρούμενη οπτική δύναμη προέρχεται τόσο από την πλευρά όσο και από την κορυφή των κώνων, όπου και φαίνεται ότι το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο είναι ισχυρότερο από κάθε άλλη θέση. Η μετατόπιση του σωματιδίου μακριά από τη δέσμη έγινε μέχρι τα 60nm, με βήμα 20nm. Όσο περισσότερο απομακρύνεται το σωματίδιο από τον οπτικό άξονα της δέσμης του laser, οι δυνάμεις εξασθενούν σε κάποιο βαθμό, επειδή το σωματίδιο δεν ακτινοβολείται εξ' ολοκλήρου από την ακτινοβολία του laser. Έτσι, προκύπτει ότι σε μεγαλύτερες αποστάσεις μετατόπισης, η ακτινοβολία παύει να ασκεί ισχυρές πιέσεις, οι οπτικές δυνάμεις εξασθενούν και εν τέλει το σωματίδιο αποδρά από την οπτική παγίδα. Η συνιστώσα F_x της συνολικής οπτικής δύναμης, κατά τον άξονα x , σε αυτή τη γεωμετρία της νανοδομής υπολογίζεται από τα μοντέλα προσομοιώσεων ότι είναι $F_x = -9.284 \times 10^{-13} N$, για μετατόπιση στα 20nm δεξιά της δέσμης. Η διαφορά μεταξύ των δυνάμεων στο κέντρο της δέσμης (0nm) και σε απόσταση 20nm υπολογίζεται $F_x = -2.39 \times 10^{-13} N$.

4.6.5 Προσομοίωση νανοδομής αποτελούμενης από μεταλλικούς πυλώνες

Μία άλλη γεωμετρία που μελετήθηκε μέσω προσομοιώσεων, ήταν εκείνη των μεταλλικών νανο-πυλώνων (nanopillars) κάθετα τοποθετημένοι στο γυάλινο υπόστρωμα. Το μέταλλο της νανοδομής ήταν ο χρυσός και οι αποστάσεις του κενού μεταξύ των πυλώνων που μελετήθηκαν ήταν 50nm και 100nm.

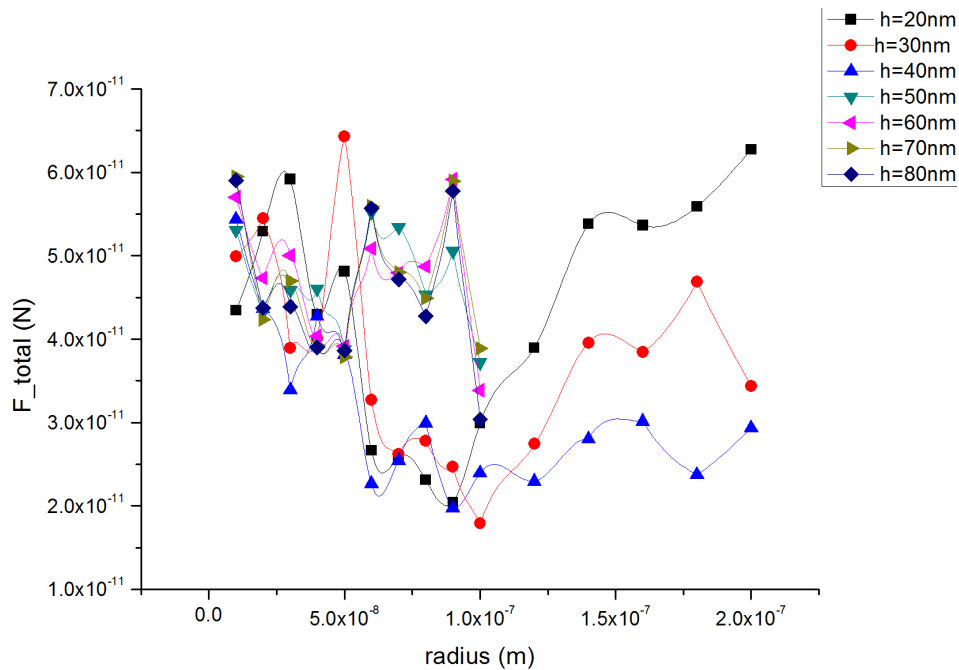


Σχήμα 4.39: Μοντέλο προσομοίωσης μεταλλικών πυλώνων

Μεταλλική νανοδομή με κενό 50nm μεταξύ των μεταλλικών πυλώνων

Αρχικά, όπως και στις προηγούμενες μοντελοποιήσεις, μεταβάλλαμε το μέγεθος των νανοσωματιδίων της νανοδομής, ώστε να βρούμε εκείνο το μέγεθος της δομής που ασκεί τη μέγιστη οπτική δύναμη πάνω στο σωματίδιο του πολυστυρενίου. Η μεταβολή έγινε στο ύψος και στην ακτίνα της βάσης των μεταλλικών πυλώνων, με εύρος 20nm-80nm και 10nm-200nm αντίστοιχα, και με βήμα 10nm και στις δύο περιπτώσεις. Το σωματίδιο του πολυστυρενίου βρισκόταν 10nm πάνω από το μέγιστο σημείο της νανοδομής,

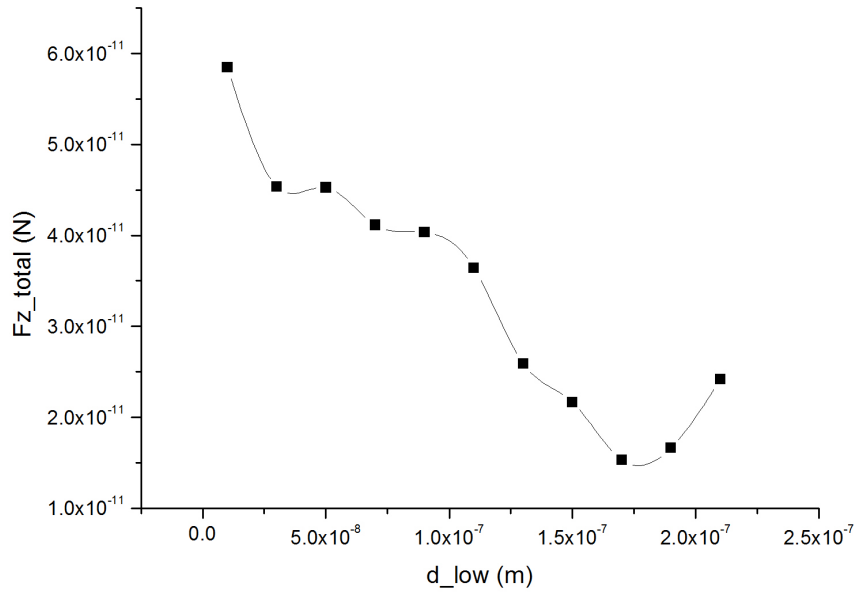
Τα αποτελέσματα αυτής της προσομοίωσης απεικονίζονται στο διάγραμμα που ακολουθεί. Παρατηρούμε ότι δύο μεγέθη των πυλώνων δίνουν την μέγιστη οπτική δύναμη, για $h = 20nm, r = 200nm$ και για $h = 30nm, r = 50nm$. Μοντελοποιούμε το πρόβλημά μας για κάθε ένα από αυτά τα μεγέθη, με σκοπό τον υπολογισμό των οπτικών δυνάμεων.



Σχήμα 4.40: Προσδιορισμός μεγέθους των μεταλλικών πυλώνων της νανοδομής

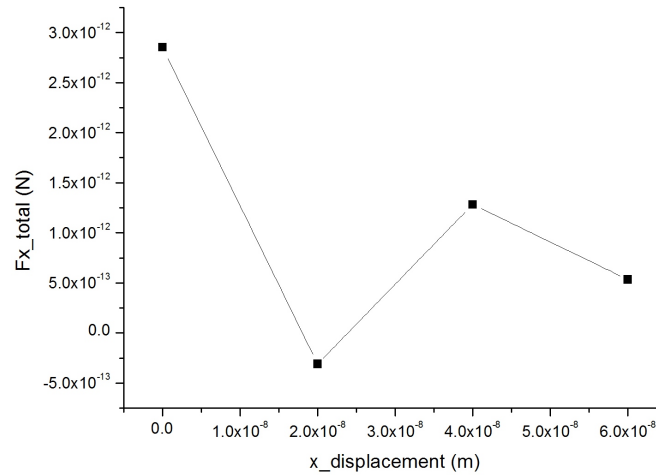
Νανοπυλώνες ύψους $h = 20nm$ και ακτίνας $r = 200nm$

Κατασκευάστηκε η μεταλλική νανοδομή με τα παραπάνω γεωμετρικά χαρακτηριστικά, αφού είδαμε ότι ήταν μία απο εκείνες που το επαγόμενο πλασμαονικό πεδίο ενίσχυε σε μεγάλο βαθμό την οπτική δύναμη. Στη συνέχεια, έγινε μεταβολή της θέσης του παγιδευμένου σωματιδίου κατά τον κατακόρυφο άξονα, ώστε να μελετηθεί η συμπεριφορά της ενίσχυσης που παίρνουμε λόγω διέγερσης του πλασμαονικού πεδίου. Η εμβέλεια του πεδίου παρουσιάζεται στο ακόλουθο διάγραμμα. Παρατηρείται μείωση του πεδίου κατά την απομάκρυνση του σωματιδίου από τη νανοδομή των μεταλλικών πυλώνων, ακόμα και από τα πρώτα 30nm, όπου είναι και εντονότερη με ρυθμό $6.55 \times 10^{-4} N/m$. Ο ρυθμός μείωσης της οπτικής δύναμης κατά την απομάκρυνση του σωματιδίου από τους πυλώνες, μετά τα 30nm, μειώνεται στα $2.25 \times 10^{-4} N/m$.



Σχήμα 4.41: Διάγραμμα οπτικής δύναμης F_z σε συνάρτηση με την απόσταση μεταξύ σωματιδίου-νανοδομής (d_{low})

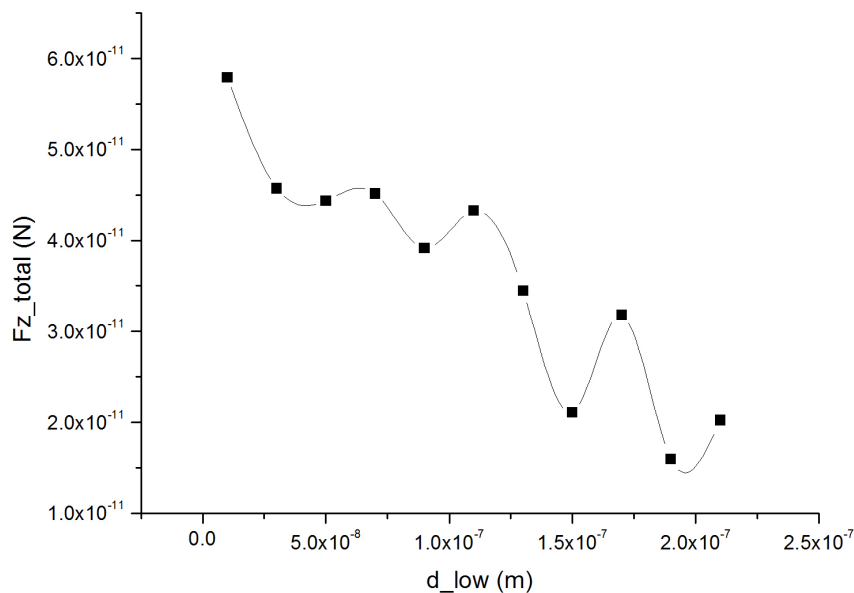
Στη συνέχεια, η μετατόπιση του σωματιδίου έγινε ως προς τον κεντρικό άξονα της δέσμης, και άρα αυτό μετατοπιζόταν κατά μήκος του άξονα x . Μια τέτοια μετατόπιση είχε σκοπό τον υπολογισμό της οπτικής δύναμης με τον τρόπο που γίνεται και στο εργαστήριο. Στην επόμενη γραφική παράσταση, η δύναμη φαίνεται να μειώνεται απότομα όταν το σωματίδιο βρεθεί στη θέση 20nm δεξιότερα της δέσμης. Αν παρατηρήσουμε όμως καλύτερα, βλέπουμε ότι παίρνει την τιμή $F_x = -3.10 \times 10^{-13} N$, η οποία είναι ασθενέστερη από εκείνη που ασκείται στο σωματίδιο στη θέση 0nm ($F_x = 2.85 \times 10^{-12} N$). Η διαφορά αυτών των τιμών υπολογίζεται στα $F_x = 2.54 \times 10^{-12} N$. Το κατώτατο σημείο του πολυστυρενίου, σε αυτή την προσομοίωση για την μέτρηση της F_x , απέχει 50nm από το ανώτατο σημείο της μεταλλικής νανοδομής (μήκος Debye).



Σχήμα 4.42: Διάγραμμα οπτικής δύναμης F_x ως προς την απομάκρυνση του σωματιδίου από τον άξονα της δέσμης

Νανοκυλίνδρους ύψους $h = 30nm$ και ακτίνας $r = 50nm$

Όσον αφορά το άλλο μέγεθος των μεταλλικών νανοκυλίνδρων, ισχύουν ακριβώς τα ίδια φαινόμενα, όπως φαίνεται από τα διαγράμματα που ακολουθούν. Όπως και πριν, έτσι και τώρα το σωματίδιο μετατοπίστηκε κατά τον άξονα z, για να προσδιοριστεί η εμβέλεια του πλάσμονικού πεδίου για αυτή τη νανοδομή, καθώς και κατά τον άξονα x, με σκοπό να μετρηθεί η ισχύς της οπτικής δύναμης.



