

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ

Υπολογιστική ανάλυση των οπτικών ιδιοτήτων νανοσφαιρών από εναλλακτικά πλασμονικά υλικά

ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Λαζαρίδης Νικόλαος

Επιβλέπων : Βασίλειος Γιαννόπαπας

Τριμελής επιτροπή:

Βασίλειος Γιαννόπαπας Κόντος Αθανάσιος Γεωργακίλας Αλέξανδρος

Αθήνα, Οκτώβριος 2022

Ευχαριστίες

Η παρούσα διπλωματική εργασία πραγματοποιήθηκε στο Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, στη σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών επιστημών και συγκεκριμένα στο Τμήμα Φυσικής κατά το έτος 2022.

Η ολοκλήρωση της προπτυχιακής αυτής εργασίας θα ήταν αδύνατη χωρίς την πολύτιμη υποστήριξη και καθοδήγηση του κ. Βασίλειου Γιαννόπαπα. Τον ευχαριστώ θερμά για την άμεση ανταπόκρισή του σε όσα ζητήματα προέκυψαν το διάστημα αυτό άλλα και για την μεταδοτικότητα και το ενδιαφέρον που έδειξε στο πέρας των προπτυχιακών μαθημάτων, γεγονός που με βοήθησε σημαντικά στο να επιλέξω τον κλάδο της Θεωρητικής και Υπολογιστικής Φυσικής Συμπυκνωμένης ύλης.

Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένεια και τους φίλους μου για την βοήθεια και την συμπαράσταση που προσέφεραν αυτά τα χρόνια.

Πεqιεχόμενα

1	
Εισαγωγή	1
2 Θεωρητικό Υπόβαθρο	3
2.1 Καταστατικές εξισώσεις Maxwell	3
2.2 Μιγαδική διηλεκτρική συνάρτηση μετάλλων	4
2.3 Πλασμόνια	6
2.4 Κατηγορίες Πλασμονίων	7
2.4.1 Πλασμόνια όγκου(Bulk Plasmons)	7
2.4.2 Επιφανειακά Πλασμόνια(Surface Plasmons)	8
2.4.3 Εντοπισμένα επιφανειακά Πλασμόνια(Localized Surface Plasmons)	10
2.4.3.1 Οπτικές Ιδιότητες εντοπισμένων Επιφανειακών Πλασμονίων	11
2.4.3.2 Ενεργές Διατομές	15
3 Ανασκόπηση αρθρογραφίας	18
3.1"Searching for better plasmonic materials"	18
3.2" Optical Properties of Gallium-Doped Zinc Oxide"	21

4Υπολογισμός ενεργών διατομών σ _{abs} και σ _{sca}	22
4.1 Διαγράμματα ενεργών διατομών σ _{abs} και σ _{sca}	23
4.1.1 Οξείδιο Αλουμινίου(1%)-Ψευδαργύρου (ΑΖΟ)	24
4.1.2 Οξείδιο Ινδίου(10%)-Κασσίτερου (ΙΤΟ: 450 °C)	25
4.1.3 Οξείδιο Ινδίου(10%)-Κασσίτερου (ΙΤΟ: 650 °C)	
4.1.4 Οξείδιο Γαλλίου(6%)-Ψευδαργύρου (GZO:6%)	27
4.1.5 Οξείδιο Γαλλίου(7%)-Ψευδαργύρου (GZO:7%)	
4.2 Σχολιασμός-σύγκριση αποτελεσμάτων	29
4.3 Συσκευές οπτικού μετασχηματισμού	
4.4 Συμπεράσματα	

5 Αναφορές	
,	

1. Εισαγωγή

Η έννοια του πλασμονίου ως θεωρητικού σωματιδίου (quasiparticle) διατυπώθηκε για πρώτη φορά από τον R.H. Ritchie to 1957,για να εξηγήσει τις ιδιαίτερες απώλειες που παρατηρούσε στα ηλεκτρόνια που ταξίδευαν με ταχύτητα μέσα από λεπτά μεταλλικά στρώματα. Το πλασμόνιο ήταν ουσιαστικά το κβάντο της διαταραχής της πυκνότητας των ηλεκτρονίων μέσα σε αγώγιμα μέσα. Όταν το μέταλλο-αγωγός έρθει σε επαφή με κάποιο διηλεκτρικό (για παράδειγμα τον αέρα), στην διεπαφή μεταξύ τους δημιουργούνται τα λεγόμενα επιφανειακά πλασμόνια, που δεν είναι παρά «κύματα» ηλεκτρονιακών διεγέρσεων – συλλογική ταλάντωση ηλεκτρονίων - που συμπυκνώνονται στην διεπαφή, και εξασθενούν εκθετικά μέσα

Τις προηγούμενες δεκαετίες η ταχύτητα επεξεργασίας της πληροφορίας οφείλει την ραγδαία αύξησή της στις ολοένα και μικρότερες ηλεκτρονικές διατάξεις, επιτυγχάνοντας ταχύτητες δεκάδων GHz στην νανοκλίμακα . Η ικανότητά τους όμως να αντιμετωπίσουν τεράστιες ποσότητες πληροφορίας είναι περιορισμένη, από τον αριθμό των συνδέσεων, που οδηγούν σε συμφόρηση μετάδοσης. Από την άλλη πλευρά, η φωτονική προσφέρει υψηλές ταχύτητες και μεγάλα εύρη ζώνης, άλλα οι φυσικές διαστάσεις των συστημάτων καθορίζονται από την τάξη μεγέθους του μήκους κύματος της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας (μικροκλίμακα) λόγω φαινομένων περίθλασης.

Η Πλασμονική, που αποτελεί ένα σημαντικό κομμάτι του συναρπαστικού πεδίου της Νανοφωτονικής ,ερευνά πώς τα ηλεκτρομαγνητικά πεδία μπορούν να περιοριστούν σε διαστάσεις της τάξης του μήκους κύματος ή και μικρότερες από αυτό. Βασίζεται σε διαδικασίες αλληλεπίδρασης μεταξύ της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας και των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας σε μεταλλικές διεπαφές ή σε μικρές μεταλλικές νανοδομές, που οδηγούν σε ένα ενισχυμένο οπτικό κοντινό πεδίο (near field) διαστάσεων μικρότερων του μήκους κύματος.

Τα τελευταία χρόνια κυκλώματα βασισμένα σ' επιφανειακά πλασμόνια, είτε πρόκειται για επιφανειακά πλασμόνια πολαριτόνια (SPP), είτε για εντοπισμένα μεμονωμένα επιφανειακά πλασμόνια (LSP), έχουν προταθεί ως μέσο για να ξεπεραστούν οι περιορισμοί των συμβατικών κυκλωμάτων στη χρήση νανοσυσκευών υψηλής απόδοσης επεξεργασίας δεδομένων. Το εντοπισμένο επιφανειακό πλασμόνιο (LSP) είναι αποτέλεσμα του περιορισμού του επιφανειακού πλασμονίου (SP) σ' ένα νανοσωματίδιο με μέγεθος μικρότερο ή συγκρίσιμο με το μήκος κύματος του φωτός, που χρησιμοποιείται για να διεγείρει το πλασμόνιο.



Στην παρούσα διπλωματική εργασία θα μελετηθούν οι βασικές παράμετροι που χαρακτηρίζουν τις νανόσφαιρες που υποστηρίζουν LSP ,δηλαδή η διατομή απορρόφησης (absorption cross-section) και η διατομή σκέδασης (scattering crosssection), για διάφορα εναλλακτικά πλασμονικά υλικά. Για τον σκοπό αυτό ,μοντελοποιήθηκαν οι διηλεκτρικές συναρτήσεις των υλικών σε πολυώνυμα της συχνότητας της προσπίπτουσας ακτινοβολίας με αφετηρία τα πειραματικά δεδομένα των επιστημονικών άρθρων «Searching for better plasmonic materials» και «Optical Properties of Gallium-Doped Zinc Oxide—A Low-Loss Plasmonic Material: First-Principles Theory and Experiment».

2. Θεωρητικό Υπόβαθρο

Είναι εμπειρικά γνωστό πως, στην περιοχή του ορατού φάσματος, τα μέταλλα ανακλούν με πολύ αποδοτικό τρόπο τα προσπίπτοντα ηλεκτρομαγνητικά κύματα και δεν επιτρέπουν την διάδοσή τους στο εσωτερικό τους. Παρόλα αυτά όσο αυξάνεται η συχνότητα του προσπίπτοντος κύματος τόσο αυξάνεται και η απορρόφηση[1].Ως αποτέλεσμα, από την περιοχή της υπεριώδους ακτινοβολίας και για υψηλότερες συχνότητες, ορισμένα μέταλλα ,όπως το νάτριο, δεν ανακλούν καθόλου ενώ άλλα, όπως ο χρυσός και ο άργυρος ανακλούν αλλά με πολύ μεγάλες απώλειες[1].

2.1 Καταστατικές εξισώσεις Maxwell

Η αλληλεπίδραση μεταξύ ηλεκτρομαγνητικού κύματος και ύλης μπορεί να περιγραφεί σε ικανοποιητικό βαθμό από τις καταστατικές εξισώσεις Maxwell τόσο σε μακροσκοπικό επίπεδο όσο και σε διατάξεις νανοσωματιδίων. Οι εξισώσεις αυτές είναι άμεσο αποτέλεσμα της συσχέτισης των μακροσκοπικών εξισώσεων Maxwell με σταθερές που ποσοτικοποιούν τον βαθμό απόκρισης της ύλης κατά την πρόσπτωση ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας σε αυτό.

Η διαφορική μορφή των μακροσκοπικών εξισώσεων Maxwell,στο cgs, είναι η παρακάτω[1]:

$$\nabla \times \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) = -\frac{1}{c} \partial \frac{\mathbf{B}(\mathbf{r},t)}{\partial t}$$
(1)

$$\nabla \times \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{c} \partial \frac{\mathrm{D}(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)$$
(2)

$$\nabla \cdot \boldsymbol{D}(\boldsymbol{r},t) = 4\pi\rho(\boldsymbol{r},t) \tag{3}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\boldsymbol{r},t) = 0 \tag{4}$$

,όπου η $\rho(\mathbf{r},t)$ είναι η πυκνότητα φορτίου και η $\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$, η πυκνότητα ρεύματος. Επίσης, $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ το ηλεκτρικό πεδίο, $\mathbf{D}(\mathbf{r},t)$ η ηλεκτρική μετατόπιση, $\mathbf{H}(\mathbf{r},t)$ το μαγνητικό πεδίο και $\mathbf{B}(\mathbf{r},t)$, η μαγνητική επαγωγή.

Η παραπάνω εξισώσεις συνδέονται μεταξύ τους μέσω των διανυσμάτων της πόλωσης **P** και την μαγνήτισης **M** με τις σχέσεις[1] :

$$\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) + 4\pi \boldsymbol{P}(\boldsymbol{r},t)$$
(5)

$$H(\mathbf{r},t) = \mathbf{B}(\mathbf{r},t) - 4\pi \mathbf{M}(\mathbf{r},t)$$
(6)

Επιπλέον, για την μελέτη της απόκρισης του υλικού κατά την πρόσπτωση της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας, πρέπει να εισαχθούν σε αυτό το σημείο η ηλεκτρική (χ_e) και μαγνητική (χ_m) επιδεκτικότητα.

Πρόκειται για αδιάστατες σταθερές αναλογικότητας που δείχνουν τον βαθμό πόλωσης και μαγνήτισης ενός υλικού μέσω των σχέσεων:

,αν θεωρήσουμε το υλικό αυτό γραμμικό και ισότροπο.

Αντίστοιχα, η διηλεκτρική σταθερά (ή διηλεκτρική συνάρτηση) ε και η μαγνητική διαπερατότητα μ, συνδέουν το **D** με το **E** και το **B** με το **H** μέσω των σχέσεων:

Οι σχέσεις (7),(8),(9) και (10) αποτελούν τις καταστατικές εξισώσεις Maxwell. Επιλύοντας ως προς το ε και το χ_e προκύπτει :

$$\varepsilon = 1 + 4\pi \chi_e$$
 (11)

2.2 Μιγαδική Διηλεκτοική Συνάστηση μετάλλων.

Στην περιγραφή των οπτικών ιδιοτήτων των μετάλλων μπορούμε να θεωρήσουμε πως τα ηλεκτρόνια μπορούν να κινηθούν ελεύθερα σε μορφή αερίου γύρω από ένα θετικό πλέγμα ιόντων.

Η θεώρηση αυτή αγνοεί τα περιοδικά δυναμικά που δημιουργούνται στο πλέγμα και είναι πολύ δύσκολο να υπολογιστούν καθώς επίσης και τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ηλεκτρονίων .Πρόκειται για το πρότυπο των ελεύθερων ηλεκτρονίων (free-electron model) ή αλλιώς πρότυπο Drude-Sommerfield[2] στα πλαίσια του οποίου η εξίσωση κίνησης των ηλεκτρονίων παρουσία εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου **Ε** είναι :

,όπου γ=1/τ η συχνότητα πρόσκρουσης ηλεκτρονίων με τα ιόντα του πλέγματος, τ είναι ο χρόνος εφησυχασμού του αερίου ελεύθερων ηλεκτρονίων, ε το φορτίο των ηλεκτρονίων και m* η ενεργός μάζα τους. Στην περίπτωση μονοχρωματικής ακτινοβολίας $E(t) = E_0 e^{-i\omega t}$ η παραπάνω εξίσωση έχει ως λύση την :

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

Αυτή η ακριβώς η μετατόπιση του ηλεκτρονίου αποτελεί την προέλευση της διπολικής ροπής και κατ' επέκταση της μακροσκοπικής πόλωσης:

$$\mathsf{P} = -\mathsf{n}_0 \mathsf{ex}(\mathsf{t}) = -\mathsf{n}_0 \frac{e^2}{m^*(\omega^2 + i\omega\gamma)} \mathsf{E}(\mathsf{t})$$

,όπου n0 η συγκέντρωση των ηλεκτρονίων.

Από τη σχέση (7) προκύπτει λοιπόν ότι, στο πρότυπο των ελεύθερων ηλεκτρονίων, η ηλεκτρική επιδεκτικότητα των μετάλλων είναι:

$$\chi_{\rm e} = - \frac{n_0 e^2}{m^*(\omega^2 + i\omega\gamma)}$$

και βάση της σχέσης (11), η διηλεκτρική συνάρτηση παίρνει την μορφή:

$$\varepsilon (\omega) = 1 - \frac{\omega^2_{\text{pl}}}{\omega^2 + i\omega\gamma}$$
(12)

Αναλύοντας την σχέση (12) στο πραγματικό και το φανταστικό της μέρος λαμβάνουμε τις ποσότητες:

$$\varepsilon' = 1 - \frac{\omega^2_{pl} \tau^2}{1 + \omega^2 \tau^2}$$
 (13)

$$\varepsilon'' = \frac{\omega_{pl}^2 \tau^2}{\omega(1+\omega^2\tau^2)}$$
(14)

Η μιγαδική διηλεκτρική συνάρτηση λοιπόν συνδέει το εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο συχνότητας ω με την απόκριση του μετάλλου. Το πραγματικό μέρος ε΄ είναι ένα μέτρο της ενέργειας που αποθηκεύεται στο υλικό, ενώ το φανταστικό μέρος ε΄΄ είναι ένα ι ένα μέτρο της ενέργειας που μετατρέπεται σε θερμικές απώλειες[3].

Η ποσότητα $\omega_{\rm pl} = \sqrt{\frac{4\pi n_0 e^2}{m_*}}$ ονομάζεται συχνότητα πλάσματος και είναι η συχνότητα με την οποία το αέριο ηλεκτρονίων ταλαντώνεται γύρω από μια θέση ισορροπίας του πλέγματος. Η συχνότητα πλάσματος αντιπροσωπεύει μια συχνότητα συντονισμού ταλάντωσης πλάσματος και προσπίπτοντος πεδίου.

Αναφορικά, για τον χρυσό, το ασήμι και τον χαλκό[4] :

	Au	Ag	Cu
$\omega_{\rm pl}$, eV	9.1	9.1	8.8
τ, <i>fs</i>	29	40	40

Πίνακας 1

Στα διαγράμματα 1 και 2 απεικονίζονται τα πραγματικά και τα φανταστικά μέρη της μιγαδικής διηλεκτρικής συνάρτησης του χρυσού και του αργύρου[5].



2.3 Πλασμόνια

Τα πλασμόνια είναι σύμφωνες ταλαντώσεις των φορτίων σε υλικά με ελεύθερα ηλεκτρόνια, όπως τα μέταλλα, οι οποίες δημιουργούνται εξαιτίας του προσπίπτοντος φωτός. Όταν τέτοιες ταλαντώσεις περιορίζονται στην διεπιφάνεια μετάλλου – διηλεκτρικού και το φως αλληλοεπιδρά με σωματίδια μικρότερα του μήκους κύματός του, δημιουργείται μια τοπική ταλάντωση φορτίου, γύρω από το σωματίδιο, η οποία βρίσκεται σε συντονισμό με την συχνότητα του φωτός και το φαινόμενο είναι γνωστό ως εντοπισμένος επιφανειακός συντονισμός πλασμονίου (Localized Surface Plasmon Resonance, LSPR) [6].

Για την αναλυτική μελέτη της απόκρισης του πεδίο θα κατασκευάσουμε την εξίσωση διάδοσής του στο εσωτερικό μεταλλικού αγωγού ξεκινώντας από τις εξισώσεις Maxwell για την εν λόγω περίπτωση, δηλαδή τις εξισώσεις (1), (3) καθώς και τις εξισώσεις[1]:

$$\nabla \cdot \mathbf{H}(\boldsymbol{r},t) = 0 \tag{15}$$

$$\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r},t) = \varepsilon_0 \,\frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \mu_0 \,\mathbf{j}(\mathbf{r},t) \tag{16}$$

$$\mathbf{J} = \sigma(\omega) \mathbf{E}(\boldsymbol{r}, t) \tag{17}$$

,όπου ε₀ και μ₀ η διηλεκτρική συνάρτηση και η μαγνητική επιδεκτικότητα του κενού αντίστοιχα και η αγωγιμότητα του μετάλλου [11]

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2 \tau^2}{m^* (1 - i\omega\tau)}$$
(18).

Αντικαθιστώντας την (17) στην (16) έχουμε:

$$\nabla \times \mathbf{B}(\boldsymbol{r},t) = \varepsilon_0 \, \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \mu_0 \sigma \mathbf{E}(\boldsymbol{r},t) \tag{19}$$

και λαμβάνοντας τον στροβιλισμό της (1):

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = (\nabla \mathbf{E})^2 - \nabla^2 \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \partial \frac{(\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, \mathbf{t}))}{\partial \mathbf{t}}$$
(20)

,όπου $\nabla \mathbf{E} = \rho/\epsilon_0 = 0$ (Νόμος Gauss)[7] λόγο απουσίας φορτίων στον μεταλλικό αγωγό.