Σχήμα 4.43: Διάγραμμα οπτικής δύναμης F_z σε συνάρτηση με την απόσταση μεταξύ σωματιδίου-νανοδομής (d_{low})

Από την επίλυση του προβλήματος μέσω των μοντέλων των προσομοιώσεων, έχουμε ότι στη θέση 40nm έχουμε αρνητική δύναμη, ενώ η διαφορά μεταξύ των δυνάμεων

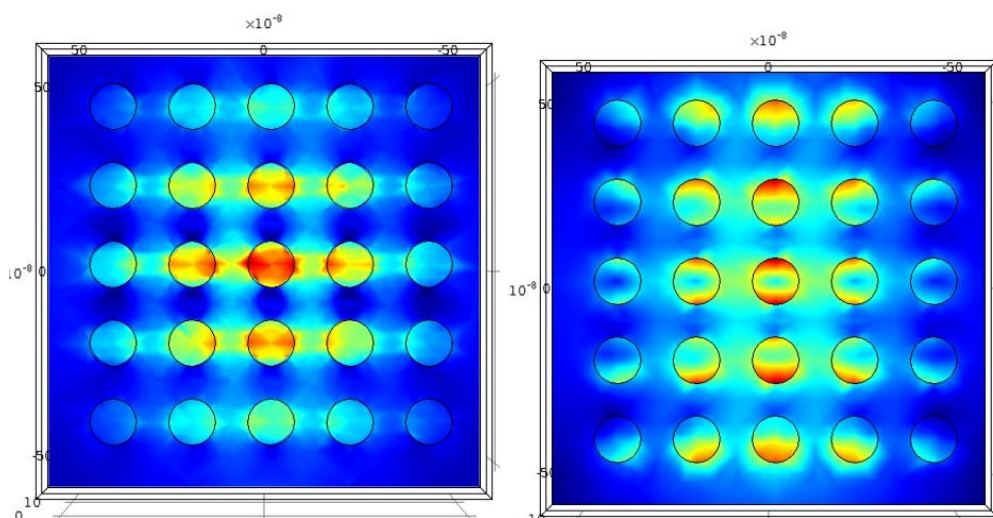
από τη θέση 0nm στη θέση 20nm, δεν είναι πολύ μεγάλη. Συγκεκριμένα, έχουμε:

$$F_x = 1.77 \times 10^{-12} N, \text{ στη θέση } 0\text{nm}$$

$$F_x = 2.47 \times 10^{-12} N, \text{ στη θέση } 20\text{nm}$$

$$F_x = -1.17 \times 10^{-13} N, \text{ στη θέση } 40\text{nm}$$

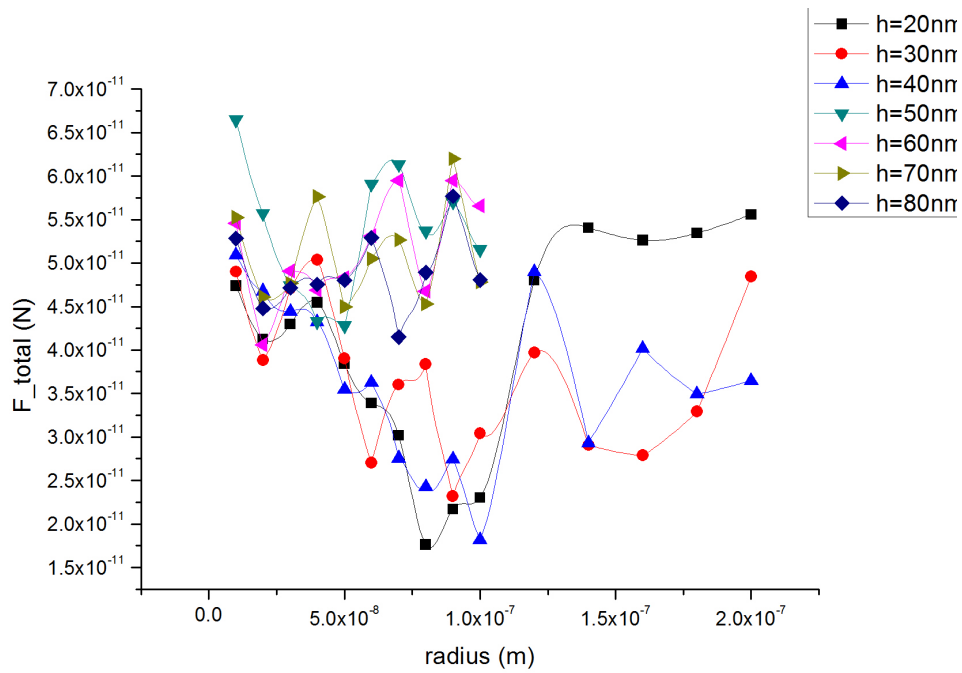
Όσον αφορά την εμβέλεια του πλασμονικού πεδίου στους πυλώνες με ύψους $h = 30\text{nm}$ και ακτίνας $r = 50\text{nm}$, για πολύ μικρές αποστάσεις η ασκούμενη οπτική δύναμη παίρνει τη μέγιστη τιμή, ενώ σε θέσεις πιο μακριά από την μεταλλική νανοδομή, η δύναμη μειώνεται. Και σε αυτή την περίπτωση, έχουμε απότομη αύξηση με ρυθμό $6.11 \times 10^{-4} N/m$ στα πρώτα 30nm, απόστασης μεταξύ σωματιδίου και πυλώνων.



Σχήμα 4.44: Κατανομή πεδίου στο μοντέλο των μεταλλικών πυλώνων, όταν $d_{\text{low}} = 10\text{nm}$
Αριστερά: Το πεδίο στο πάνω μέρος των πυλώνων Δεξιά: Το πεδίο στη βάση των πυλώνων

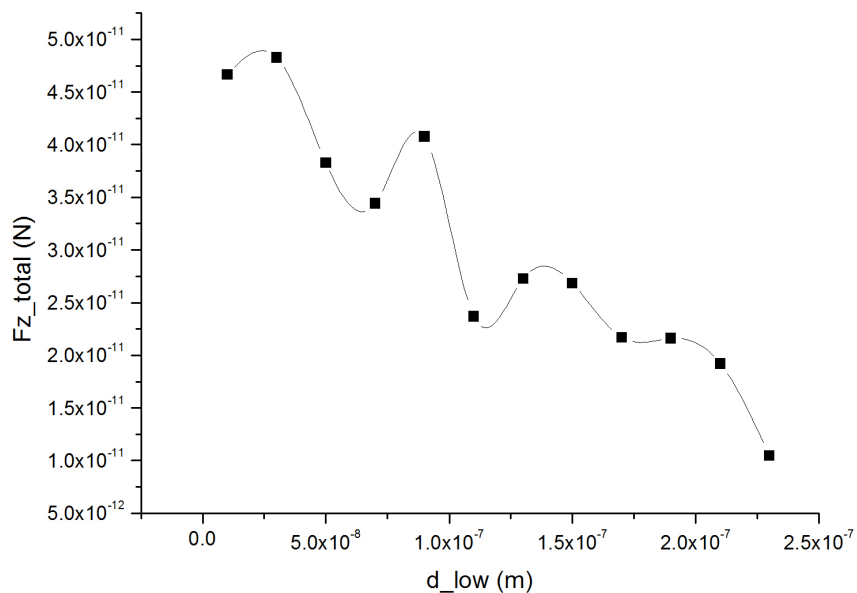
Μεταλλική νανοδομή με κενό 100nm μεταξύ των μεταλλικών πυλώνων

Για την ίδια γεωμετρία, μελετάμε την επίδραση που έχει το κενό μεταξύ των μεταλλικών νανοσωματιδίων στην ισχύ της οπτικής δύναμης. Αυξήσαμε την απόσταση μεταξύ των πυλώνων από 50nm σε 100nm και μεταβάλλαμε το μέγεθος των νανοσωματιδίων της νανοδομής. Η μεταβολή έγινε στο ύψος και στην ακτίνα της βάσης των μεταλλικών πυλώνων, με εύρος 20nm-80nm και 10nm-200nm αντίστοιχα, και με βήμα 10nm όπως ακριβώς και στην αμέσως προηγούμενη μελέτη. Το σωματίδιο του πολυστυρενίου βρισκόταν 10nm πάνω από το μέγιστο σημείο της νανοδομής, ώστε να υπολογιστεί ακόμα και η μικρότερη ενίσχυση του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου. Το μέγεθος των πυλώνων που είναι υπεύθυνο για την άσκηση της μέγιστης οπτικής δύναμης πάνω στο σωματίδιο είναι αυτό με ακτίνα $r = 10\text{nm}$ και ύψος $h = 50\text{nm}$.

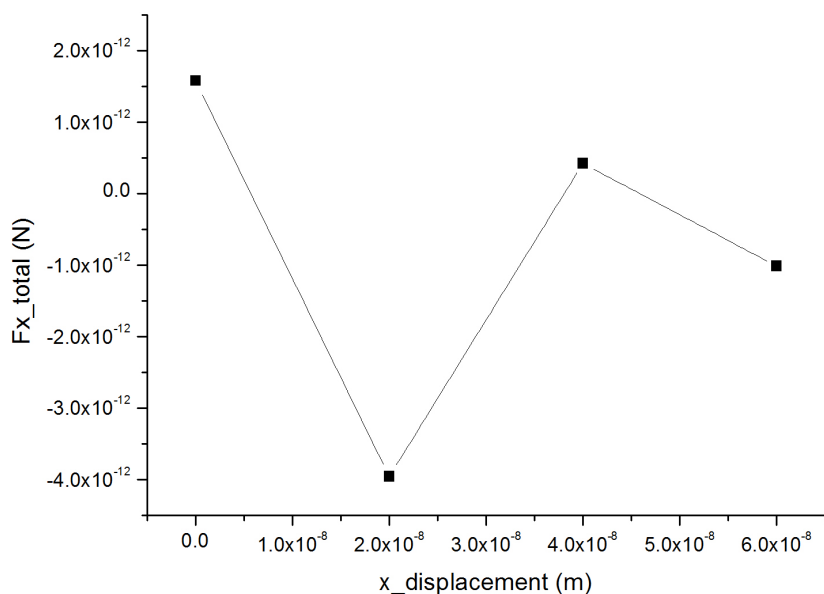


Σχήμα 4.45: Προσδιορισμός μεγέθους των μεταλλικών πυλώνων της νανοδομής

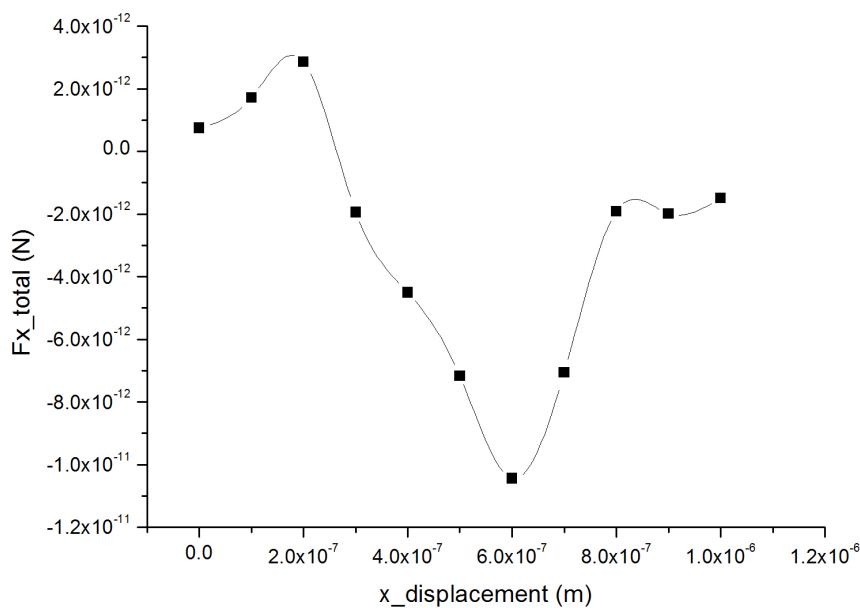
Κατασκευάσαμε ένα μοντέλο με τα παραπάνω χαρακτηριστικά, και αφού προσο-
μοιώσαμε τις μεταβολές της θέσης του σωματιδίου προς παγίδευση κατά τον άξονα z
και κατά τον άξονα x, όπως ακριβώς κάναμε και σε όλες τις παραπάνω περιπτώσεις,
λάβουμε τα παρακάτω αποτελέσματα.



Σχήμα 4.46: Γραφική παράσταση δύναμης-απόστασης σωματιδίου από τη νανοδομή, όταν οι πυλώνες
σηματίζουν κενό 100nm



Σχήμα 4.47: Γραφική παράσταση των οπτικών δυνάμεων, όταν η μετατόπιση του σωματιδίου έγινε κατά τον άξονα x, σε μικρές αποστάσεις

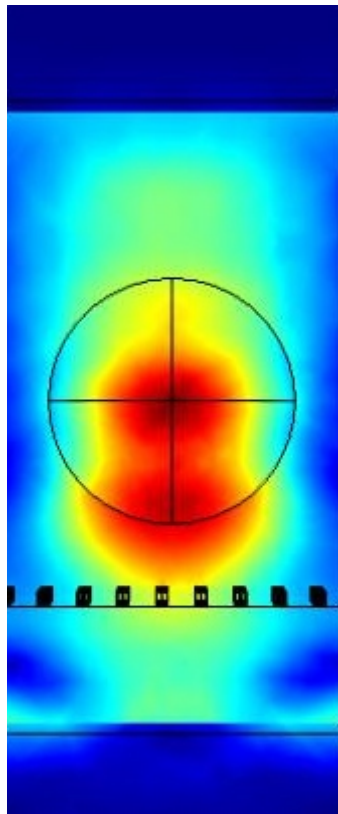


Σχήμα 4.48: Γραφική παράσταση των οπτικών δυνάμεων, όταν η μετατόπιση του σωματιδίου έγινε κατά τον άξονα x, σε μεγάλες αποστάσεις από τη δέσμη

Όσον αφορά το διάγραμμα δύναμης-απόστασης σωματιδίου από το υπόστρωμα, παρατηρούμε ότι η οπτική δύναμη μειώνεται όσο απομακρυνόμαστε από τους μεταλλικούς πυλώνες, αφού η διέγερση των πλασμονίων στην επιφάνεια του μετάλλου είναι ένα τοπικό φαινόμενο και τα αποτελέσματά του είναι ορατά σε τοπικά, κοντά στην

επιφάνεια των μετάλλων. Αυτό που έχει σημασία σε αυτή τη γεωμετρία, όσον αφορά την εμβέλεια του πλασμονικού πεδίου, είναι ότι η μείωση που παρατηρείται είναι, στο σύνολό της, γραμμική ενώ κάποιες μικρές διακυμάνσεις που εμφανίζονται στο γράφημα, οφείλονται σε υπολογιστικά σφάλματα κατά την προσομοίωση. Βλέπουμε μία εντονότερη μείωση της δύναμης μεταξύ των τιμών 90nm και 110nm της ποσότητας d_{low} , όμως στο σύνολο το πεδίο φαίνεται να φθίνει γραμμικά. Επιπλέον, συγκρίνοντας την απόλυτη τιμή των δυνάμεων όταν το κενό μεταξύ των πυλώνων είναι 100nm, με τις αντίστοιχες τιμές όταν το κενό είναι 50nm, παρατηρούμε ότι όταν η απόσταση είναι μεγαλύτερη, οι τιμές των οπτικών δυνάμεων είναι μειωμένες κατά 1 μονάδα περίπου. Αυτή η μείωση μπορεί να θεωρηθεί αμελητέα.