Αντικαθιστώντας την (19) στην (20) έχουμε την κυματική εξίσωση :

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \mu_0 \left[\sigma \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \varepsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t} \right]$$
(20)

η οποία στην περίπτωση μονοχρωματικής ακτινοβολίας $E(t) = E_0 e^{-i\omega t}$ [7] και αντικαθιστώντας την (18) δίνει:

$$\nabla^2 \mathbf{E} = -\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\omega) \mathbf{E}$$
(21)

Στα όρια των χαμηλών απωλειών (τ⁻¹ \rightarrow 0) για ω $< \omega_{\rm pl}$ το πραγματικό μέρος της διηλεκτρικής συνάρτησης προκύπτει αρνητικό, και η λύση είναι κύματα που αποσβένουν εκθετικά στον χώρο. Για ένα εισερχόμενο κύμα σημαίνει μηδενική διάδοση και ισχυρή ανάκλαση, με ένα μικρό ποσοστό απορρόφησης.

Για $\omega > \omega_{\rm pl}$ το πραγματικό μέρος της διηλεκτρικής συνάρτησης είναι θετικό, και η λύση είναι διαδιδόμενα κύματα: για αυτές τις συχνότητες το μέταλλο εμφανίζεται διαφανές.

Στην ιδιαίτερη περίπτωση που $\omega = \omega_{pl}$ αυτό που δημιουργείται είναι μια αρμονική ταλάντωση της πυκνότητας των ελεύθερων ηλεκτρονίων, γνωστή ως ταλάντωση πλάσματος. Το κβάντο αυτής της ταλάντωσης είναι το πλασμόνιο με ενέργεια E= $\hbar \omega_{pl}$. [8]

2.4 Κατηγορίες πλασμονίων

2.4.1 Πλασμόνια όγκου (Bulk Plasmons)

Οι διαφορετικές κατηγορίες πλασμονίων είναι αποτέλεσμα της διαφορετικής προέλευσης του φαινομένου. Όταν μελετάμε το φαινόμενο της συλλογικής ταλάντωσης του αερίου ηλεκτρονίων στον όγκο ενός μετάλλου, όπως ακριβώς κάναμε στην προηγουμένη παράγραφο, αναφερόμαστε στα πλασμόνια όγκου (Bulk Plasmon)[9]. Εξαιτίας της διαμήκους φύσης τους, τα πλασμόνια όγκου δεν συζεύγονται με εγκάρσια ηλεκτρομαγνητικά κύματα και μπορούν να διεγερθούν μόνο από δέσμη σωματιδίων[4].



2.4.2 Επιφανειακά Πλασμόνια (Surface Plasmons)

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον έχει η αλληλεπίδραση φωτός-ύλης που λαμβάνει χώρα στην διεπιφάνεια μετάλλου-διηλεκτρικού.

Για την αναλυτική περιγραφή του φαινομένου θα θεωρήσουμε άπειρη διεπιφάνεια μεταξύ διηλεκτρικού υλικού και μετάλλου με διηλεκτρικές συναρτήσεις

ε_d και ε_m αντίστοιχα.

Υπάρχουν δύο δυνατές πολώσεις σε αυτή την περίπτωση, η εγκάρσια ηλεκτρική (ΤΕ) και η εγκάρσια μαγνητική (ΤΜ). Μόνο στην δεύτερη περίπτωση δημιουργούνται πλασμόνια στην επιφάνεια και θα θεωρήσουμε λοιπόν πως το μαγνητικό πεδίο είναι στον άξονα y ενώ το ηλεκτρικό πεδίο στον άξονα x και z.



Οι λύσεις των ομογενών εξισώσεων Maxwell σε αυτή την περίπτωση είναι στην μεταλλική περιοχή :

$$E_{xm} = E_0 e^{i(k_{sp} - \omega t)} e^{-ik_{zm}}$$

$$E_{zm} = E_0 \frac{k_{sp}}{k_{zm}} e^{i(k_{sp} - \omega t)} e^{-ik_{zm}}$$

$$H_{ym} = -E_0 \frac{\varepsilon_m}{k_{zm}} \frac{\omega}{c} e^{i(k_{sp} - \omega t)} e^{-ik_{zm}}$$
(22)

και:

$$E_{xd} = E_0 e^{i(k_{sp} - \omega t)} e^{-ik_{zd}}$$

$$E_{zd} = -E_0 \frac{k_{sp}}{k_{zd}} e^{i(k_{sp} - \omega t)} e^{-ik_{zd}}$$

$$H_{yd} = E_0 \frac{\varepsilon_d}{k_{zd}} \frac{\omega}{c} e^{i(k_{sp} - \omega t)} e^{-ik_{zd}}$$
(23)

στην διηλεκτρική περιοχή [2].

Αντικαθιστώντας τις παραπάνω στην κυματική εξίσωση (21) προκύπτουν οι σχέσεις για τα εγκάρσια κυματανύσματα:

$$k_{zm} = \sqrt{\varepsilon_m(\omega)\frac{\omega^2}{c} - k_{sp}^2} , \quad k_{zd} = \sqrt{\varepsilon_d(\omega)\frac{\omega^2}{c} - k_{sp}^2}$$
(24)

Από τις συνοριακές συνθήκες του προβλήματος προκύπτει επίσης :

$$\frac{\varepsilon_m}{k_{zm}} + \frac{\varepsilon_d}{k_{zd}} = 0$$
(25)

και συνδυάζοντας τις σχέσεις (24) και (25) μπορούμε να εκφράσουμε το διαμήκες κυματάνυσμα του επιφανειακού πλασμονίου συναρτήσει μονάχα της συχνότητας ω :

$$k_{sp} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\varepsilon_m(\omega)\varepsilon_d(\omega)}{\varepsilon_m(\omega) + \varepsilon_d(\omega)}}$$
(26)

Θεωρώντας τις απώλειες μηδαμινές και κατ' επέκταση τις συναρτήσεις $ε_m$ και $ε_d$ αμιγώς πραγματικές, η ύπαρξη του επιφανειακού πλασμονίου προϋποθέτει πως το διαμήκες κυματάνυσμα πρέπει να είναι επίσης πραγματική συνάρτηση και στο φάσμα όπου $ε_m$ <0 και $ε_d$ >0 η οριακή συνθήκη ύπαρξης είναι :

$$\varepsilon_m(\omega) + \varepsilon_d(\omega) \le 0$$
 (27)

Στην περίπτωση που η διηλεκτρική συνάρτηση του μετάλλου $ε_m$ περιγράφεται από το πρότυπο Drude-Sommerfield στο όριο των μηδενικών απωλειών και το διηλεκτρικό υλικό είναι το κενό $ε_d=1$ λαμβάνουμε από την σχέση (27) :

$$\omega_{sp} = \frac{\omega_p}{\sqrt{2}}$$

Πρόκειται για την συχνότητα για την οποία δημιουργείται μια δέσμια κατάσταση φωτονίου-πλασμονίου ηλεκτροστατικού χαρακτήρα η οποία καλείται επιφανειακό πλασμόνιο (Surface Plasmon) και διαδίδεται κατά μήκος της επιφάνειας φθίνοντας εκθετικά.

2.4.3 Εντοπισμένα Επιφανειακά Πλασμόνια (Localized Surface Plasmons)

Η τελευταία θεμελιώδη διέγερση είναι τα εντοπισμένα επιφανειακά πλασμόνια και αποτελεί το αντικείμενο μελέτης της συγκεκριμένης διπλωματικής εργασίας. Τα εντοπισμένα επιφανειακά πλασμόνια είναι μη διαδιδόμενες διεγέρσεις των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας των μεταλλικών νανοδομών, συζευγμένες με το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Αυτοί οι τρόποι ταλάντωσης προκύπτουν από το πρόβλημα σκέδασης ενός μικρότερου του μήκους κύματος αγώγιμου νανοσωματιδίου, σε ένα ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Η καμπύλη επιφάνεια του σωματιδίου ασκεί μια ενεργή δύναμη επαναφοράς στα κινούμενα ηλεκτρόνια, έτσι ώστε να μπορεί να προκύψει συντονισμός, οδηγώντας σε ενίσχυση πεδίου, τόσο μέσα (μέσα στη ζώνη κοντινού πεδίου), όσο και έξω από το σωματίδιο. Αυτός ο συντονισμός ονομάζεται εντοπισμένος πλασμονικός συντονισμός.



2.4.3.1 Οπτικές Ιδιότητες Εντοπισμένων επιφανειακών πλασμονίων

Η σημαντικότερη κατηγορία σωματιδίων που επιτρέπουν την δημιουργία εντοπισμένων επιφανειακών πλασμονίων (LSPs) είναι τα σφαιρικά νανοσωματίδια καθώς σε αυτή μπορούν να αναχθούν τα περισσότερα σωματίδια και τα ηλεκτροδυναμικά προβλήματα μπορούν να επιλυθούν αναλυτικά. Η επίλυση αυτού του προβλήματος μας δίνει μια πλήρη εικόνα για τις οπτικές ιδιότητες του σωματιδίου, οι οποίες εξαρτώνται από την ακτίνα του, την συχνότητα του εξωτερικού πεδίου καθώς και το υλικό τόσο του σωματιδίου όσο και του διηλεκτρικού στο οποίο βρίσκεται.