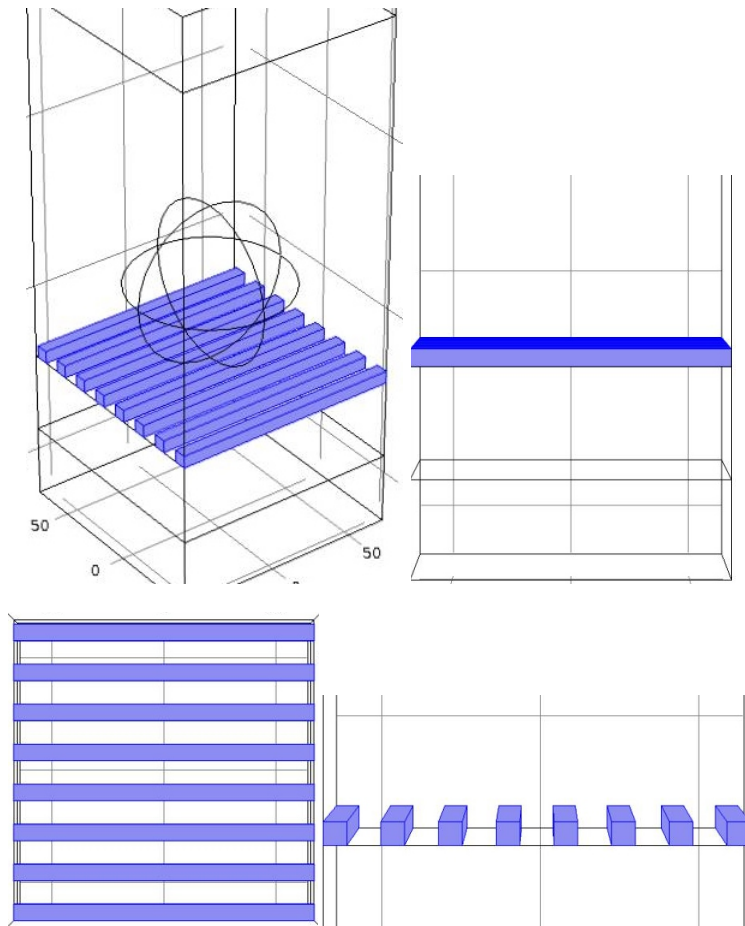
Κατά τη μετατόπιση του σωματιδίου κατά μήκος του άξονα x, σε μικρές αποστάσεις από τον κεντρικό άξονα της δέσμης του laser, στο διάγραμμα φαίνεται μια πολύ απότομη πτώση στη θέση 20nm. Στην πραγματικότητα είναι μια αρνητική τιμή της οπτικής δύναμης, με κάπως μεγάλη απόλυτη τιμή. Η τιμή της δύναμης στη θέση 20nm είναι: $F_x = -3.956 \times 10^{-12} N$. Ωστόσο, η μετατόπιση αυτού του είδους, σε μεγάλες αποστάσεις μακριά από τη δέσμη, εξασθενεί την οπτική δύναμη, η έντασης της δύναμης όλο και μειώνεται ώσπου εξασθενεί τόσο που γίνεται αμελητέα. Οι θετικές τιμές της οπτικής δύναμης, στο διάγραμμα της συνιστώσας F_x της δύναμης, όπου η μετατόπιση του σωματιδίου γίνεται σε μεγάλες αποστάσεις, οφείλονται σε υπολογιστικά σφάλματα, αφού σε αυτή την προσομοίωση αλλάξαμε το εύρος τιμών της απόστασης μακριά από τον οπτικό άξονα.



Σχήμα 4.49: Αναπαράσταση του πεδίου της νανοδομής στα $d_{low}=230\text{nm}$

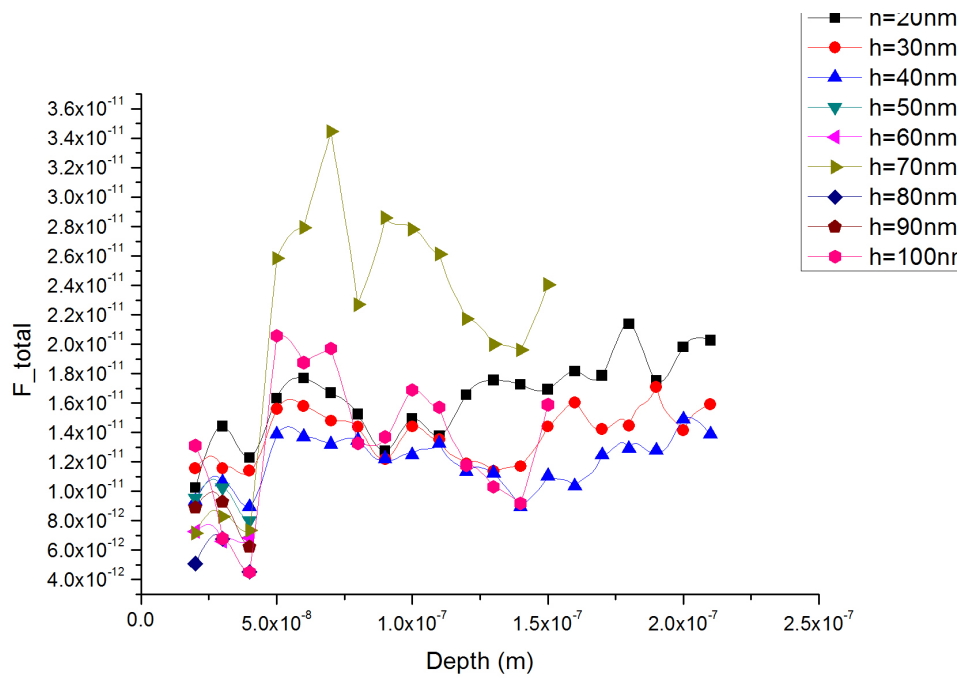
4.6.6 Προσομοίωση νανοδομής αποτελούμενης από μεταλλικά σύρματα ορθογώνιας διατομής

Μία ακόμη γεωμετρία που μελετήθηκε ως προς την ενίσχυση της οπτικής δύναμης, είναι τα νανοσύρματα ορθογώνιας διατομής (nanowires). Αυτές οι μεταλλικές νανοδομές έχουν μία διάσταση σε όλη την έκταση του υποστρώματος ενώ οι άλλες δύο διαστάσεις (το πλάτος και το ύψος του) είναι στην κλίμακα των νανομέτρων



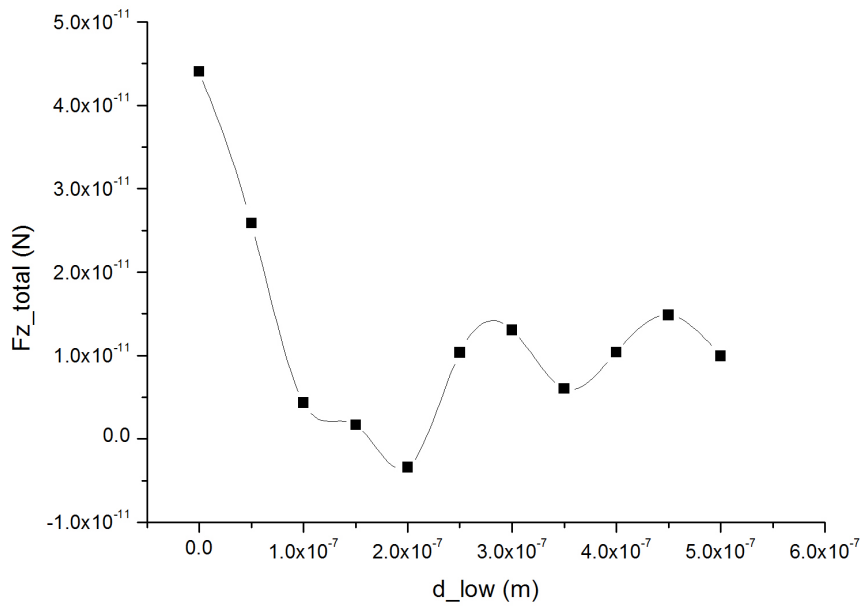
Σχήμα 4.50: Μοντέλο προσομοίωσης μεταλλικών συρμάτων ορθογώνιας διατομής (nanowire)

Αρχικά, μετρήσαμε την οπτική δύναμη πάνω στο σωματίδιο του πολυστυρενίου όταν το κατώτατό του σημείο απείχε 10nm από το ανώτερο σημείο της νανοδομής, για κάθε διαφορετικό μέγεθος των νανοσυρμάτων. Η μεταβολή έγινε στο ύψος και το πλάτος του, με εύρος 20nm-100nm και 10nm-210nm αντίστοιχα, με βήμα 10nm, και πήραμε όλους τους πιθανούς συνδιασμούς. Το μέγεθος της νανοδομής για αυτή τη γεωμετρία, που επάγει τη μέγιστη οπτική δύναμη στο σωματίδιο, είναι εκείνο με ύψος $h = 70\text{nm}$ και ακτίνα $r = 60\text{nm}$. Το κενό μεταξύ των νανοσυρμάτων είναι 100nm.



Σχήμα 4.51: Προσδιορισμός μεγέθους των μεταλλικών συρμάτων της νανοδομής

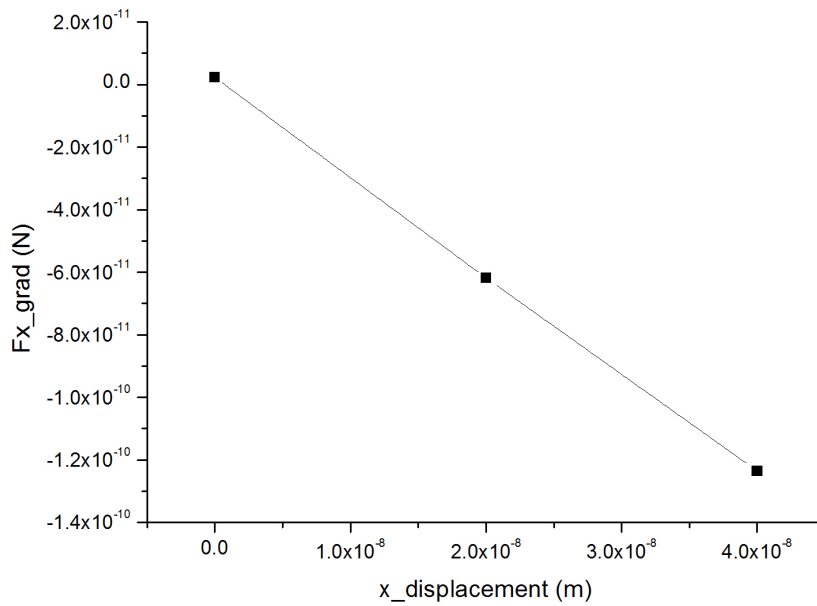
Το διάγραμμα που ακολουθεί παρουσιάζει οπτικής δύναμης F_z σε συνάρτηση με την πόσότητα d_{low} , δηλαδή την απόσταση μεταξύ σωματιδίου-νανοδομής. Παρατηρούμε ότι για μικρές απόστάσεις, η οπτική δύναμη παίρνει τη μέγιστη τιμή της, κάτι το οποίο συνεπάγεται σε μέγιστη ενίσχυση του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου λόγω των δημιουργίας πλάσμονίων. Η δύναμη μειώνεται έντονα στα πρώτα 100nm, με ρυθμό $-3.97 \times 10^{-4} N/m$, ενώ για μεγαλύτερα ύψη πάνω από τη μεταλλική νανοδομή βλέπουμε η δύναμη να κυμαίνεται γύρω από συγκεκριμένη τιμή.



Σχήμα 4.52: Διάγραμμα οπτικής δύναμης F_z σε συνάρτηση με την πόσσητα d_{low} , δηλαδή την απόσταση μεταξύ σωματιδίου-νανοδομής

Έπειτα μοντελοποιήθηκε η κίνηση του σωματιδίου κατά μήκος του άξονα x και για μικρές μετατοπίσεις μακριά από τον άξονα της ακτινοβολίας, με σκοπό την προσέγγιση του υπολογισμού της δύναμης όπως γίνεται στο εργαστήριο. Από τα αποτελέσματα αυτής της προσομοίωσης, για τη συγκεκριμένη μεταλλική νανοδομή, υπολογίστηκε η συνιστώσα F_x της συνολικής οπτικής δύναμης. Υπολογίσαμε τη διαφορά των δυνάμεων μεταξύ των θέσεων 0nm και 20nm, όταν δηλαδή το σωματίδιο του πολυστυρενίου βρίσκεται μέσα στη δέσμη και ελαφρά μετατοπισμένο από αυτή. Η οπτική δύναμη που προκύπτει από τις προσομοιώσεις αυτού του μοντέλου είναι $F_x = 1.14 \times 10^{-13} N$. Το κατώτατο σημείο της περιφέρειας του σωματιδίου προς παγίδευση απείχε 50nm από το ανώτερο σημείο των μεταλλικών νανοσυρμάτων, μια απόσταση που αντιστοιχεί στο μήκος Debye, ένα τυπικό μήκος στο οποίο υφίσταται οι ηλεκτροστατικές αλληλεπιδράσεις.

Παραπάνω παρουσιάζεται το διάγραμμα της δύναμης βαθμίδας, όπου είναι εμφανής η μορφή της δύναμης επαναφοράς που έχει η δύναμη βαθμίδας. Για αρκετά μικρές μετατοπίσεις από τον οπτικό άξονα, παρατηρούμε ότι η δύναμη βαθμίδας ασκείται αντίθετα στην μετατόπιση που επιβάλλουμε στο σωματίδιο μέσω της προσομοίωσης, προσπαθώντας να το επαναφέρει στην αρχική του θέση. Η κλίση της ευθείας, που αντιστοιχεί στο συντελεστή ακαμψίας της οπτικής παγίδας, για τη συγκεκριμένη μεταλλική νανοδομή, υπολογίζεται πως είναι $k = (-3.15 \pm 0.04) \times 10^{-3} N/m$. Αυτό θα ισχύει για όσο η ακτινοβολία επιδρά πάνω στο σωματίδιο. Στην περίπτωση μετακίνησής του σε μεγάλες απόστάσεις, η ακτινοβολία θα σταματούσε να επιδρά πάνω του, με αποτέλεσμα η δύναμη βαθμίδας να μην είναι αρκετή ώστε να το επαναφέρει στο σημείο παγίδευσής του. Στο μοντέλο που μελετήθηκε, η απόσταση μεταξύ σωματιδίου



Σχήμα 4.53: Διάγραμμα της δύναμης βαθμίδας F_{x-grad} όταν το πολυστυρένιο μετακινείται κατά τον άξονα x

και νανοδομής ήταν 50nm.

4.7 Συμπεράσματα τρισδιάστατων προσομοιώσεων

Γενικά, από τις τρισδιάστατες προσομοιώσεις, μπορούμε να συμπεράνουμε ότι οι περιοδικές μεταλλικές νανοδομές επιδρούν ενισχυτικά στη συνολική οπτική δύναμη του παγιδευμένου σωματιδίου, παρόλο που το μέγεθος του πολυστυρενίου είναι πολύ μεγαλύτερο συγκριτικά με τις διαστάσεις των μεταλλικών νανოსωματιδίων στην κάθε νανοδομή. Πιο συγκεκριμένα, για το σωματίδιο του πολυστυρενίου με διάμετρο 900nm, φαίνεται ότι μόνο συγκεκριμένες μεταλλικές νανοδομές ενισχύουν το πεδίο σε τέτοιο βαθμό ώστε να μπορεί να γίνει αντιληπτό από το πολυστυρένιο. Τόσο το μέγεθος όσο και η γεωμετρία της μεταλλικής νανοδομής, για ένα συγκεκριμένο υλικό, φαίνεται ότι παίζουν ρόλο στο βαθμό αύξησης της οπτικής δύναμης. Ακόμη, μικρότερο σωματίδιο προς παγίδευση, ίσως 'αισθανόταν' μεγαλύτερη ενίσχυση του τοπικού πεδίου, κάτω από τις ίδιες συνθήκες και χρησιμοποιώντας τις ίδιες νανοδομές. Παρατηρούμε, επίσης, ότι είναι σημαντικό να επιτευχθεί ο συντονισμός πλασμονίων, για τη μέγιστη αύξηση του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου. Από τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων, βλέπουμε ότι η δομή των σφαιρικών φλοιών με γυαλί στο εσωτερικό τους αυξάνει την οπτική δύναμη 2-3 τάξεις μεγέθους, σε σχέση με τις άλλες νανοδομές που μελετήθηκαν. Αυτή η τόσο μεγάλη διαφορά οφείλεται στο γεγονός ότι το μήκος κύματος της ακτινοβολίας laser που χρησιμοποιούμε (1064nm) στο πρόβλημά μας, μπορεί να διεγείρει ένα πλασμονικό πεδίο, μόνο για τη νανοδομή των σφαιρικών φλοιών και γε-

νικότερα νανοφλοιούς, ενώ αποτυγχάνει να δημιουργήσει πλασμόνια όταν προσπίπτει σε συμπαγείς μεταλλικές δομές.

Επιπλέον, είδαμε ότι η εμβέλεια του πλασμονικού πεδίου φτάνει σε ύψος περίπου μέχρι τα 40nm-50nm, ενώ μετά από τα 50nm φαινόταν, από τη μέτρηση της οπτικής δύναμης, ότι το πλασμονικό πεδίο είχε εξασθενήσει σε μεγάλο βαθμό. Για μεγαλύτερα ύψη, η εξασθένισή του συνέχιζε και φαινόταν να έχει γραμμική μορφή. Αυτή η συμπεριφορά ήταν κοινή για κάθε νανοδομή που μελετήθηκε μέσω του τρισδιάστατου μοντέλου.

Επιπλέον, όσον αφορά την μετατόπιση του σωματίδιου μακριά από τον κεντρικό άξονα της δέσμης του laser κατά τον άξονα x, παρατηρούσαμε ότι η δύναμη συμπεριφερόταν σαν δύναμη επαναφοράς, για μικρές μετατοπίσεις, ενώ για μεγάλες μετατοπίσεις του σωματιδίου μακριά από τον κεντρικό άξονα της δέσμης, η οπτική δύναμη εξασθενούσε. Κάτι τέτοιο έχει νόημα αφού όταν το σωματίδιο μεταφερθεί σε μια θέση κοντά στον άξονα της δέσμης, η ακτινοβολία συνεχίζει να του ασκεί τάσεις και δυνάμεις, με αποτέλεσμα να προσπαθεί να επαναφέρει το σωματίδιο στην προηγούμενη του θέση. Όταν όμως το σωματίδιο απομακρυνόταν πολύ, η ακτινοβολία δεν είχε έντονη επίδραση πάνω του, με αποτέλεσμα να μην μπορεί να το επαναφέρει πίσω στη θέση του. Η συμπεριφορά αυτή παρουσιάζοταν σε κάθε νανοδομή που μελετήθηκε, ωστόσο φαίνεται να έχουμε και κάποια υπολογιστικά σφάλματα στις μετρούμενες τιμές. Στον πίνακα που ακολουθεί καταγράφονται οι τιμές των δυνάμεων καθώς και ο συντελεστής Q της παγίδας, για κάθε νανοδομή.

Γεωμετρία νανοδομής	Διαφορά δυνάμεων (ΔF_x) [pN]	Συντελεστής Q
Γυαλί BK7	0.577	2.89×10^{-5}
Σφαίρες ακτίνας 30nm, κενό 50nm	1.580	7.90×10^{-5}
Σφαίρες ακτίνας 260nm, κενό 50nm	1.290	6.45×10^{-5}
Σφαιρικοί φλοιοί με γυαλί, πάχους 37,5nm, ακτίνας 250nm	192.0	9.60×10^{-3}
Κώνοι ύψους 20nm, ακτίνας 60nm, κενό 50nm	1.94	9.70×10^{-5}
Κώνοι ύψους 70nm, ακτίνας 70nm, κενό 100nm	0.260	1.3×10^{-5}
Κώνοι ύψους 900nm, ακτίνας 450nm	0.239	1.20×10^{-5}
Πυλώνες ύψους 20nm, ακτίνας 200nm, κενό 50nm	2.540	1.27×10^{-4}
Πυλώνες ύψους 30nm, ακτίνας 50nm, κενό 50nm	0.700	3.50×10^{-5}
Πυλώνες ύψους 70nm, ακτίνας 10nm, κενό 100nm	2.372	1.19×10^{-4}
Σύρμα ύψους 70nm, πλάτους 70nm, κενό 100nm	0.114	5.70×10^{-6}

Πίνακας 4.3

Η μετατόπιση έγινε από τη θέση 0nm στη θέση 20nm. Ήταν αναγκαίο να μετρήσουμε τη διαφορά της δύναμης, επειδή στις πειραματικές μετρήσεις η δύναμη που μετράται με τη μέθοδο της διαφυγής είναι εκείνη για την οποία το σωματίδιο ξεφεύγει από την παγίδα. Ουσιαστικά, η μετρούμενη δύναμη αντιστοιχεί στη διαφορά μεταξύ της θέσης παγίδευσης και της θέσης που φτάνει μετά τη μετατόπιση.

Κεφάλαιο 5

Τρισδιάστατες Προσομοιώσεις με χρήση της μεθόδου Πεπερασμένων Διαφορών στο Πεδίο του Χρόνου (finite-difference time-domain, FDTD)

Σε αυτή τη διπλωματική εργασία, πέρα από τις διδιάστατες και τριδιάστατες προσομοιώσεις μέσω του υπολογιστικού λογισμικού COMSOL Multiphysics,^[34] έγινε μια προσπάθεια εφαρμογής της μεθόδου πεπερασμένων διαφορών στο πεδίο του χρόνου (finite-difference time-domain, FDTD)^[50,51]. Η μέθοδος FDTD, όπως καλείται για συντομία, είναι μια υπολογιστική μέθοδος, η οποία υπολογίζει τις εξισώσεις του Maxwell στη διαφορική τους μορφή, στο πεδίο του χρόνου. Αυτή η μέθοδος υπολογισμού των εξισώσεων του Maxwell στηρίζεται δίνει τη δυνατότητα υπολογισμού της διαφοράς μεταξύ δύο τιμών που αποτελούν λύση των εξισώσεων. Η μέθοδος FDTD είναι μια αρκετά διαδεδομένη μέθοδος για την προσομοίωση και τον υπολογισμό προβλημάτων ηλεκτρομαγνητισμού. Εφαρμόζεται με τη βοήθεια οποιουδήποτε προγραμματιστικού κώδικα, συνήθως χρησιμοποιείται οι γλώσσες προγραμματισμού Fortran και C++, παρέχοντας τη δυνατότητα αξιόπιστων υπολογισμών, ακόμα και τη μοντελοποίηση περίπλοκων μοντέλων, σε προβλήματα ηλεκτρομαγνητισμού.

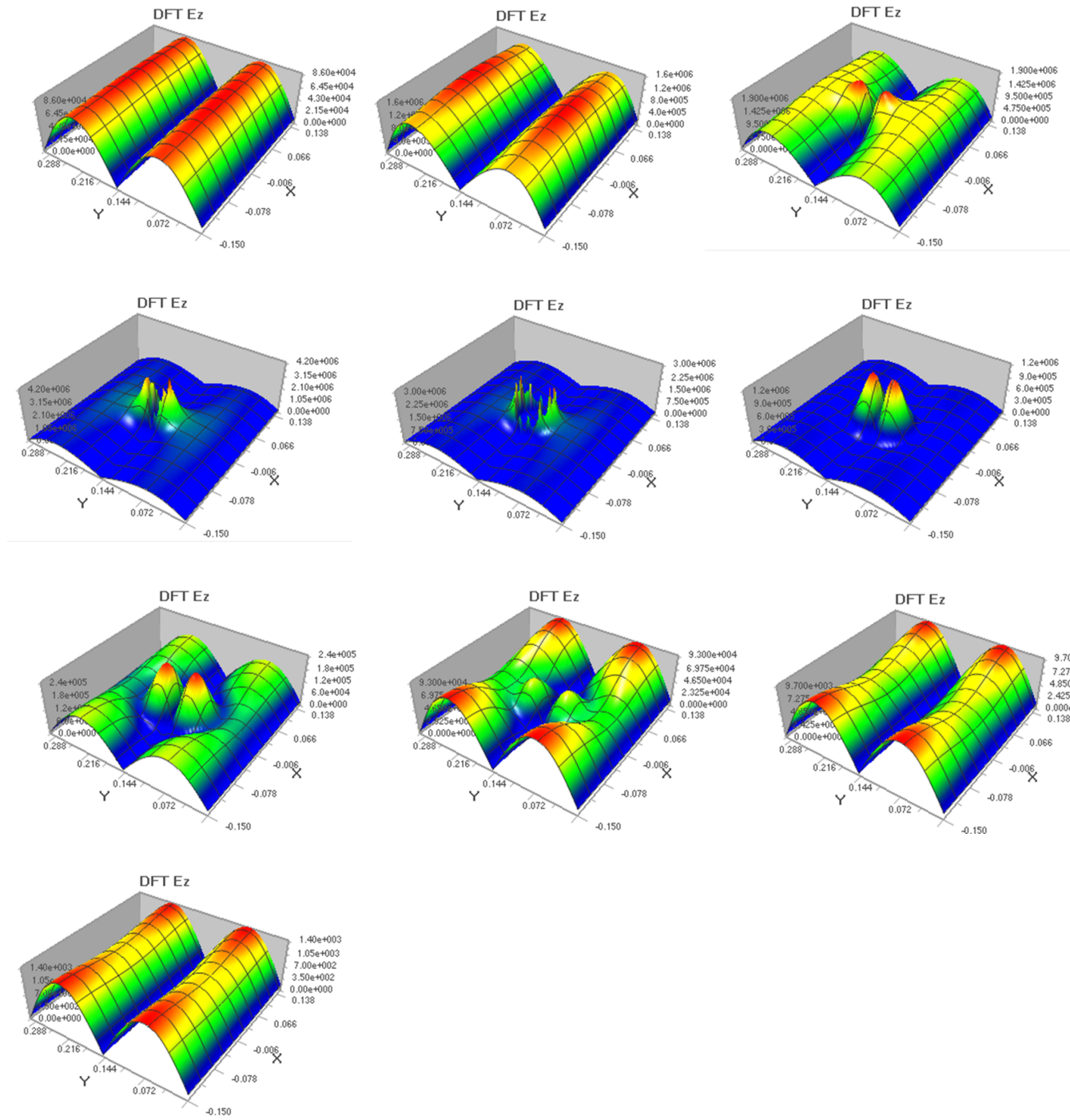
Στην παρούσα διπλωματική εργασία, η μέθοδος FDTD εφαρμόστηκε μέσω μίας έτοιμης πλατφόρμας, η οποία διατίθεται δωρεάν στο διαδίκτυο από την εταιρία Optiwave^[52]. Αυτό το πρόγραμμα προσομοίωσης έχει κάποιους περιορισμούς, ωστόσο μπορεί να δώσει ποιοτικά αποτελέσματα για τη μελέτη και την κατανόηση τόσο του φαινομένου της οπτικής παγίδευσης όσο και του φαινομένου της διέγερσης του πλασματικού πεδίου. Δεν κατασκευάστηκε κώδικας με τη μέθοδο FDTD. Το πρόγραμμα προσομοίωσης FDTD Optiwave^[53] περιελάμβανε ένα παράθυρο σχεδιασμού του μοντέλου (de-

signer) και προσδιορισμού των παραμέτρων του προβλήματος (προσδιορισμός υλικών, παραμέτρων δέσμης, οριακές συνθήκες μοντελοποίησης), καθώς και ένα παράθυρο ανάλυσης των δεδομένων (analyzer) από τον υπολογισμό της μοντελοποίησης. Κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης, ο χρήστης έχει τη δυνατότητα να παρακολουθεί την ένταση του ηλεκτρικού όσο και του μαγνητικού πεδίου, καθώς η προσομοίωση προχωράει με το χρόνο. Επίσης, μπορεί να επιλέξει τα διάφορα επίπεδα από τα οποία θα παρακολουθεί την εξέλιξη της προσομοίωσης.

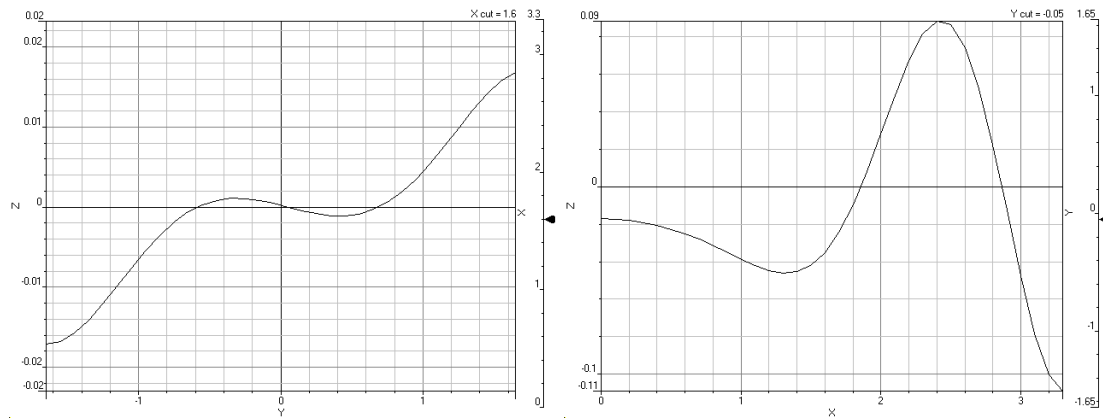
Σκοπός της χρήσης της μεθόδου FDTD για την προσομοίωση του προβλήματος της οπτικής παγίδευσης και των πλασμονίων, ήταν αρχικά η επιβεβαίωση των υπολογιστικών αποτελεσμάτων που έδινε το λογισμικό COMSOL Multiphysics. Όμως, λόγω των περιορισμών που παρουσιάστηκαν στο συγκεκριμένο λογισμικό προσομοίωσης, δεν ήταν δυνατή η απόλυτη ταυτοποίηση του προβλήματος στα δύο υπολογιστικά προγράμματα. Τα κυριότερα προβλήματα αφορούν τη γεωμετρία καθώς και το γεγονός ότι η έτοιμη πλατφόρμα δεν άφηνε περιθώρια για κατασκευή απαιτητικών και περίπλοκων μοντέλων, από γεωμετρική άποψη. Το λογισμικό προσομοίωσης μοντέλων ηλεκτρομαγνητισμού με τη μέθοδο FDTD δεν είχε την ποικιλία των γεωμετρικών σχημάτων που έδινε το COMSOL Multiphysics, ούτε την ευχέρεια να δώσουμε εμείς εντολές για την κατασκευή τους. Εξαιτίας τέτοιου είδους περιορισμών, έγιναν προσομοιώσεις σε πιο απλουστευμένες γεωμετρίες, ενώ τα δύο φαινόμενα, της οπτικής παγίδευσης και των πλασμονίων, μοντελοποιήθηκαν ξεχωριστά. Με αυτό τον τρόπο, αναπτύξαμε μια επιπρόσθετη μέθοδο προσομοίωσης που δίνει κάποια συμπληρωματικά στοιχεία στην προηγούμενη μελέτη.