Για τον σκοπό αυτό θα θεωρήσουμε σφαιρικό νανοσωματίδιο ακτίνας α, διηλεκτρικής συνάρτησης ε₁ και μαγνητικής επιδεκτικότητας μ₁ τοποθετημένο σε διηλεκτρικό μέσο με αντίστοιχα μεγέθη ε₂ και μ₂ στο οποίο υπάρχει δίπολο ως πηγή του εξωτερικού πεδίου διπολικής ροπής d₀ σε απόσταση r' από το κέντρο του σφαιρικού σωματιδίου. Στις συνθήκες αυτές το νανοσωματίδιο λειτουργεί ως ηλεκτρικό δίπολο, απορροφώντας και σκεδάζοντας τα ηλεκτρομαγνητικά πεδία, με συντονισμένο τρόπο. Τα πεδία της πηγής συμβολίζονται με $E^{(0)}$ $B^{(0)}$, τα πεδία εντός του σωματιδίου $E^{(1)}$ $B^{(1)}$ και τα πεδία εκτός του σωματιδίου $E^{(2)}$ + $E^{(0)}$



Λόγο σφαιρικής συμμετρίας θα εκφράσουμε τα πεδία μέσω τον σφαιρικών αρμονικών θεωρώντας ως αρχή των αξόνων το κέντρο του σωματιδίου. Η διαδικασία αυτή είναι γνωστή ως λύση Mie[4]. Σε αυτό το πλαίσιο η πυκνότητα φορτίου και ρεύματος της πηγής είναι:

$$\rho = -(\mathbf{d}_0 \nabla) \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r'}) e^{-i\omega t}$$

$$\mathbf{j} = -i\omega \mathbf{d}_0 \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r'}) e^{-i\omega t}$$
(28)

και τα πεδία της πηγής στην περιοχή του διηλεκτρικού μέσου :

$$\boldsymbol{E}^{(\mathbf{0})} = k_2^2 \Pi^0 + \nabla(\nabla \Pi^0)$$
$$\boldsymbol{B}^{(\mathbf{0})} = i \ k_0 \varepsilon_2 \mu_2 (\nabla \Pi^0)$$
(29)

όπου **Π**⁰ το διάνυσμα Hertz το οποίο ισούται με :

$$\mathbf{\Pi}^{0} = \frac{d_{0}}{\varepsilon_{2}} \frac{e^{ik_{2}|r-r'|}}{|r-r'|}$$

και $k_0 = \omega/c$, $k_2 = \sqrt{\varepsilon_2 \, \mu_2} \, \omega/c$ τα κυματανύσματα στο κενό και στο διηλεκτρικό αντίστοιχα.

Για τα εγκάρσια ηλεκτρικά (ΤΕ) μέρη των πεδίων της πηγής θα ξεκινήσουμε από το ακτινικό μέρος της δεύτερης από τις εξισώσεις (29) :

$$\boldsymbol{B^{(0)}}\mathbf{r} = -i \ k_0 \varepsilon_2 \mu_2(\mathbf{r} \nabla \Pi^0) = -i \ k_0 \mu_2 \left[\mathbf{r} (\nabla d_0) \right] \frac{e^{ik_2 |r-r'|}}{|r-r'|} = -i \ k_0 \mu_2 d_0 \left(\nabla' \mathbf{r'} \right) \frac{e^{ik_2 |r-r'|}}{|r-r'|}$$

το οποίο, στον χώρο $\mathbf{r} < \mathbf{r}'$, μπορεί να εκφρασθεί μέσω των σφαιρικών αρμονικών $Y_{nm}(\vartheta, \varphi)$ και των σφαιρικών συναρτήσεων Bessel $j_n(z)$ και Hankel $h_n^{(1)}(z)$:

$$\boldsymbol{B^{(0)}\mathbf{r}} = -i \, k_0 \mu_2 d_0 \, (\nabla' \mathbf{r'}) \, 4\pi k_2 i \, \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \, \left[\, j_n(k_2 r) \, h_n^{(1)}(k_2 r') Y_{nm}^* Y_{nm} \right]$$

και θέτοντας:

a nm=-
$$i4\pi k_0^2 \sqrt{\varepsilon_2 \,\mu_2} \,\mu_2 \,h_n^{(1)}(k_2 r') \,\mathsf{d}_0 \,\mathbf{L'} \,Y_{nm}^*$$

όπου L= - $i[\mathbf{r}\nabla]$ ο τελεστής στροφορμής, προκύπτει :

$$\boldsymbol{B}^{(0)}\mathbf{r} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \left[a_{nm} j_n(k_2 r) Y_{nm} \right]$$
(30)

Πολλαπλασιάζοντας την εξίσωση Maxwell:

$$\nabla E^{(0)} = -i k_0 B^{(0)}$$

με το διάνυσμα θέσης **r**, προκύπτει το εγκάρσιο ηλεκτρικό μέρος του ηλεκτρικού πεδίου :

$$\mathbf{L} \boldsymbol{E}_{TE}^{(0)} = k_0 \boldsymbol{B}^{(0)} \mathbf{r}$$
 (31)

και αντικαθιστώντας την σχέση (30) καθώς και την δράση του τελεστή στροφορμής στις σφαιρικές αρμονικές έχουμε :

$$\boldsymbol{E}_{TE}^{(0)} = k_0 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{a_{nm}}{n(n+1)} [j_n(k_2 r) \, \mathbf{L} Y_{nm}]$$
(32)

Συνδυάζοντας τις σχέσεις (31) και (32) εξάγουμε και το εγκάρσιο ηλεκτρικό μέρος του μαγνητικού πεδίου:

$$\boldsymbol{B}_{TE}^{(0)} = -i \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{a_{nm}}{n(n+1)} [\nabla j_n(k_2 r) \, \mathbf{L} Y_{nm}]$$
(33)

Αντίστοιχα, για τα εγκάρσια μαγνητικά (TM) μέρη των πεδίων της πηγής θα ξεκινήσουμε από το ακτινικό μέρος της πρώτης από τις εξισώσεις (29), πολλαπλασιάζοντας την με το διάνυσμα **r** και αντικαθιστώντας το διάνυσμα **Π**⁰ Hertz:

$$\boldsymbol{E^{(0)}\mathbf{r}} = \frac{1}{\varepsilon_2} \left[\mathbf{r} \nabla (\nabla \mathsf{d}_0) \right] \frac{e^{ik_2|r-r'|}}{|r-r'|} = \frac{1}{\varepsilon_2} \mathsf{d}_0 \nabla' (\nabla' \mathbf{r'}) \frac{e^{ik_2|r-r'|}}{|r-r'|}$$

ή συναρτήσει των σφαιρικών αρμονικών $Y_{nm}(\vartheta, \varphi)$ και των σφαιρικών συναρτήσεων Bessel $j_n(z)$, $h_n^{(1)}(z)$:

 $\boldsymbol{E^{(0)}\mathbf{r}} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} [b_{nm} j_n(k_2 r) Y_{nm}]$

$$\mathbf{b}_{nm} = 4\pi \frac{k_0 \sqrt{\mu_2}}{\sqrt{\epsilon_2}} \nabla' \mathbf{L}' \ h_n^{(1)}(k_2 r') \ Y_{nm}^*$$

και ακριβώς με την ίδια διαδικασία που ακολουθήσαμε στα εγκάρσια ηλεκτρικά μέρη προκύπτουν:

$$\boldsymbol{B}_{TM}^{(0)} = -k_0 \varepsilon_2 \,\mu_2 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \,\frac{b_{nm}}{n(n+1)} \left[j_n(k_2 r) \,\mathbf{L} Y_{nm} \right]$$
(34)

$$\boldsymbol{E}_{TM}^{(0)} = -i \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{b_{nm}}{n(n+1)} [\nabla j_n(k_2 r) \, \mathbf{L} Y_{nm}]$$
(35)

Αθροίζοντας τις σχέσεις (32) και (35) για το ηλεκτρικό πεδίο και (33) και (34) για το μαγνητικό πεδίο λαμβάνουμε τις πλήρεις εκφράσεις του πεδίου της διπολικής πηγής συναρτήσει των σφαιρικών αρμονικών $Y_{nm}(\vartheta, \varphi)$ στον χώρο **r < r'** :

$$\boldsymbol{B}^{(0)} = -i \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{a_{nm}}{n(n+1)} \left[\nabla j_n(k_2 r) \, \mathbf{L} Y_{nm} \right] -k_0 \varepsilon_2 \, \mu_2 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{b_{nm}}{n(n+1)} [j_n(k_2 r) \, \mathbf{L} Y_{nm}]$$
(36)

$$E^{(0)} = k_0 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{a_{nm}}{n(n+1)} [j_n(k_2 r) \mathbf{L} Y_{nm}] -i \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{b_{nm}}{n(n+1)} [\nabla j_n(k_2 r) \mathbf{L} Y_{nm}]$$
(37)

Τα πεδία $E^{(2)}$ και $B^{(2)}$, που αποτελούν την συνεισφορά του σφαιρικού σωματιδίου στο συνολικό πεδίο του χώρου εξωτερικά από αυτό, μπορούν να γραφούν με ανάλογο τρόπο:

$$\boldsymbol{B}^{(2)} = -i \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{\alpha_{nm}^{(2)}}{n(n+1)} [\nabla h_n^{(1)}(k_2 r) \mathbf{L} Y_{nm}] -k_0 \varepsilon_2 \mu_2 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{\beta_{nm}^{(2)}}{n(n+1)} h_n^{(1)}(k_2 r) \mathbf{L} Y_{nm}]$$
(38)

$$\boldsymbol{E}^{(2)} = k_0 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{\alpha_{nm}^{(2)}}{n(n+1)} [h_n^{(1)}(k_2 r) \mathbf{L} Y_{nm}] -i \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} \frac{\beta_{nm}^{(2)}}{n(n+1)} [\nabla h_n^{(1)}(k_2 r) \mathbf{L} Y_{nm}]$$
(39)

Για το εσωτερικό της σφαίρας ισχύουν οι σχέσεις (38) και (39) με την συνάρτηση Bessel $j_n(k_1r)$ στην θέση των σφαιρικών συναρτήσεων Hankel $h_n^{(1)}(k_1r)$. Από την εξίσωση συνέχειας των πεδίων στην διαχωριστική επιφάνεια της