5.1 Προσομοίωση φαινομένου οπτικής παγίδευσης, με τη χρήση της μεθόδου FDTD

Έγινε προσπάθεια να μοντελοποιηθεί το φαινόμενο της οπτικής παγίδευσης με τη χρήση της υπολογιστικής μεθόδου FDTD, μέσω μιας έτοιμης πλατφόρμας (FDTD Optiwave)^[53]. Το σωματίδιο προς παγίδευση ήταν ένα σωματίδιο πολυστυρενίου ακτίνα 450nm και δείκτη διάθλασης 1.57^[26], το οποίο βρισκόταν σε υδάτινο περιβάλλον ($n = 1.33$). Δεν υπήρχε μεταλλική νανοδομή και άρα αυτή η μελέτη αφορά την απλή οπτική παγίδευση. Λόγω της φύσης του προγράμματος προσομοίωσης ήταν δύσκολο να κατασκευαστεί μια τόσο περίπλοκη γεωμετρία όσο εκείνη στο πρόγραμμα COMSOL Multiphysics, με αποτέλεσμα να μην εισάγουμε το φαινόμενο της διέγερσης πλασμονίων επιφανείας σε αυτό το στάδιο της μοντελοποίησης. Αυτό το πρόγραμμα προσομοίωσης, δίνει τη δυνατότητα παρατήρησης του φαινομένου με το πέρασμα του χρόνου, ενώ μπορούμε, μετά το τέλος της προσομοίωσης του μοντέλου, να εξάγουμε στιγμιότυπα για το ηλεκτρικό πεδίο, σε διάφορες θέσεις του μοντέλου, όπως φαίνεται παρακάτω



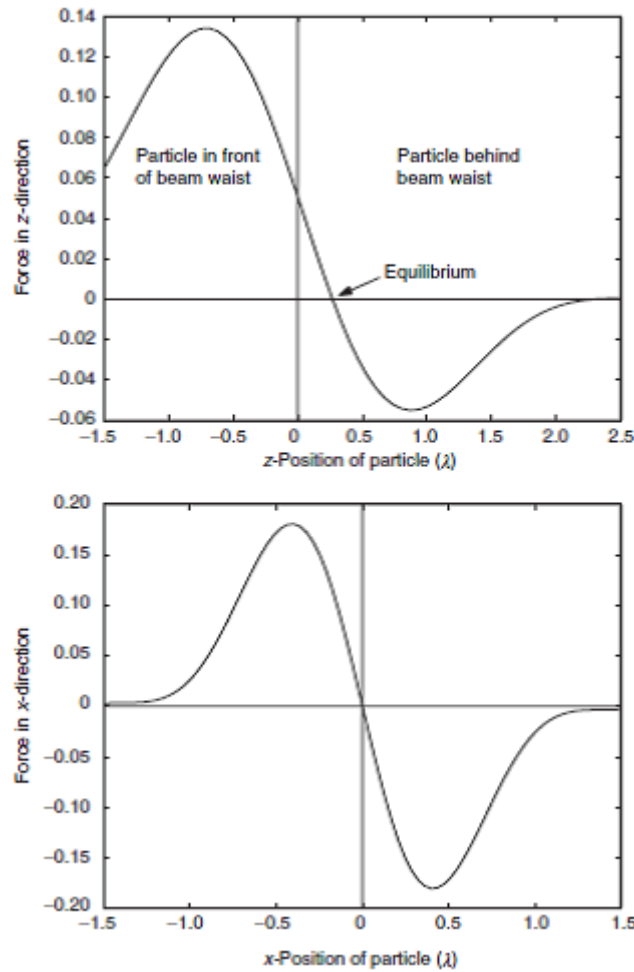
Σχήμα 5.1: Στιγμιότυπα της συνιστώσας E_z του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου, από την προσομοίωση συμβατής οπτικής παγίδευσης για το σωματίδιο του πολυστυρενίου. Η θέσεις απεικόνισης του πεδίου είναι: 0nm, 150nm, 264nm, 276nm, 300nm, 344nm, 368nm, 400nm, 500nm και 600nm.



Σχήμα 5.2: Διαγράμματα E_x και E_z (αριστερά και δεξιά αντίστοιχα) στο σωματίδιο του πολυστυρενίου

Και στα παραπάνω διαγράμματα η δέση του laser έχει κατεύθυνση από τα δεξιά προς τα αριστερά, όπως δείχνει το βέλος δεξιά κάθε εικόνας. Δεν υπήρχε η δυνατότητα περιστροφής των διαγραμμάτων.

Από τα παραπάνω διαγράμματα, μπορούμε να παρατηρήσουμε τη συμπεριφορά του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου κατά το φαινόμενο της οπτικής παγίδευσης. Βλέπουμε ότι κατά τον άξονα x , γύρω από το σφαιρικό σωματίδιο του πολυστυρενίου, το πεδίο E_x παρουσιάζει μια μορφή, η οποία μπορεί να ακινητοποιήσει το σωματίδιο σε αυτόν τον άξονα. Επίσης, η κυματική μορφή του πεδίου στον άξονα z παρουσιάζει ομοιότητες με την οπτική δύναμη. Το E_z δεν είναι συμμετρικό γύρω από την περιοχή όπου βρίσκεται το σωματίδιο, όπως ακριβώς συμβαίνει στην οπτική δύναμη κατά τον άξονα z , στη συμβατική οπτική παγίδευση^[1]



Σχήμα 5.3: Οπτικές δυνάμεις κατά τον άξονα z και x, στη θεωρία της οπτικής παγίδευσης^[1]

Στη συνέχεια, παρουσιάζεται το διάνυσμα Poynting υπολογισμένο με τη μέθοδο FDTD, σε όλο το χώρο της προσομοίωσης. Το διάνυσμα Poynting είναι ένας δείκτης της ενέργειας του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου και ορίζεται ως:

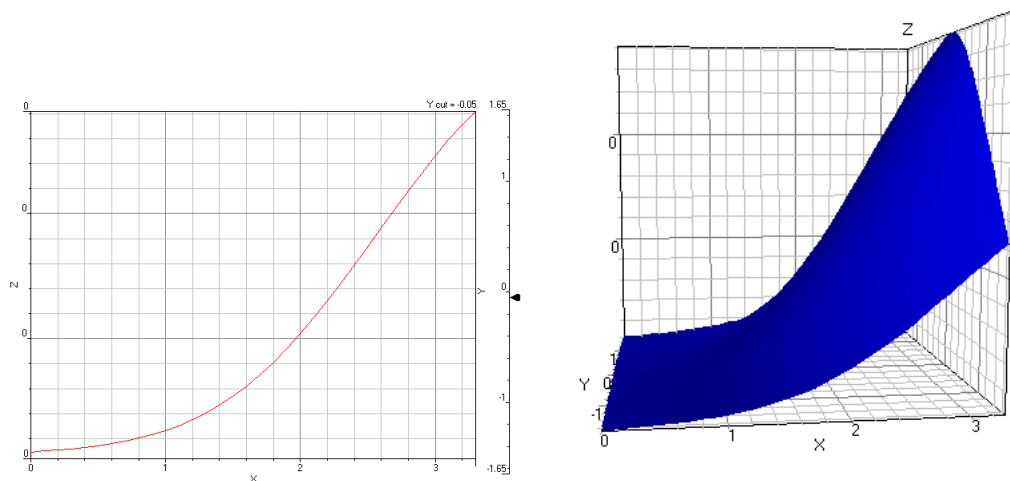
$$\vec{S} = \frac{1}{2} \vec{E} \times \vec{H}$$

με E το ηλεκτρικό πεδίο και H το μαγνητικό πεδίο της ακτινοβολίας. Μέσω της διαφοράς του διανύσματος Poynting σε δύο περιοχές, πριν και μετά την πρόσπτωση της ακτινοβολίας στο σωματίδιο, μπορεί να υπολογιστεί η συνολική οπτική δύναμη που ασκείται στο σωματίδιο. Η σχέση για αυτό τον υπολογισμό είναι η εξής:

$$F = \frac{n}{c} \iint \Delta S * dA$$

με ΔS η διαφορά στη ροή της ενέργειας (διαφορά στο διάνυσμα Poynting) μεταξύ της περιοχής πριν και μετά το σωματίδιο, n δείκτης διάθλασης του σωματιδίου και c η ταχύτητα του φωτός. Η ολοκλήρωση γίνεται σε όλη την επιφάνεια του παγιδευμένου σωματιδίου. Το διάνυσμα Poynting μπορεί να υπολογίσει την ορμή που μεταφέρεται από τα φωτόνια της δέσμης του laser στο σωματίδιο που θέλουμε να παγιδεύσουμε, και άρα να μας δώσει τη συνολική οπτική δύναμη.

Στη δική μας προσομοίωση, δεν ήταν δυνατός ένας τέτοιος υπολογισμός επειδή δεν μπορούσαμε να ορίσουμε μια περιοχή γύρω από το σωματίδιο του πολυστυρενίου, από την οποία θα μπορούσε να ανακτήσουμε την τιμή του του διάνυσματος Poynting, με σκοπό τον προσδιορισμό της οπτικής δύναμης. Παρόλα αυτά, το λογισμικό προσομοίωσης OptiWave FDTD^[53], υπολογίζει το διάνυσμα Poynting σε όλο το χώρο της προσομοίωσης, με τα αποτελέσματα αυτού του υπολογισμού να απεικονίζονται στο παρακάτω διάγραμμα.

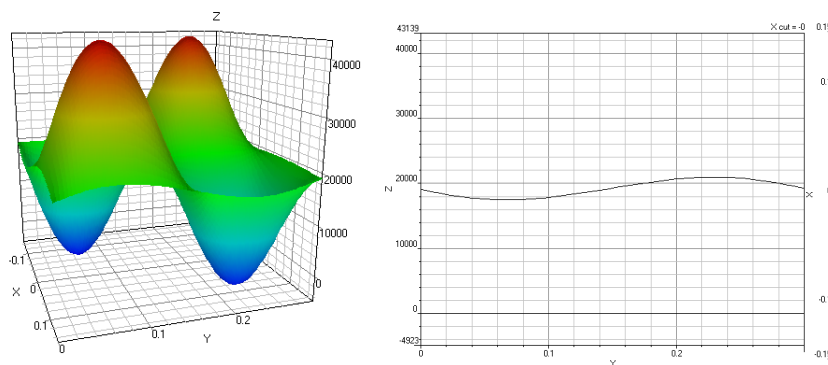


Σχήμα 5.4: Γράφημα διανύσματος Poynting στην κλασική οπτική παγίδευση, υπολογισμένο με τη μέθοδο FDTD

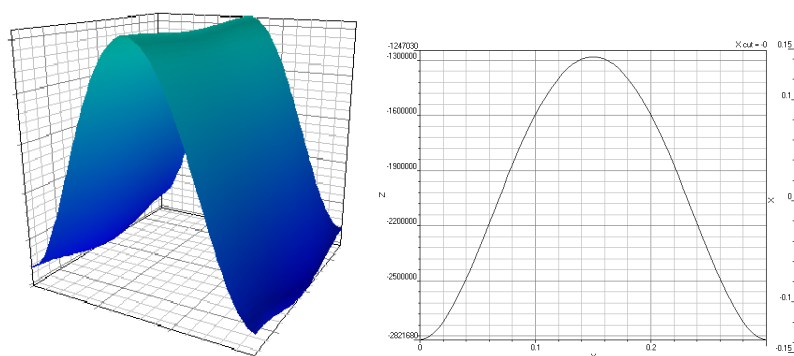
Η δέσμη του laser έχει φορά από τα δεξιά προς τα αριστερά, έτσι όπως δείχνει το βέλος στο γράφημα. Παρατηρούμε ότι αρχικά υπάρχει μεγάλη ενέργεια στο συνολικό ηλεκτρομαγνητικό πεδίο, η οποία φθίνει και μηδενίζεται στο τέλος της προσομοίωσης. Λόγω της αρχής διατήρησης της ενέργειας, αυτή η ενέργεια δεν μπορεί να χάθηκε. Αντιθέτως, μεταφέρθηκε στο σωματίδιο με τη μορφή πίεσης ακτινοβολίας, μετακινώντας προς την περιοχή παγίδευσης.

5.2 Προσομοίωση φαινομένου πλασμονίων επιφάνειας, με τη χρήση της μεθόδου FDTD

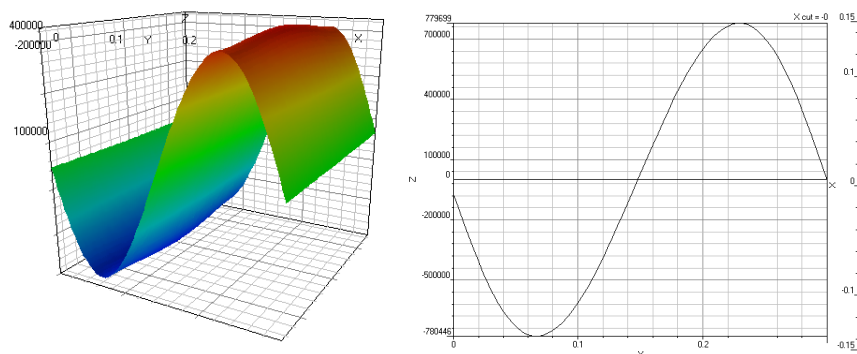
Με τη χρήση της μεθόδου FDTD, έγινε η προσομοίωση μιας χρυσής σφαίρας μέσα σε υδατίνο περιβάλλον. Σκοπός αυτής της προσομοίωσης ήταν να μελετηθεί το πεδίο που δίνουν κάθε ένα από τα μεταλλικά νανοσφαιρίδια, τα οποία αποτελούσαν τις νανοδομές που είχαν προσομοιωθεί με το λογισμικό COMSOL Multiphysics. Το υλικό των σφαιρών ήταν ο χρυσός, όπου έχουμε λάβει υπόψη μας τη διηλεκτρική του συνάρτηση $\epsilon(\omega)$, μέσω του μοντέλου Drude της διασποράς του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου. Το μέγεθος του σωματιδίου αυτής της μοντελοποίησης ήταν 50nm.



Σχήμα 5.5: Απεικόνιση της συνιστώσας E_x του πεδίου πάνω σε χρυσή σφαίρα



Σχήμα 5.6: Απεικόνιση της συνιστώσας E_y του πεδίου πάνω σε χρυσή σφαίρα



Σχήμα 5.7: Απεικόνιση της συνιστώσας E_z του πεδίου πάνω σε χρυσή σφαίρα

Η δέσμη του laser έρχεται από τα δεξιά προς τα αριστερά, όπως δείχνει το βέλος, στις παραπάνω εικόνες. Παρατηρούμε από το γράφημα της συνιστώσας E_z ότι έχουμε τη δημιουργία ενός κύματος στην επιφάνεια του μεταλλικού σωματιδίου. Το γεγονός αυτό σε συνδυασμό με το έντονο πεδίο, μαρτυρούν τη διέγερση παλσμονίων κατά μήκος της μεταλλικής επιφάνειας. Η μορφή της συνιστώσας E_y του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου έχει αυτή τη μορφή λόγω της πόλωσης της φωτεινής δέσμης κατά αυτόν τον άξονα.

Η δυσκολία συνδυασμού οπτικής παγίδευσης και του φαινομένου των επιφανειακών πλασμονίων δεν άφηγε περιθώρια για περισσότερη μελέτη με τη μέθοδο FDTD, μέσω

αυτής της δωρεάν πλατφόρμας από την εταιρία Optiwave. Παρόλα αυτά, όσον αφορά τη χρήση της υπολογιστικής μεθόδου πεπερασμένων διαφορών FDTD, μπορεί να γραφτεί κώδικας (C++/ Python) μέσω του προγράμματος προσομοίωσης Meep, το οποίο δημιουργήθηκε, βελτιώνεται και διατίθεται ελεύθερα από το MIT.^[54,55,56]

Κεφάλαιο 6

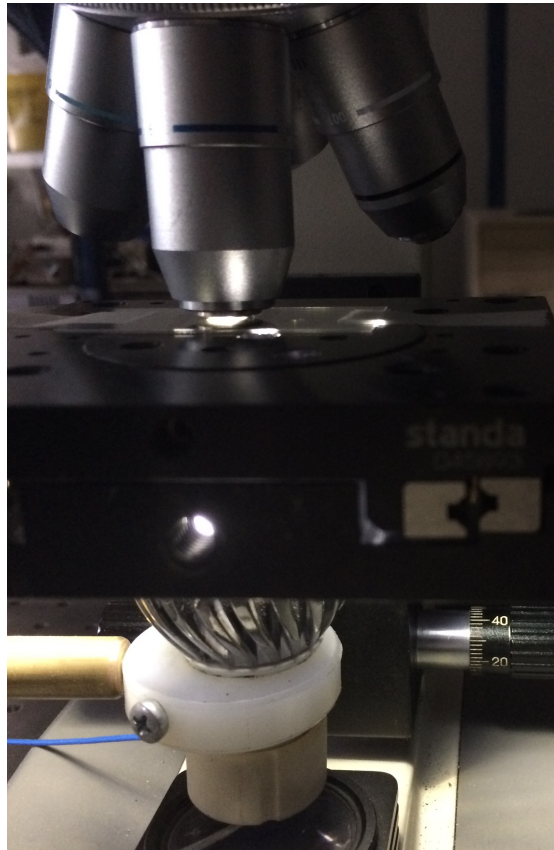
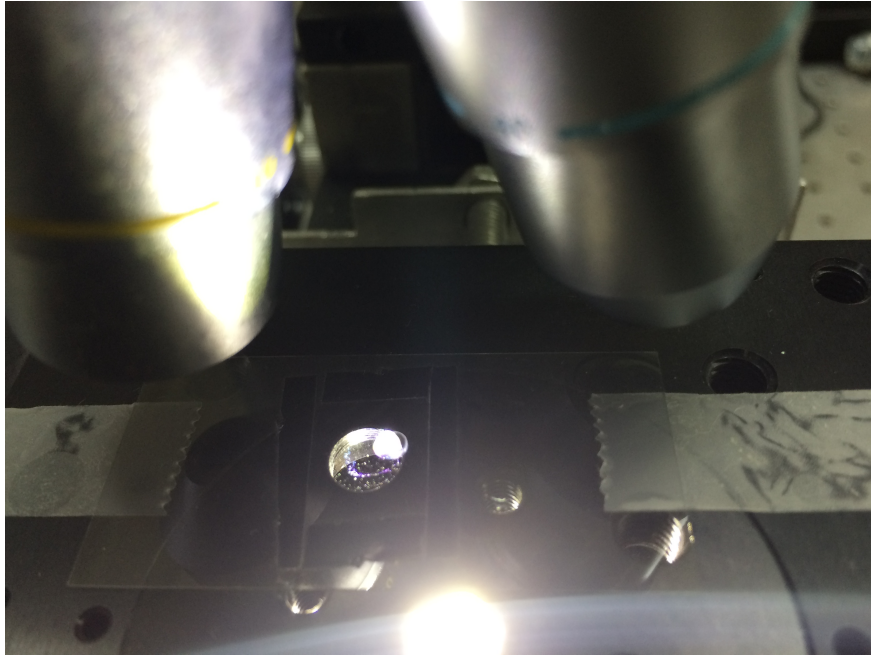
Πειραματικές Μετρήσεις Συμβατικής Οπτικής Παγίδευσης

Στα πλαίσια αυτής της διπλωματικής εργασίας, έγινε η προσπάθεια οπτικής παγίδευσης στο εργαστήριο, εφαρμόζοντας την συμβατική οπτική παγίδευση διηλεκτρικών σωματιδίων. Σκοπός αυτής της πειραματικής μελέτης ήταν η κατανόηση και η εξοικείωση με το φαινόμενο της οπτικής παγίδευσης.

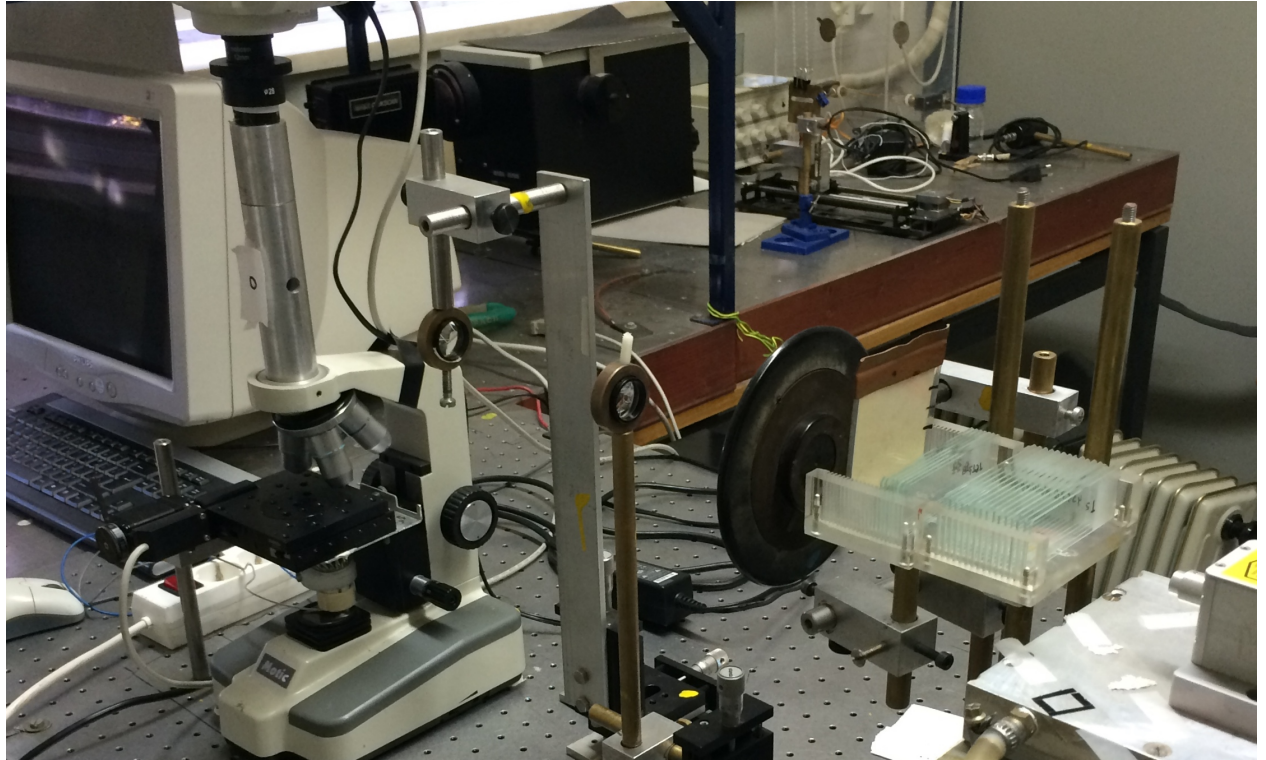
Σε αυτή την πειραματική εφαρμογή, παγιδεύτηκαν σωματίδια από πολυ-μεθαχρυλικό μεθυλεστέρα (poly-methyl methacrylate, PMMA). Η δέσμη laser που χρησιμοποιήθηκε για τη δημιουργία συνθηκών παγίδευσης προερχόταν από μία πηγή laser Nd:YAG, με μήκος κύματος στα 1064nm. Τα σωματίδια του πολυμεθαχρυλικού μεθυλεστέρα (PMMA) βρίσκονταν σε ισοτονικό διάλυμα καθαρού νερού.



Σχήμα 6.1: Laser Nd:YAG, με μήκος κύματος 1064nm, και η CCD κάμερα, που χρησιμοποιήθηκαν στην οπτική παγίδευση



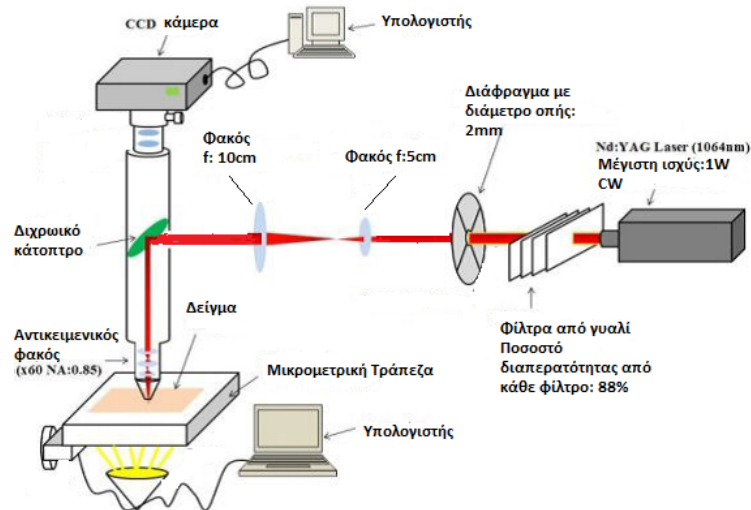
Σχήμα 6.2: Εικόνα του δείγματος και του μικροσκοπίου, λίγο μετά την πειραματική μέτρηση



Σχήμα 6.3: Πειραματική διάταξη οπτικής παγίδευσης, στο ερευνητικό εργαστήριο 'Ανάπτυξης Λασηρ και Εφαρμογές', του Τομέα Φυσικής

Η οπτική παγίδευση των διηλεκτρικών σωματιδίων πραγματοποιήθηκε στη διάταξη που εικονίζεται παραπάνω, και η οποία αποτελούνταν από τα εξής μέρη:

- laser Nd:YAG, στα 1064nm της εταιρείας ELFORLIGHT^[57]
- δύο φακούς διαμέτρου 2cm, με εστιακές αποστάσεις 10cm και 5cm
- ένα μικροσκόπιο Motic M210
- μια CCD κάμερα
- αντικειμενικό φακό αριθμητικού ανοίγματος 0.85 και μεγέθυνσης x60
- μικρομετρική τράπεζα (Sanda 045893) και το πρόγραμμα καθοδήγησής της
- ηλεκτρονικό υπολογιστή
- μία μικρή ωπή (pinhole)
- αντικειμενοφόρες πλάκες του μικροσκοπίου
- κάρτα υπερύθρου/κάμερα υπερύθρου
- καλυπτρίδες



Σχήμα 6.4: Αναπαράσταση πειραματικής διάταξης οπτικής παγίδευσης^[48]

Η δέσμη του laser, αφού περάσει μέσα από το σύστημα των δύο φακών, εισέρχεται στο μικροσκόπιο μέσω μιας οπής. Πριν από κάθε μέτρηση, επιβεβαιώναμε ότι η δέσμη περνά από κέντρο του κάθε φακού, καθώς και στην οπή του μικροσκοπίου. Εκεί προσπίπτει σε έναν διχρωϊκό κάτοπτρο, το οποίο έχει την ικανότητα να ανακλά την ακτινοβολία του laser για το συγκεκριμένο μήκος κύματος στην κατεύθυνση του δείγματος (προς τα κάτω). Με αυτό τον τρόπο, η ακτινοβολία μπορεί να εισχωρήσει στο δείγμα, χωρίς να υπάρχει κίνδυνος να δημιουργήσει προβλήματα στην κάμερα, ενώ το φως του μικροσκοπίου φωτίζει το δείγμα, περνάει μέσα από το διχρωϊκό κάτοπτρο και βοηθάει ώστε να βλέπουμε την εικόνα του δείγματος στην οθόνη του υπολογιστή. Το δείγμα αποτελεί διάλυμα πολυμεθακρυλικού μεθυλεστέρα σε καθαρό νερό και τοποθετείται ανάμεσα σε δύο καλυπτρίδες, για να μπορεί να συγκρατείται και να γίνει η οπτική παγίδευση. Ακόμη, η φωτεινή δέσμη ήταν υπέρυθρη, με αποτέλεσμα να είναι άορατη. Έτσι, χρησιμοποιούσαμε κάρτα υπέρυθρου και σε κάποιες περιπτώσεις και κάμερα υπέρυθρου, ώστε να μπορούμε να βαθμονομήσουμε την οπτική διάταξη και να επιβεβαιώσουμε ότι είναι έτοιμη για να λειτουργήσει.