Από την εξίσωση συνέχειας των πεδίων στην διαχωριστική επιφάνεια της σφαίρας προκύπτουν οι άγνωστες παράμετροι $\alpha_{nm}^{(2)}$, $\beta_{nm}^{(2)}$ συναρτήσει των γνωστών a_{nm} και b_{nm} :

$$\beta_{nm}^{(2)} = -\frac{\varepsilon_1 \frac{d}{dz_2} [z_2 j_n(z_2)] j_n(z_1) - \varepsilon_2 \frac{d}{dz_1} [z_1 j_n(z_1)] j_n(z_2)}{\varepsilon_1 \frac{d}{dz_2} [z_2 h_n^{(1)}(z_2)] j_n(z_1) - \varepsilon_2 \frac{d}{dz_1} [z_1 j_n(z_1)] h_n^{(1)}(z_2)} \mathbf{b}_{nm} = -q_n \mathbf{b}_{nm}$$
(40)

$$\alpha_{nm}^{(2)} = -\frac{\mu_1 \frac{d}{dz_2} [z_2 \, j_n(z_2)] \, j_n(z_1) - \mu_2 \frac{d}{dz_1} [z_1 \, j_n(z_1)] \, j_n(z_2)}{\mu_1 \frac{d}{dz_2} [z_2 h_n^{(1)}(z_2)] \, j_n(z_1) - \mu_2 \frac{d}{dz_1} [z_1 \, j_n(z_1)] \, h_n^{(1)}(z_2)} \, a_{nm} = -p_n a_{nm}$$
(41)

όπου $z_{1,2} = \sqrt{\varepsilon_{1,2} \, \mu_{1,2}} \, k_0 \alpha.$

Οι ποσότητες $q_n \kappa \alpha i p_n$ ονομάζονται σταθερές σκέδασης Mie για το εγκάρσιο ηλεκτρικό και για το εγκάρσιο μαγνητικό μέρος του πεδίου αντίστοιχα και ο δείκτης n αντιπροσωπεύει την τάξη του πολυπολικού όρου. Είναι οι κεντρικές ποσότητες

μέσω το οποίων εκφράζεται ο λόγος μεταξύ προσπίπτοντος και σκεδαζόμενου πεδίου και εξαρτώνται από την ακτίνα και το υλικό του σωματιδίου καθώς και από το υλικό του περιβάλλοντα χώρου[10].

2.4.3.2 Ενεργές Διατομές

Στην περιοχή των συχνοτήτων όπου επικρατεί ο συντονισμός του νανοσωματιδίου με το προσπίπτον πεδίο, τα φωτόνια μπορούν να απορροφηθούν από το νανοσωματίδιο ή να σκεδασθούν προς όλες τις κατευθύνσεις. Όσο η συχνότητα πλησιάζει τον συντονισμό, η ακτίνα εντός της οποίας το νανοσωματίδιο μπορεί να απορροφήσει και να σκεδάσει τα φωτόνια αυξάνεται και φτάνει να είναι αρκετές φορές μεγαλύτερη από τις φυσικές διαστάσεις του[4]. Η διαδικασία της απορρόφησης ποσοτικοποιείται μέσω της ενεργούς διατομής απορρόφησης σ_{abs} και αντίστοιχα η σκέδαση μέσω της ενεργούς διατομής σκέδασης σ_{sca}. Το άθροισμα των δυο καλείται ενεργός διατομής εξάλειψης σ_{ext} και εκφράζει τις συνολικές απώλειες που δέχεται το προσπίπτον πεδίο λόγο του νανοσωματιδίου.

Στην απλούστερη περίπτωση προσπίπτοντος πεδίου σε σφαιρικό νανοσωματίδιο που αναλύθηκε στην προηγούμενη παράγραφο, οι ενεργές διατομές δίνονται από τις εκφράσεις[15] :

$$\sigma_{abs} = \frac{2\pi}{2k_2^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \left(\frac{1}{2} - \left|q_n - \frac{1}{2}\right|^2 - \left|p_n - \frac{1}{2}\right|^2\right)$$
$$\sigma_{sca} = \frac{2\pi}{2k_2^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \left(\left|q_n\right|^2 + \left|p_n\right|^2\right)$$
(42)

Αντικαθιστώντας τώρα τις σχέσεις (40) και (41) και αναπτύσσοντας τις σχέσεις υπό την επίδραση έως του οκταπολικού όρου (n=3) λαμβάνουμε τους αναλυτικούς τύπους:

$$\sigma_{abs} = \frac{12\pi k_2 \alpha^3 \varepsilon'' \varepsilon_2}{|\varepsilon + 2\varepsilon_2|^2} \{ 1 + \frac{1}{90} \frac{k_2^2 \alpha^2}{|\varepsilon + 2\varepsilon_2|^2} \times [\varepsilon^4 + 8|\varepsilon|^2 \varepsilon' \varepsilon_2 + 134|\varepsilon|^2 \varepsilon_2^2 + 16(\varepsilon')^2 \varepsilon_2^2 + 104\varepsilon' \varepsilon_2^3 - 344\varepsilon_2^4] + \frac{5}{18} k_0^2 \alpha^2 \left| \frac{\varepsilon + 2\varepsilon_2}{2\varepsilon + 3\varepsilon_2} \right|^2 - 4k_2^3 \alpha^3 \frac{\varepsilon'' \varepsilon_2}{|\varepsilon + 2\varepsilon_2|^2} \}$$

$$\sigma_{sca} = \frac{8}{3} \pi k_2^4 \alpha^6 \left| \frac{\varepsilon - \varepsilon_2}{\varepsilon + 2\varepsilon_2} \right|^2 \times [1 + \frac{6}{5} k_2^2 \alpha^2 \frac{|\varepsilon|^2 - 4\varepsilon_2^2}{|\varepsilon + 2\varepsilon_2|^2} - 4k_2^3 \alpha^3 \frac{\varepsilon'' \varepsilon_2}{|\varepsilon + 2\varepsilon_2|^2}]$$
(43)

όπου $\varepsilon = \varepsilon' + i \varepsilon''$ είναι η διηλεκτρική συνάρτηση του υλικού της νανόσφαιρας, α η ακτίνα της και ε_2 η διηλεκτρική συνάρτηση του μέσου που περιβάλλει την σφαίρα.

Από τις σχέσεις (43) φαίνεται πως όσο μειώνεται η ακτίνα της σφαίρας οι διαδικασίες απορρόφησης υπερτερούν των σκεδάσεων. Πράγματι στο διάγραμμα 3, όπου αναπαρίστανται οι τρείς ενεργές διατομές, κανονικοποιημένες ως προς το εμβαδόν του νανοσωματιδίου, συναρτήσει της ακτίνας του και για σταθερό προσπίπτον πεδίο μήκους κύματος λ=532nm[23], αναδεικνύεται το γεγονός πώς η ενεργός διατομής εξάλειψης προέρχεται μονάχα από φαινόμενα απορρόφησης.



Ένα από τα κατεξοχήν μέταλλα που χρησιμοποιείται για την κατασκευή νανοσωματιδίων με πλασμονικές ιδιότητες είναι ο χρυσός καθώς (i) έχει υψηλή χημική και φυσική σταθερότητα (ii) μπορεί να συνδυαστεί εύκολα με οργανικά και βιολογικά μόρια και (iii) ο συνδυασμός υψηλής συχνότητας πλάσματος ω_{pl} και μεγάλου χρόνου εφησυχασμού **τ** δίνουν στην διηλεκτρική συνάρτηση, που αποτελεί κεντρική ποσότητα των ενεργών διατομών, πληθώρα οπτικών ιδιοτήτων στο φάσμα συχνοτήτων 500-600nm [11]. Στο διάγραμμα 4 αναπαρίστανται οι ενεργές διατομές (με κόκκινο η ενεργός διατομή εξάλειψης, με μπλε η ενεργός διατομή απορρόφησης και με πράσινο η ενεργός διατομή σκέδασης) νανοσωματιδίων χρυσού ακτίνας 80nm συναρτήσει του προσπίπτοντος πεδίου[11].



Τα διαγράμματα των ενεργών διατομών δίνουν μια εικόνα των δυνατοτήτων που διαθέτει ένα υλικό για την κατασκευή νανοσωματιδίων με πλασμονικές ιδιότητες. Όταν σε κάποιο φάσμα ενεργούς διατομής απορρόφησης παρατηρείται κάποια κορυφή για ένα ορισμένο μήκος κύματος προσπίπτουσας ακτινοβολίας τότε, για το μήκος κύματος αυτό, υπάρχει η δυνατότητα κατασκευής μιας νανοδομής η οποία θα απορροφά την ενέργεια τον φωτονίων και θα την μετατρέπει σε ηλιακή ενέργεια (π.χ φωτοβολταϊκά)[12].

Ανάλογα, υλικά με υψηλές κορυφές στην ενεργό διατομή σκέδασης μπορούν να υποστηρίξουν νανοδομές ανίχνευσης φωτονίων με χωρική διακριτική ικανότητα στην κλίμακα του ατόμου (π.χ βιοαισθητήρες)[12].

3. Ανασκόπηση αρθρογραφίας

3.1 "Searching for better plasmonic materials" Paul R. West , Satoshi Ishii ,Gururaj V. Naik , Naresh K. Emani , Vladimir M. Shalaev, and Alexandra Boltasseva

Τα πλασμονικά υλικά μπορούν να αξιοποιηθούν και στην μετάδοση πληροφορίας καθώς, όπως προαναφέρθηκε, μπορούν να συζεύξουν την ενέργεια του προσπίπτοντος φωτονίου στο αέριο ελεύθερων ηλεκτρονίων και να την μεταδώσουν σε γειτονικά νανοσωματίδια.