Μπροστά από την έξοδο του laser είχαν τοποθετηθεί αντικειμενοφόρες πλάκες από το μικροσκόπιο, με σκοπό να μειώσουν την ισχύ της δέσμης του laser. Μεγάλη ισχύ της ακτινοβολίας εμφανίζει τον κίνδυνο αλλοίωσης του δείγματος, λόγω αύξησης της θερμοκρασίας, ενώ ταυτόχρονα δεν εγγυάται τις συνθήκες για οπτική παγίδευση. Σε προηγούμενη ερευνητική εργασία^[48] είχε γίνει αρίθμηση των πλακιδίων και είχε μετρηθεί η ισχύς μετά από το κάθε ένα. Κύριο μειονέκτημα αυτής της εφαρμογής ήταν ότι οι πολλαπλές ανακλάσεις στις αντικειμενοφόρους πλάκες δημιουργούσε μικρές φωτεινές κηλίδες, που δυσκόλευαν τη δημιουργία συνθηκών οπτικής παγίδευσης. Αυτό το πρόβλημα λύθηκε με την τοποθέτηση του πινηλοε μετά τις αντικειμενοφόρους πλάκες, το άνοιγμα του οποίου έδινε μια δέσμη laser με διάμετρο 2mm. Επιπλέον, το δείγμα είχε την δυνατότητα μετακίνησης σε έναν άξονα, μέσω της μικρομετρικής τράπεζας, η οποία μετακινούταν με τη βοήθεια προγράμματος στον υπολογιστή και

κάθε βήμα της τράπεζας (step) αντιστοιχούσε σε 1.25μm. Όσον αφορά τους φακούς, ο ένας είχε διπλάσια εστιακή απόσταση από τον άλλο και μαζί δημιουργούσαν ένα τηλεσκοπικό σύστημα φακών. Σκοπός αυτού του συστήματος ήταν να γίνει πιο ευρεία η δέσμη του laser και ταυτόχρονα να εισέρχεται ως παράλληλη δέσμη και όχι συγκλίνουσα, στον αντικειμενικό φακό του μικροσκοπίου. Με αυτό τον τρόπο μειώνονταν οι σφαιρικές εκτροπές της φωτεινής δέσμης.

Η μέθοδος που χρησιμοποιήθηκε για την οπτική παγίδευση ήταν η μέθοδος διαφυγής. Η ακτινοβολία laser εισερχόταν κάθετα στο δείγμα με κατεύθυνση από πάνω προς τα κάτω. Τα σφαιρίδια που βρίσκονταν στη δέσμη, δέχονταν πίεση ακτινοβολίας λόγω του laser, με αποτέλεσμα να δημιουργούνται οι κατάλληλες συνθήκες για οπτική παγίδευση. Συνήθως παγιδευόταν μόνο ένα σωματίδιο, υπήρχαν όμως περιπτώσεις όπου παγιδεύονταν δύο ακόμα και τρία σωματίδια, ανάλογα με την ισχύ του laser. Ύστερα μετακινούσαμε τη μικρομετρική τράπεζα προς μια κατεύθυνση, με μικρό βήμα, και μετρούσαμε την ταχύτητα με την οποία το σωματίδιο αποδρά από την παγίδευση. Από τη σχέση:

$$F = K \cdot 6\pi r \eta v_{esc}$$

υπολογίζαμε τη συνολική οπτική δύναμη, η οποία το βγάζει από την παγίδα. Η δύναμη που ασκείται στο σωματίδιο λόγω της μετατόπισης της τράπεζας θα είναι σαφώς μεγαλύτερη κατά μέτρο από τη συνολική οπτική δύναμη που ασκείται στο σωματίδιο από την ακτινοβολία όταν είναι παγιδευμένο, ωστόσο στο όριο παίρνουμε ότι αυτές οι δυνάμεις είναι ίσες, με αποτέλεσμα να μπορούμε να υπολογίσουμε την δύναμη της οπτικής παγίδευσης. Ύστερα, χρησιμοποιώντας τη σχέση:

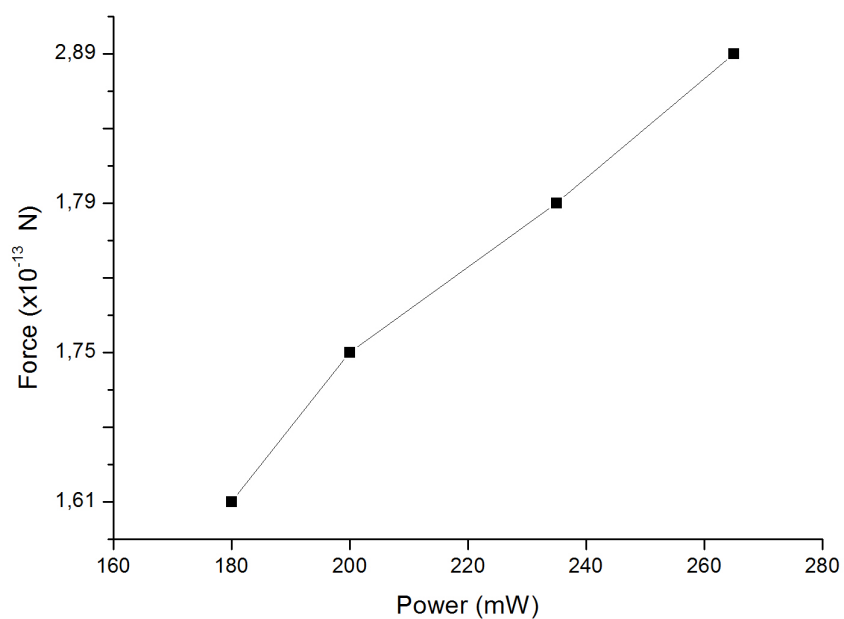
$$F = Q \frac{n}{c} P$$

μπορούμε να προσδιορίσουμε πόσο ισχυρή είναι η παγίδευση που δημιουργήσαμε, υπολογίζοντας την οπτική δύναμη για διαφορετικές τιμές της ισχύς της ακτινοβολίας.

Έγιναν πολλαπλές προσπάθειες μέχρι να γίνει εφικτή η παγίδευση των σφαιριδίων PMMA. Τελικά, πετύχαμε απλή οπτική παγίδευση στο εργαστήριο και πήραμε τα αποτελέσματα που ακολουθούν:

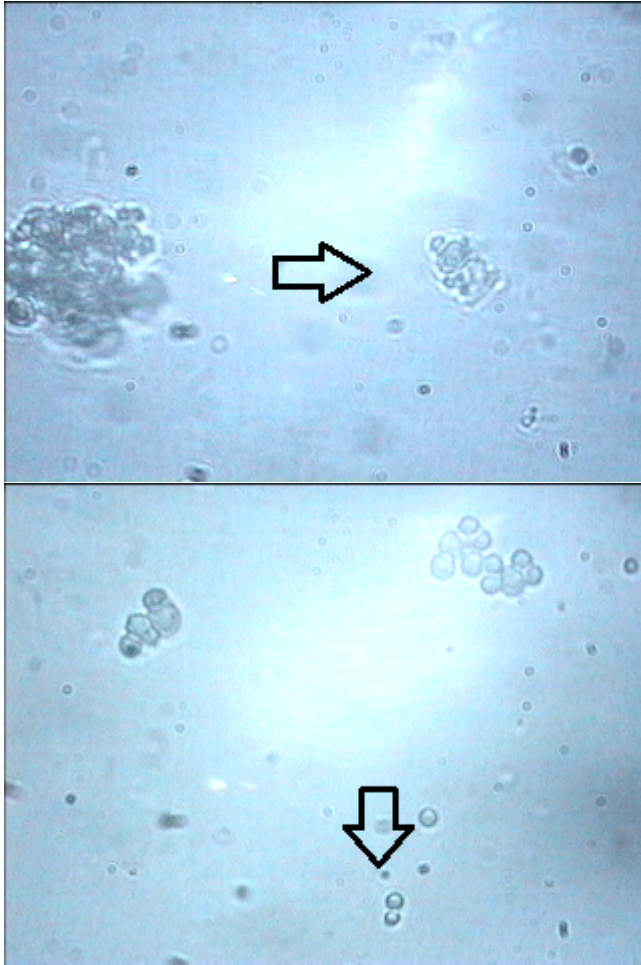
Ισχύς δέσμης (mW)	Ταχύτητα διαφυγής (μm/sec)	Οπτική δύναμη (N)	Συντελεστής Q
180	3.125	1.61×10^{-13}	2.02×10^{-4}
200	3.4	1.75×10^{-13}	1.97×10^{-4}
235	3.4875	1.79×10^{-13}	1.72×10^{-4}
265	5.625	2.89×10^{-13}	2.46×10^{-4}
			M.O = 2.04×10^{-4}

Πίνακας 6.1: Πίνακας πειραματικών μετρήσεων



Σχήμα 6.5: Γραφική παράσταση των πειραματικών μετρήσεων

Στο παραπάνω διάγραμμα, παριστάνεται η πειραματική τιμή της οπτικής δύναμης ως προς την ισχύ της ακτινοβολίας. Από την κλίση αυτής της ευθείας, προσδιορίζεται ο συντελεστής ακαμψίας της οπτικής παγίδας και υπολογίζεται ότι είναι $Q = 0.0341 \pm 0.0025$. Παρατηρούμε ότι η οπτική δύναμη αυξάνεται ανάλογα με την αύξηση της ισχύος του laser. Ωστόσο, υπάρχει κίνδυνος αλλοίωσης του δείγματος εάν η ισχύς φτάσει σε πολύ μεγάλες τιμές ή όταν το δείγμα ακτινοβολείται για μεγάλα χρονικά διαστήματα.



Σχήμα 6.6: Εικόνες από την οπτική παγίδευση στο εργαστήριο. Το βέλος δείχνει την παγίδευση του σωματιδίου

Κατά τη διάρκεια της οπτικής παγίδευσης στο εργαστήριο, η ακινητοποίηση ενός μόνο σωματιδίου και για αρκετό χρόνο ήταν δύσκολο να επιτευχθεί. Μερικές φορές, ειδικά για μεγάλες τιμές ισχύος της ακτινοβολίας, παγιδεύονταν δύο ακόμα και τρία σωματίδια, καθώς και συσσωματώματα σωματιδίων, καθιστώντας αδύνατη τη μέτρηση της οπτικής δύναμης. Άλλες φορές, το δείγμα έπρεπε να αλλαχθεί επειδή έδειχνε αλλοιωμένο λόγω της ανάπτυξης θερμοκρασίας, ενώ άλλες φορές ο αριθμός των σωματιδίων δεν ήταν αρκετός για να παγιδεύσουμε. Επιπλέον, το γεγονός ότι υπήρχαν αρκετά σωματίδια στο δείγμα, ήταν κάτι που εξασθενούσε την ακαμψία της παγίδευσης. Η ανάπτυξη υψηλής θερμοκρασίας στο δείγμα επηρεάζει, εκτός των άλλων, το ιξώδες του περιβάλλοντος υλικού, το οποίο με τη σειρά του επηρεάζει την τιμή της ταχύτητας διαφυγής.

Επίλογος

Μετά από αυτή τη μελέτη, προέκυψαν πολλές ιδέες και πολλά πράγματα που χρειάζονται διερεύνηση και έρευνα.

Αρχικά, χρειάζεται περισσότερη δουλειά όσον αφορά τις διαφορετικές περιπτώσεις στο πρόβλημα που μελετήθηκε σε αυτή τη διπλωματική εργασία. Χρειάζεται να μελετηθούν περισσότερα μέταλλα στη νανοδομή (άργυρος, χαλκός) καθώς και διάφορες γεωμετρίες, όπως νανοδομές αποτελούμενες από κύβους, πυραμίδες, ελλειψοειδή κ.α. Το κενό ενδιάμεσα στα μεταλλικά νανοσωματίδια που αποτελούν τη νανοδομή φαίνεται ότι δεν παίζει μεγάλο ρόλο στην ενίσχυση του πεδίου, ωστόσο καλό θα ήταν να επιβεβαιωθεί. Ακόμη, το μέγεθος του σωματιδίου προς παγίδευση καθώς και τα διαφορετικά υλικά του, θα ήταν μια καλή ιδέα για να αρχίσει κάποιος να μελετά την επίδραση του πλασμονικού πεδίου σε υλικά διαφορετικά εκτός του πολυστυρενίου, όπως σε βιολογικά υλικά, καθώς και σε μεγέθη μικρότερα των 900nm. Η έλλειψη χρόνου δεν επέτρεψε τέτοιου είδους μελέτη στην παρούσα εργασία.

Προγραμματισμός με κώδικα του φαινομένου της οπτικής παγίδευσης, με χρήση της μεθόδου FDTD. Η υπολογιστική μέθοδος FDTD φαίνεται πολλά υποσχόμενη, καθώς παρέχει τη δυνατότητα υπολογισμού της διαφορικής μορφής των εξισώσεων του Maxwell, με μεγάλη ακρίβεια. Αρχικά, χρειάζεται να προσομοιωθεί μόνο το πρόγραμμα της οπτικής παγίδευσης και ύστερα να εισάγουμε στο πρόβλημα και το φαινόμενο της διέγερσης του πλασμονικού πεδίου από τη δέσμη laser. Με αυτό τον τρόπο, θα ορίζαμε, μέσω του κώδικα, το σημείο και το βάθος παγίδευσης και θα γνωρίζαμε με ακρίβεια το σημείο παγίδευσης του σωματιδίου. Το πρόγραμμα Meep^[54,56] που έχει κατασκευαστεί στο MIT και διατίθεται ελεύθερα στο διαδίκτυο, αποτελεί ένα πρόγραμμα προσομοίωσης που κάνει χρήση της μεθόδου FDTD. Οι εντολές για την κατασκευή του μοντέλου και τις παραμέτρους της προσομοίωσης, δίνονται με χρήση κώδικα σε γλώσσα C++ ή Python, ενώ για να λειτουργήσει χρειάζεται λειτουργικό σύστημα σε LINUX/Mac. Πιστεύω ότι αποτελεί μια καλή αρχή για να ξεκινήσουμε αυτού του είδους την προσπάθεια.