Οι δυνατότητες που έχουν τα μέταλλα, τα οποία αποτελούν την προφανή επιλογή λόγω των πολλών ηλεκτρονίων αγωγιμότητας που διαθέτουν, στο εύρος όπου το πραγματικό μέρος της διηλεκτρικής συνάρτησης τους είναι αρνητικό (και άρα μπορούν να έχουν πλασμονικές εφαρμογές) περιορίζονται από μεγάλες απώλειες λόγο διαζωνικών μεταβάσεων οι οποίες εκφράζονται από το φανταστικό μέρος της διηλεκτρικής συνάρτησης.



Στο συγκεκριμένο άρθρο, διερευνήθηκε κατά πόσο διάφοροι ημιαγωγοί μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την παραγωγή πλασμονικών υλικών. Ενώ συμβατικά οι ημιαγωγοί θεωρούνται διηλεκτρικά υλικά, σε ένα εύρος συχνοτήτων μερικών εκατοντάδων THz παρουσιάζουν αρνητικό πραγματικό μέρος στη διηλεκτρική συνάρτηση. Επιπλέον το ενεργειακό χάσμα ανάμεσα στη ζώνη αγωγιμότητας και την ζώνη σθένους εξασφαλίζει σημαντικά χαμηλότερες απώλειες, λόγω διαζωνικών μεταβάσεων, από ότι στα μέταλλα. Ιδιαίτερα σημαντική είναι και η ευκολία κατασκευής νανοδομών από ημιαγώγιμα υλικά καθώς και η δυνατότητα λεπτομερούς ρύθμισης των οπτικών ιδιοτήτων τους. Παρόλα αυτά η επίτευξη αρνητικού πραγματικού μέρους σε ένα δεδομένο εύρος συχνοτήτων απαιτεί συχνότητα πλάσματος μεγαλύτερη από το εύρος αυτό και για να

εκπληρωθεί αυτό απαιτούνται ιδιαίτερα ποσοστά εμπλουτισμού του ημιαγωγού. Το γεγονός αυτό εμπεριέχει πολλαπλούς κατασκευαστικούς περιορισμούς με αποτέλεσμα τα υποψήφια υλικά ημιαγωγών να παρουσιάζουν πλασμονικές ιδιότητες στην περιοχή των εγγύς υπέρυθρων συχνοτήτων και όχι των οπτικών.

Ένα τέτοιο υλικό είναι το οξείδιο του Ινδίου – Κασσίτερου (Indium-Tin-Oxide , ITO). Πρόκειται για ένα αγώγιμο οξείδιο το οποίο τυπικά αποτελείται από 90%wt οξείδιο του Ινδίου (In₂O₃) και 10% κατά βάρος (wt) οξείδιο του Κασσίτερου (SnO₂) με συχνότητα πλάσματος ~0.75 eV, η οποία μπορεί να φτάσει τα 2,15 eV αυξάνοντας το ποσοστό του SnO₂ στο 45%wt. Η διαδικασία εναπόθεσης των υμενίων από ITO καθώς και οι συνθήκες ανόπτησης (θερμοκρασία και περιβάλλοντα αέρια) είναι άλλοι δυο παράγοντες που καθορίζουν τις οπτικές ιδιότητες του. Συγκεκριμένα, η τεχνική κατασκευής που προτιμάται είναι ο καθοδικός ψεκασμός παρουσία αζώτου. Στα διαγράμματα 8 και 9 απεικονίζονται το πραγματικό και το φανταστικό μέρος της διηλεκτρικής συνάρτησης του ITO περιβαλλόμενο αφενός από άζωτο και αφετέρου από οξυγόνου για δυο διαφορετικές θερμοκρασίες ανόπτησης, 450 °C και 650°C.



Στο διάγραμμα 8 παρατηρούμε ότι παρουσία οξυγόνου κατά την ανόπτηση το ΙΤΟ δεν παρουσιάζει πλασμονική συμπεριφορά ενώ, παρουσία αζώτου, η υψηλότερη θερμοκρασία αυξάνει την πολωσιμότητα.

Στο διάγραμμα 9 αναδεικνύεται το βασικό προτέρημα των ημιαγωγών, οι πολύ χαμηλές απώλειες συγκριτικά με τα παραδοσιακά πλασμονικά υλικά (με το άργυρο στην εν λόγο περίπτωση) στα μήκη κύματος όπου το πραγματικό μέρος είναι αρνητικό. Άλλοι δύο ημιαγωγοί με παρόμοιες ιδιότητες είναι τα οξείδια του ψευδαργύρου με προσμίξεις αλουμινίου (aluminum-zinc oxide, AZO) ή με προσμίξεις γαλλίου (gallium-zinc oxide, GZO). Όμοια με το ITO οι συνθήκες και η μέθοδος κατασκευής των υμενίων από AZO και GZO πρέπει να επιλεγούν προσεκτικά έτσι ώστε να επιτευχθεί αρνητικό πραγματικό μέρος της διηλεκτρικής συνάρτησης και χαμηλές απώλειες. Ένας επιπλέον περιορισμός που παρατηρείται στα οξείδια ψευδαργύρου είναι στα επιτρεπόμενα ποσοστά εμπλουτισμού καθώς όταν αυτά είναι υψηλά σχηματίζονται ενώσεις που μειώνουν την κινητικότητα των φορέων και κατ' επέκταση την πολωσιμότητα του υλικού.

Τα ποσοστά προσμίξεων στην εν λόγο μελέτη είναι 1%wt Al_2O_3 για τα υμένια με AZO και 7%wt Ga_2O_3 για τα υμένια με GZO τα οποία κατασκευάστηκαν σε θερμοκρασία 300°C με την μέθοδο αφαίρεσης με λέιζερ διμερούς μορίου XeCl.

Στο διάγραμμα 10 αναπαρίστανται τα πραγματικά μέρη της διηλεκτρικής συνάρτησης των ΑΖΟ και GZO(7%) ενώ στο διάγραμμα 11 τα φανταστικά μέρη σε σύγκριση με αυτό του αργύρου.



Παρατηρούμε πως και οι τρείς ημιαγωγοί έχουν παρόμοιες οπτικές ιδιότητες και εύρος μεταλλικής συμπεριφοράς (ε'<0) με το ΑΖΟ να έχει τις καλύτερες προϋποθέσεις για την κατασκευή συσκευών μετάδοσης πληροφορίας μέσω οπτικής κυματοδήγησης ακολουθούμενο από το GZO και τέλος το ITO.

3.2 "Optical Properties of Gallium-Doped Zinc Oxide—A Low-Loss Plasmonic Material: First-Principles Theory and Experiment"

Jongbum Kim, Gururaj V. Naik, Alexander V. Gavrilenko, Krishnaveni Dondapati, Vladimir I. Gavrilenko, S. M. Prokes, Orest J. Glembocki, Vladimir M. Shalaev, and Alexandra Boltasseva

Στο δεύτερο άρθρο γίνεται μια πιο λεπτομερής μελέτη των οπτικών ιδιοτήτων των οξειδίων του Γαλλίου-ψευδαργύρου (GZO) που αναφέρθηκε και στην προηγούμενη παράγραφο. Συγκεκριμένα μετρήθηκε η διηλεκτρική συνάρτηση υμενίων από καθαρό ψευδάργυρο (ZNO), GZO με 3% Ga₂O₃και GZO με 6% Ga₂O₃. Τα υμένια με τις προσμίξεις οξειδίου του Γαλλίου κατασκευάστηκαν σε θερμοκρασία 70°C με την μέθοδο αφαίρεσης με λέιζερ διμερούς μορίου KrF.

Στο διάγραμμα 12 αναπαρίστανται τα πραγματικά μέρη της διηλεκτρικής συνάρτησης των ZnO, GZO(3%) και GZO(6%) ενώ στο διάγραμμα 13 τα φανταστικά μέρη ως προς την ενέργεια του προσπίπτοντος πεδίου Ε= ħ ω.



Όπως αναμένεται, το GZO με το υψηλότερο ποσοστό πρόσμιξης παρουσιάζει εντονότερη πολωσιμότητα και μεταλλική συμπεριφορά σε μεγαλύτερο εύρος από το GZO(3%) και φυσικά από το καθαρό οξείδιο του ψευδαργύρου που δεν αποτελεί υλικό με πλασμονικές ιδιότητες.

4. Υπολογισμός ενεργών διατομών σ_{abs} και σ_{sca}.

Στο υπολογιστικό μέρος της παρούσας διπλωματικής εργασίας μετρήθηκαν οι ενεργές διατομές σ_{abs} και σ_{sca} μέσω των αναλυτικών σχέσεων (43)

$$\sigma_{abs} = \frac{\alpha^{3} \varepsilon'' \varepsilon_{2}}{|\varepsilon + 2\varepsilon_{2}|^{2}} \{1 + \frac{1}{90} \frac{k_{2}^{2} \alpha^{2}}{|\varepsilon + 2\varepsilon_{2}|^{2}} \times [\varepsilon^{4} + 8|\varepsilon|^{2} \varepsilon' \varepsilon_{2} + 134|\varepsilon|^{2} \varepsilon_{2}^{2} + 16(\varepsilon')^{2} \varepsilon_{2}^{2} + 104\varepsilon' \varepsilon_{2}^{3} - 344\varepsilon_{2}^{4}] + \frac{5}{18} k_{0}^{2} \alpha^{2} \left|\frac{\varepsilon + 2\varepsilon_{2}}{2\varepsilon + 3\varepsilon_{2}}\right|^{2} - 4k_{2}^{3} \alpha^{3} \frac{\varepsilon'' \varepsilon_{2}}{|\varepsilon + 2\varepsilon_{2}|^{2}} \}$$

$$\mathbf{\sigma}_{\mathsf{sca}} = \frac{8}{3} \pi k_2^4 \alpha^6 \left| \frac{\varepsilon - \varepsilon_2}{\varepsilon + 2\varepsilon_2} \right|^2 \times \left[1 + \frac{6}{5} k_2^2 \alpha^2 \frac{|\varepsilon|^2 - 4\varepsilon_2^2}{|\varepsilon + 2\varepsilon_2|^2} - 4k_2^3 \alpha^3 \frac{\varepsilon'' \varepsilon_2}{|\varepsilon + 2\varepsilon_2|^2} \right]$$

για νανόσφαιρες διαφόρων ακτινών κατασκευασμένες από ημιαγωγούς ITO(N₂,450°C), ITO(N₂, 650°C), AZO, GZO(6%) και GZO(7%). Για τον σκοπό αυτό μοντελοποιήθηκαν οι διηλεκτρικές συναρτήσεις των υμενίων από τα παραπάνω υλικά, όπως αυτές απεικονίζονται στα διαγράμματα 8-13, σε πολυώνυμα της συχνότητας ω του προσπίπτοντος πεδίου με την χρήση του λογισμικού Origin και τα οποία παραθέτονται στον πίνακα 2. Ο βαθμός των πολυωνύμων επιλέχθηκε με γνώμονα τον παράγοντα R², ο οποίος εκφράζει την ακρίβεια προσαρμογής των αριθμητικών δεδομένων στα πολυώνυμα και κυμαίνεται στο διάστημα [0,1], με R²=1 να αντιστοιχεί στην τέλεια προσαρμογή.

Υλικό		ε(ω)	R ²
470	arepsilon'	$3.3938 \times 10^{-7} \omega^3 - 2.4298 \times 10^{-4} \omega^2 + 0.61592 \omega - 54.387$	>0.99
AZU	ε''	$1.9326 \times 10^{-7} \omega^{3} - 1.2329 \times 10^{-4} \omega^{2} + 0.27128 \omega - 21.101$	>0.99
ITO	arepsilon'	$7.0771 \times 10^{-4} \omega^2 + 0.61592 \omega - 54.387$	>0.99
(450°C)	$\varepsilon^{\prime\prime}$	$3.6375 \times 10^{-4} \omega^2 + 0.12651 \omega - 11.779$	>0.99
ITO	arepsilon'	$6.2788 \times 10^{-4} \omega^2 + 0.26355 \omega - 27.023$	>0.99
(650°C)	ε''	$4.1671 \times 10^{-7} \omega^{3} - 2.0418 \times 10^{-4} \omega^{2} + 0.32213 \omega - 15.463$	>0.99
GZO	ε′	$1.7398 \times 10^{-7} \omega^3 - 1.3426 \times 10^{-4} \omega^2 - 0.04708 \omega - 39.748$	>0.99
(6%)	ε''	$-0.1378 \times 10^{-7} \omega^3 + 0.1384 \times 10^{-4} \omega^2 - 0.04708 \omega - 15.463$	>0.99
GZO	arepsilon'	$-0.48959 \times 10^{-4} \omega^2 + 0.24465 \omega - 5.5647$	0.98
(7%)	$\varepsilon^{\prime\prime}$	$0.26901 \times 10^{-4} \omega^2 + 0.12505 \omega - 15.393$	0.98

Πίνακας 2

Στην συγκριτική μελέτη που ακολουθεί μετρήθηκαν και οι διηλεκτρικές συναρτήσεις του χρυσού και του αργύρου μέσω του πρότυπου Drude και των σχέσεων (13), (14) αξιοποιώντας τις ποσότητες του Πίνακα 1 του κεφαλαίου 2.2.

Όσον αφορά τις ακτίνες των νανοσφαιρών, για τις οποίες πραγματοποιήθηκαν οι υπολογισμοί των ενεργών διατομών, παρατηρήθηκε ένας μέγιστος περιορισμός, ο οποίος διαφέρει από υλικό σε υλικό, και οφείλεται στο γεγονός ότι οι αναλυτικές σχέσεις (43)λαμβάνουν υπόψη μέχρι και οκταπολικούς όρους αγνοώντας όρους ανώτερης τάξης. Οι ακτίνες λοιπόν που θα μελετηθούν είναι σε ένα εύρος 20 – 120 nm. Στην πράξη, τα διαγράμματα μεγαλύτερων ακτινών, ενώ παρουσιάζουν «φυσιολογικά» μέγιστα στην απορρόφηση και στην σκέδαση, τα μέγιστα αυτά ακολουθούνται από ασυνήθιστα απότομες καμπύλες, οι οποίες φτάνουν και σε αρνητικές τιμές ενεργών διατομών, γεγονός που αναδεικνύει έντονα την ανάγκη συμπερίληψης ανώτερων όρων για μεγαλύτερες ακτίνες. Ως παράδειγμα παρουσιάζεται στο διάγραμμα 14 η ενεργός διατομή απορρόφησης για νανόσφαιρες 160nm από οξείδιο αλουμινίου ψευδαργύρου.



Ουσιαστικά, το υπολογιστικό πρόβλημα δεν οφείλεται στις μεγάλες ακτίνες των νανοσφαιρών, άλλα στο γινόμενο αυτών με το κυματάνυσμα k_2 . Για τον λόγο αυτό, τα διαγράμματα μεγαλύτερων ακτινών έχουν την αναμενόμενη μορφή στην περιοχή συχνοτήτων πριν τις κορυφές αλλά είναι ανεπαρκή για υψηλότερες συχνότητες.

4.1 Διαγράμματα ενεργών διατομών.

Στις παραγράφους που ακολουθούν παρουσιάζονται τα διαγράμματα των ενεργών διατομών απορρόφησης και σκέδασης των διαφορετικών υλικών για νανοσωματίδια ακτινών 20,40,60,80 και 100 nm, κανονικοποιημένα ως προς την φυσική ενεργό διατομή καθώς και το υπολογιστικό όριο επαρκούς προσέγγισης του οκταπολικού όρου.



4.1.1 Οξείδιο Αλουμινίου (1%)-Ψευδαργύρου (ΑΖΟ)

Υπολογιστικό όριο οκταπολικής προσέγγισης : ~100-110 nm

4.1.2 Οξείδιο Ινδίου (10%) - Κασσίτερου (ΙΤΟ: 450 °C)

(Θερμοκρασία ανόπτησης: 450 °C , περιβάλλον αέριο: άζωτο)



Υπολογιστικό όριο οκταπολικής προσέγγισης : ~180-190 nm

4.1.3 Οξείδιο Ινδίου (10%)-Κασσίτερου (ΙΤΟ: 650 °C)

(Θερμοκρασία ανόπτησης: 650 °C, περιβάλλον αέριο: άζωτο)



Υπολογιστικό όριο οκταπολικής προσέγγισης : ~150-160 nm

4.1.4 Οξείδιο Γαλλίου(6%)-Ψευδαργύρου (GZO:6%)



Υπολογιστικό όριο οκταπολικής προσέγγισης : ~110-120 nm



Υπολογιστικό όριο οκταπολικής προσέγγισης : ~140-150 nm

4.2 Σχολιασμός-σύγκριση αποτελεσμάτων

Στον πίνακα που ακολουθεί παρουσιάζονται τα αποτελέσματα που εξήχθησαν από τα προηγούμενα διαγράμματα. Συγκεκριμένα αναφέρονται οι μέγιστες τιμές καθώς και η συχνότητες στις οποίες παρατηρήθηκαν, καθώς και η ενεργός διατομή εξάλειψης σ_{ext}(σ_{abs}+σ_{scat}) στην συχνότητα ω_{TO} όπου ε'=-1, για διαφορετικές ακτίνες.

Υλικό	a may	a may	ω _{peak}	6 (4))
(ακτίνα 20 nm)	Uabsillax	Uscatillax	(Thz)	Uext (WTO)
AZO	0.35	~0	188	0.04 (230)
ITO (450°C)	0.19	~0	141	0.12 (151.3)
ITO (650°C)	0.23	~0	146	0.10 (158.8)
GZO (6%)	0.34	~0	195	0.17 (212.1)
GZO (7%)	0.20	~0	188	0.07 (227.1)
Au	0.35	0.02	628	1.18 (1443)
Ag	0.39	0.03	774	0.22 (934.8)
Υλικό	_	_	ω _{peak}	- (
(ακτίνα 40 nm)	Oabsillax	Oscatillax	(Thz)	$\sigma_{ext} (\omega_{T0})$
AZO	0.70	~0	188	0.08 (230)
ITO (450°C)	0.38	~0	141	0.24 (151.3)
ITO (650°C)	0.47	~0	146	0.21 (158.8)
GZO (6%)	0.69	~0	194	0.32 (212.1)
GZO (7%)	0.41	~0	187	0.14 (227.1)
Au	0.78	0.23	622	4.93 (1443)
Ag	0.93	0.06	763	0.71 (934.8)
Υλικό	T - M 0 V	a mov	ω _{peak}	a (1)-1)
(ακτίνα 60 nm)	Oabsillax	Oscatillax	(Thz)	$\sigma_{ext} (\omega_{T0})$
AZO	1.03	0.03	187	0.11 (230)
ITO (450°C)	0.57	~0	141	0.35 (151.3)
ITO (650°C)	0.71	0.01	145	0.33 (158.8)
GZO (6%)	1.02	0.07	193	0.44 (212.1)
GZO (7%)	0.61	~0	186	0.21 (227.1)
Au	1.20	1.51	600	~25 (1443)*
Ag	1.41	3.93	739	~10 (934.8)*
Υλικό	a may	σmay	ω _{peak}	σ (ωπο)
(ακτίνα 80 nm)	Oapsinax	Oscatinax	(Thz)	Vext (WIU)
AZO	1.36	0.11	185	0.14 (230)
ITO (450°C)	0.75	0.02	140	0.44 (151.3)
ITO (650°C)	0.94	0.03	144	0.42 (158.8)
GZO (6%)	1.37	0.12	192	0.51 (212.1)
GZO (7%)	0.80	0.04	185	0.25 (227.1)
Au	1.9	6.12	583	Err (k ³ a ³)**
Ag	2.6	12.2	724	Err (k ³ a ³)**
Υλικό	σ _{abs} max	$\sigma_{scat}max$	Wpeak (Tha)	σ _{ext} (ω _{τ0})
	1.67	0.21	<u>(1 NZ)</u> 192	0.17 (220)
	1.07	0.31	105	0.17(230)
ITO (450°C)	1 17	0.04	140	0.51(151.5)
$(650^{\circ}C)$	1.17	0.08	145	0.50(150.0)
$G_{20}(6\%)$	1./1	0.33	190	0.03(212.1)
	0.90	17 52	101 E74	$F_{rr} (1-3a^3) **$
Au	4.34	20.02	5/4	$E_{nn} (1_{23}, 3) **$
Ag	4.31	20.02	102	LII (K ^s a ^s) ¹

Παρατηρούμε, αρχικά, ότι όσο αφορά τους ημιαγωγούς, για τις ακτίνες που μετρήθηκαν, ο κυρίαρχος μηχανισμός απωλειών είναι η απορρόφηση, ενώ ένα μη αμελητέο ποσό σκέδασης εμφανίζεται μονάχα στα 80 και 100 nm. Αντίθετα, στα συμβατικά πλασμονικά μέταλλα (Au, Ag) η σκέδαση είναι πολύ εντονότερη και κυριαρχεί στις μεγάλες ακτίνες.