Ένα άλλο σημείο που χρειάζεται περισσότερη έρευνα και δουλειά είναι η εισαγωγή κι άλλης φυσικής στο λογισμικό προσομοίωσης COMSOL Multiphysics. Για την επίλυση των προβλημάτων και τον υπολογισμό των μοντέλων, το πρόγραμμα COMSOL Multiphysics χρειάζεται να γνωρίζει ποιο είδος φυσικής εμπλέκεται κάθε φορά στο πρόβλημα. Ωστόσο, έχει τη δυνατότητα να συνδυάζει πολλούς τομείς της φυσικής μαζί, ώστε να λύνει πιο σύνθετα, από φυσικής άποψης προβλήματα. Κατά τη διέγερση

του πλασμονικού πεδίου, έχει παρατηρηθεί σε προηγούμενες ερευνητικές εργασίες^[5] η δημιουργία φυσαλλίδων στο δείγμα. Αυτό σημαίνει ότι η δημιουργία πλασμονικού πεδίου αυξάνει με πολύ έντονο ρυθμό τη θερμοκρασία στο δείγμα, κάτι το οποίο θα έχει αρνητικές συνέπειες κατά τη παγίδευση και το μικροχειρισμό βιολογικών υλικών, κάτω από την επίδραση των πλασμονίων. Έτσι, θα ήταν καλό να μελετηθεί η θερμοκρασία που αναπτύσσεται στην επιφάνεια αλλά και σε ολόκληρο το δείγμα, κατά τη διέγερση του πλασμονικού πεδίου, καθώς και η κατανομή της θερμότητας στον άξονα κατακόρυφα στη μεταλλική νανοδομή. Κάτι τέτοιο θα μπορούσε να επιτευχθεί με την εισαγωγή της φυσικής της θερμότητας στις μοντελοποιήσεις του φαινομένου της οπτικής παγίδευσης και των πλασμονίων. Με αυτό τον τρόπο θα γνωρίζουμε ποιοτικά την αύξηση της θερμοκρασίας στο δείγμα, η οποία επηρεάζει τόσο τις μετρήσεις της ταχύτητας διαφυγής, μεταβάλλοντας το ιξώδες του περιβάλλοντος υλικού, αλλά και τα ίδια τα παγιδευμένα σωματίδια, ιδιαίτερα όταν αυτά αποτελούν κύτταρα, οργανίδια κυττάρων και βιολογικά υλικά.

Χρειάζεται επίσης να δοθεί περισσότερος χρόνος και προσπάθεια στην εισαγωγή του κατάλληλου μοντέλου για τον ακριβή υπολογισμό της διηλεκτρικής συνάρτησης του μετάλλου σε σχέση με την προσπίπτουσα σε αυτό ακτινοβολία. Μια ιδέα για μελλοντική έρευνα είναι η εισαγωγή του μοντέλου Drude ή Drude-Lorenz στις μεταλλικές νανοδομές του λογισμικού COMSOL Multiphysics μέσω του προγράμματος Matlab, το οποίο επιτρέπει την χρήση κώδικα, ο οποίος μπορεί να εισαχθεί σε όποιο μοντέλο του Comsol επιθυμούμε.

Καλό θα ήταν επίσης εάν το πρόγραμμα το οποίο μετακινεί την τράπεζα στη διάταξη της οπτικής παγίδευσης του εργαστηρίου μας, μπορούσε να μετακινείται εξίσου στον άξονα x. Θα βοηθούσε πολύ εάν το πρόγραμμα μετακίνησης της τράπεζας είχε τη δυνατότητα να μετράει τη θέση και στον κατακόρυφο άξονα z.

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω αρχικά, τον καθηγητή κ. Ανδρέα Μπουντουβή, της Σχολής Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ για την άδεια πρόσβασης στο σύστημα της σχολής τους που μου παρείχε, με σκοπό την χρησιμοποίηση του προγράμματος COMSOL Multiphysics. Ευχαριστώ τον επίκουρο καθηγητή κ. Γ. Τσιγαρίδα για τη βοήθεια κατά την εισαγωγή μου στο λογισμικό COMSOL Multiphysics. Επιπλέον, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον υποψήφιο διδάκτορα Αναστάσιο Γουσέτη για τις μετρήσεις της ισχύος του laser που μου παρείχε, για τη βοήθεια με το πειραματικό μέρος της οπτικής παγίδευσης, το χρόνο που αφιέρωσε για τη βαθμονόμηση και την προετοιμασία μου, καθώς και για τις συμβουλές του σχετικά με το πείραμα. Ευχαριστώ την αναπληρώτρια καθηγήτρια της Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών, ΕΜΠ, κ. Μυρσίνη Μακροπούλου για τις συμβουλές της και τη βοήθεια όσον αφορά τη θεωρία της οπτικής παγίδευσης, καθ' όλη τη διάρκεια της εκπόνησης της διπλωματικής μου εργασίας. Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον καθηγητή της Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών, κ. Αλέξανδρο Σεραφεινίδη, για τις πολύτιμες συμβουλές του σχετικά με τη φυσική των φαινομένων της οπτικής παγίδευσης και των πλασμονίων, την άδεια που μου έδωσε για να εκτελέσω τα πειράματα οπτικής παγίδευσης στο εργαστήριο 'Ανάπτυξης Laser και Εφαρμογές', στον Τομέα Φυσικής του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου, καθώς και για το κλίμα συνεργασίας που δημιουργούσε στην ομάδα.

Βιβλιογραφία

- [1] Timo A. Nieminen, Gregor Knoner, Norman R. Heckenberg, Halina Rubindztein-Dunlop, "Physics of Optical Tweezers", Methods in Cell Biology, Vol. 82, 2007
- [2] https://en.wikipedia.org/wiki/Optical_tweezers
- [3] A. Ashkin "Acceleration and trapping of particles by radiation pressure", Physical Review Letters, Vol.24, No 4, 1970
- [4] A. Ashkin, "Optical trapping and manipulation of neutral particles using lasers", Proc. Natl. Acad. Sci. USA Vol. 94, pp. 4853–4860, May 1997
- [5] Δόμνα Κοτσιφάκη, 'Οπτική Παγίδα και Μικροχειρισμός Δηλεκτρικών Σωματιδίων και Βιολογικών Δειγμάτων Χρησιμοποιώντας Δέσμες Laser' , Διδακτορική διατριβή, 2012
- [6] A.Ashkin, "Forces of a single-beam gradient laser trap on a dielectric sphere in the ray optics regime", Biophysics Journal, Vol. 61, February 1992
- [7] David J. Griffiths, 'Εισαγωγή στην ηλεκτροδυναμική', Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης, 2012
- [8] Dianwen Zhang, X.-C. Yuan, S. C. Tjin and S. Krishnan, "Rigorous time-domain simulation of momentum transfer between light and microscopic particles in optical trapping", Optics Express, Vol. 12, No. 10, May 2004
- [9] Robert C. Gauthier, "Computation of the optical trapping force using an FDTD based technique", Optics Express, Vol. 13, No. 10, May 2005
- [10] Aleksandra Radenovic, "OPTICAL TRAPPING - Handout", ADVANCED BIOENGINEERING METHODS LABORATORY OPTICAL TRAPPING, Ecole Polytechnique Federale de Louasanne
- [11] Justin E. Molloy, Miles J. Padgett, "Lights, action: optical tweezers", Contemporary Physics, Vol. 43, No.4, p.241-258, 2002
- [12] "Optical tweezers (and a few selected applications)", Seminar talk "Recent progress in Nanooptics and Photonics", University of Wien
- [13] D.J. Stevenson, F. Gunn-Moore, and K. Dholakia, "Light forces the pace: Optical manipulation for biophotonics," J. Biomed. Opt., 15, (July/August 2010)
- [14] Smith S., Cui Y., Bustamante C., "Overstretching B-DNA: the elastic response of individual double-stranded and single-stranded DNA molecules", Science, February 1996
- [15] K. Raghunathan et al., "Mechanics of DNA: Sequence Dependent Elasticity," Proc. SPIE,8097,2011

- [16] Ang Li , Ammar H. Mansoor, Kevin S.W. Tan C.T. Lim, "Observations on the internal and surface morphology of malaria infected blood cells using optical and atomic force microscopy", *Journal of Microbiological Methods* Vol.66, 2006
- [17] Sebastien Rancourt-Grenier, Ming-Tzo Wei, Jar-Jin Bai, Arthur Chiou, Paul P. Bareil, Pierre-Luc Duval, and Yunlong Sheng,"Dynamic deformation of red blood cell in Dual-trap Optical Tweezers", *Optics Express*, Vol. 18, No. 10, May 2010
- [18] A. Ghosh, Supurna Sinha, J. A. Dharmadhikari, S. Roy, A. K. Dharmadhikari, J. Samuel, S. Sharma and D. Mathur, "Euler buckling-induced folding and rotation of red blood cells in an optical trap", *Physical Biology*, Vol. 3, No. 1, March 2006
- [19] Kishan Dholakia, Woei Ming Lee, Lynn Paterson, Michael P. MacDonald, Richard McDonald, Igor Andreev, Patience Mthunzi, C. Tom A. Brown, Robert F. Marchington, Andrew C. Riches, "Optical Separation of Cells on Potential Energy Landscapes: Enhancement With Dielectric Tagging", *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, Vol. 13, No. 6, November/December 2007
- [20] R. F. Marchington, M. Mazilu, S. Kuriakose, V. Garcés-Chávez, P. J. Reece, T. F. Krauss, M. Gu, and K. Dholakia, "Optical deflection and sorting of microparticles in a near-field optical geometry", *Optics Express*, Vol. 16, No. 6, March 2008
- [21] https://en.wikipedia.org/wiki/Optical_sorting
- [22] Yan Li, Zhongyi Guo, Shiliang Qu, "Living cell manipulation in a microfluidic device by femto-second optical tweezers", *Optics and Lasers in Engineering*, Vol. 55, November 2013 Page: 150-154
- [23] David McGloin and Jonathan P. Reid, "40 years of Optical Manipulation", *OPN Optics & Photonics News*, March 2010
- [24] Mark L. Brongersma, Pieter G. Kik, "Surface Plasmon Nanophotonics", *Springer series in optical sciences*, 2007
- [25] Stefan A. Maier, "Plasmonics: Fundamentals and Applications", Springer, 2007
- [26] https://en.wikipedia.org/wiki/Surface_plasmon
- [27] <http://www.edmundoptics.com/technical-resources-center/optics/introduction-to-polarization/>
- [28] Lukas Novotny, Randy X. Bian, X. Sunney Xie, "Theory of Nanometric Optical Tweezers", *Physical Letters Review*, Vol. 79, No. 4, July 1997
- [29] <http://physics.aalto.fi/groups/comp/msp/research/plasmonics/>
- [30] Eleonora Petryayeva, Ulrich J. Krull, "Localized surface plasmon resonance: Nanostructures, bioassays and biosensing—A review", *Analytica Chimica Acta*, Vol.706,2011, p. 8– 24
- [31] Σημειώσεις μαθήματος 'Επιστήμης Υλικών', του έβδομου εξαμήνου της σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών, ΕΜΠ. Διαφάνειες με τίτλο 'Nanomaterials - Lesson 3 - 2014', του ακαδημαϊκού έτους 2014-2015, πηγή: MyCourses, διδάσκοντες: Α. Κυρίτσης, Μ. Μπουρουσιάν
- [32] <https://el.wikipedia.org/wiki/%CE%A5%CE%B1%CE%BB%CE%BF%CE%B3%CF%81%CE%B1%CF%86%CE%B1>

- [33] N.N. Nedyalkov, A. Dikovska, I. Dimitrov, Ru. Nikov, P.A. Atanasov, R.A. Toshkova, E.G. Gardeva, L.S. Yossifova, M.T. Alexandrov, "Far- and near-field optical properties of gold nanoparticle ensembles", *Quantum Electronics*, Vol. 42, Pages: 1123 – 1127, 2012
- [34] www.comsol.com
- [35] Martin Siler, Oto Brzobohaty, Vitezslav Karasek, Lukas Chvatal and Pavel Zemanek, "Optical Forces and Torques Acting on Non-Spherical Metallic Particles", Institute of Scientific Instruments of the ASCR, v.v.i., Kralovopolska 147, 612 64 Brno, Czech Republic, http://www.comsol.com/paper/download/182313/siler_poster.pdf
- [36] <https://www.comsol.jp/community/forums/maxwell-stress-tensor/thread/35998/>
- [37] <https://www.comsol.ru/community/forums/general/thread/39198/>
- [38] <http://www.comsol.com/community/forums/general/thread/35998/>
- [39] <http://refractiveindex.info/>
- [40] <http://srdjancomsol.weebly.com/perfectly-matched-layers-pmls.html>
- [41] <http://www.comsol.com/blogs/using-perfectly-matched-layers-and-scattering-boundary-conditions-for-wave-electromagnetics-problems/>
- [42] COMSOL Multiphysics, RF Module, User's Guide, <http://nf.nci.org.au/facilities/software/COMSOL/4.3/doc/p>
- [43] Xiaoyan Ma, Jun Q. Lu, R Scott Brock, Kenneth M. Jacobs, Ping Yang and Xin-Hua Hu, "Determination of complex refractive index of polystyrene microspheres from 370 to 1610 nm", *Physics in Medicine and Biology*, Vol. 48, 2003
- [44] COMSOL Multiphysics, Wave Optics Module, User's Guide, http://hpc.mtech.edu/comsol/pdf/Wave_Optics_Module/WaveOpticsModuleUsersGuide.pdf
- [45] <http://www.wave-scattering.com/drudefit.html>
- [46] David Rioux , Simon Vallières , Sébastien Besner , Philip Muñoz , Eric Mazur , and Michel Meunier, "An Analytic Model for the Dielectric Function of Au, Ag, and their Alloys", *Advanced Optical Materials* 2013
- [47] P. G. Etchegoin, E. C. Le Ru, and M. Meunier, "An analytic model for the optical properties of gold", *The Journal of Chemical Physics*, Vol.125,2006
- [48] A.A. Serafetinides, M. Makropoulou, G. Tsigaridas, A. Gousetis, "Plasmon assisted optical trapping: Fundamentals and Biomedical applications", *SPIE*, Vol, 9447, 2015
- [49] Changjun Min, Zhe Shen, Junfeng Shen, Yuquan Zhang, Hui Fang, Guanghui Yuan, Luping Du, Siwei Zhu, Ting Lei & Xiaocong Yuan. "Focused plasmonic trapping of metallic particles", *Nature communications*, 2013
- [50] <http://www.eecs.wsu.edu/~schneidj/ufdtd/>
- [51] https://en.wikipedia.org/wiki/Finite-difference_time-domain_method
- [52] <http://optiwave.com>
- [53] <http://optiwave.com/resources/academia/free-fdtd-download/>
- [54] http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Main_Page

- [55] http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Meep_download
- [56] http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Meep_Tutorial
- [57] http://www.elforlight.com/_products/i4_1064.htm
- [58] Ellen J. Zeman and George C. Schatz, "An Accurate Electromagnetic Theory Study of Surface Enhancement Factors for Ag, Au, Cu, Li, Na, Al, Ga, In, Zn, and Cd", *Journal of Physical Chemistry*, 1987
- [59] <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/tables/diel.html>
- [60] <http://www.wave-scattering.com/plasmonic.html#mfp>
- [61] <http://www.comsol.com/blogs/solutions-linear-systems-equations-direct-iterative-solvers/>