Εξετάζοντας τα διαγράμματα των ενεργών διατομών ως προς τα μέγιστα σημεία, το οξείδιο του Ινδίου – Κασσίτερου με ανόπτηση στους 450°C, παρουσία αζώτου (ΙΤΟ 450°C), φαίνεται να έχει τις χαμηλότερες απώλειες, ακολουθούμενο από το οξείδιο Γαλλίου – Ψευδαργύρου με 7% Ga₂O₃(GZO 7%).

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον έχει το γεγονός ότι η εικόνα αυτή αλλάζει στις συχνότητες λειτουργίας των συσκευών οπτικού μετασχηματισμού $ω_{TO}$. Εκεί το υλικό που παρουσιάζει τις χαμηλότερες απώλειες είναι το οξείδιο Αλουμινίου – Ψευδαργύρου (AZO) με $ω_{TO}$ =230 THz ακολουθούμενο και πάλι από το GZO7% με $ω_{TO}$ = 227.1 THz.

Αξίζει να τονιστεί, λαμβάνοντας υπόψη ότι πρόκειται για διαφορετικά φάσματα συχνοτήτων, η σημαντική υπεροχή των ημιαγωγών που μελετήθηκαν έναντι των συμβατικών μετάλλων. Δυστυχώς, καθώς το γινόμενο κυματανύσματος-ακτίνας είχε πολύ υψηλή τιμή για τον χρυσό και τον άργυρο, για νανόσφαιρες 80 και 100 nm δεν μετρήθηκε η ενεργός διατομή εξάλειψης λόγο του υπολογιστικού σφάλματος(**), ενώ για τα 60 nm δίνεται μονάχα μια εκτίμηση της πραγματικής τιμής (*).

4.3 Πιθανές Εφαρμογές

Η έρευνα γύρω από τα υλικά αυτά, σύμφωνα με την αρθρογραφία, αφορά συσκευές οπτικού μετασχηματισμού (Transformation optics-TO devices) και συγκεκριμένα κυματοδηγών με διαστάσεις μικρότερες του μήκους κύματος της προσπίπτουσας ακτινοβολίας. Πρόκειται για συσκευές που μετασχηματίζουν την δομή του χωροχρόνου με τρόπο ανάλογο με αυτόν της γενικής σχετικότητας με σκοπό να ελεγχθεί και να καθοριστεί η ροή του φωτός[13]. Η διαδοχική τοποθέτηση νανοσφαιρών από πλασμονικά υλικά μπορεί να υποστηρίξει αυτό το φαινόμενο και να δημιουργηθούν συστήματα κυματοδήγησης με φυσικές διαστάσεις μικρότερες από τα όρια των συμβατικών μικροηλεκτρονικών διατάξεων.



Οι διατάξεις αυτές[14] απαιτούν νανόσφαιρες από υλικά των οποίων το πραγματικό μέρος της διηλεκτρικής συνάρτησης είναι αρνητικό αλλά και κοντά στο 0 στις συχνότητες λειτουργίας. Είναι απαραίτητη λοιπόν μια ισορροπία μεταξύ της απόκρισης του μετάλλου-ημιαγωγού με αυτή του διηλεκτρικού μέσου στο οποίο βρίσκεται. Στην συγκεκριμένη μελέτη, η ηλεκτρική επιδεκτικότητα του περιβάλλον μέσου είναι *ε*_d=1 και οι ενεργές διατομές των νανοσφαιρών θα μετρηθούν στην συχνότητα (ω_{TO}) όπου το ε'=-1. Σκοπός αυτού, είναι να αναδειχθεί το υλικό που μπορεί να αξιοποιηθεί στην κατασκευή τέτοιων σφαιρών με τις λιγότερες απώλειες, τόσο λόγω απορρόφησης αλλά και σκέδασης, στην συγκεκριμένη συχνότητα. Τα αποτελέσματα παραθέτονται στον πίνακα της παραγράφου 4.2.

4.4 Συμπεράσματα

Η συγκεκριμένη μελέτη ανέδειξε το μέγεθος των απωλειών μέσω των μηχανισμών απορρόφησης και σκέδασης από την αλληλεπίδραση της προσπίπτουσας ακτινοβολίας με νανόσφαιρες διαφορετικών ακτινών. Τα υποψήφια ημιαγώγιμα υλικά κατασκευής συγκεκριμένων νανοσφαιρών έδειξαν σημαντική μείωση των απωλειών, συγκριτικά με τα συμβατικά πλασμονικά μέταλλα.

Από την σκοπιά αυτής της αποδοτικότητας, αναδείχθηκε το οξείδιο Αλουμινίου – Ψευδαργύρου ως η βέλτιστη επιλογή για την κατασκευή συσκευών οπτικού μετασχηματισμού. Ωστόσο, το γεγονός ότι αυτή η υπεροχή δεν παρατηρείται σε όλο το φάσμα που μελετήθηκε μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι δεν υπάρχει ένα καθολικά καλύτερο πλασμονικό υλικό και η επιλογή πρέπει να γίνεται με γνώμονα την εκάστοτε εφαρμογή. Επίσης, σε μια αγορά ισχυρά καθοδηγούμενη από το κέρδος, απαιτείται να λαμβάνονται υπόψη τόσο η ευκολία κατασκευής αλλά και το κόστος της.

Τα βελτιωμένα αυτά υλικά έχουν την προοπτική να προκαλέσουν τεράστιες αλλαγές στη ήδη ραγδαία ανάπτυξη του κλάδου της νανοπλασμονικής καθώς και των νανοηλεκτρονικών ανοίγοντας το δρόμο σε μια νέα γενιά συσκευών και διατάξεων μετάδοσης πληροφορίας και οπτικής κυματοδήγησης.

- 5. Αναφορές
- [1] Β. Γιαννόπαπας, Διηλεκτρικές Οπτικές και Μαγνητικές Ιδιότητες Υλικών (σημειώσεις μαθήματος προπτυχιακών σπουδών)
- [2] Stefan A. Maier, Plasmonics Fundamentals and Applications, Centre for Photonics and Photonic Materials Department of Physics, University of Bath, UK, 11-17, (2007)
- [3] J. Petzelt, I. Rychetský, Encyclopedia of Condensed Matter Physics, J. Petzelt, I. Rychetský, Max-Planck- Institut fur Festkoerperforschung / C.N.R.S.Grenoble, France, 425-430, (2005)
- [4] V. Klimov, Nanoplasmonics, Taylor & Francis Group, 53, 60-62, 115-120, 126, (2013)
- [5] Christian Heck, Julia Prinz, André Dathe, Virginia Merk, Ondrej Stranik, Wolfgang Fritzsche, Janina Kneipp, and Ilko Bald, Gold and silver nanolenses self-assembled by DNA origami, ACS Photonics, 1123-1130, (2017)
- [6] Vincenzo Amendola, Roberto Pilot, Marco Frascona, Onofrio M Maragos, Maria Antonia Surface plasmon resonance in gold nanoparticles: a review, J. Phys.: Condens. Matter 29, 203002, (2017)
- [7] David J. Griffiths, Εισαγωγή στην Ηλεκτροδυναμική, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 2^η αναθεωρημένη έκδοση, 70, 116, (2013)
- [8] Paul Wiggins, Electromagnetism, University of Washington (Lecture's notes)
- [9] Nicolas Large, Resonant Raman-Brillouin scattering in semiconductor and metallic nanostructures: from nano-acoustics to acousto-plasmonics, Université Toulouse, (2011)
- [10] Y.A. Eremin, Encyclopedia of Modern Optics, Duke University, Durham, NC, USA, 326, (2005)
- [11] Adam Hughes, Zhaowen Liu, Plasmonic Assay Modelling Environment, The George Washington University, (2011)
- [12] Kadir Aslan, Joseph R. Lakowicz, and Chris D Geddes Plasmon light scattering in biology and medicine: new sensing approaches, visions, and Perspectives, Current Opinion in Chemical Biology, Volume 9, Issue 5, (2005)
- [13] V.M Shalaev, Transforming Light, Birck Nanotechnology Center and School of Electrical and Computer Engineering, Purdue University,430-441 (2008)
- [14] S.Foroutan, G.Rostami, M.Dolatyari and A.Rostami, All-Optical switching in metal nanoparticles plasmonic waveguide using EIT phenomenon, Optik, Volume 132,Pages 291-298, (2017)