

# **Light interaction with nanoparticles**

Institut de Ciències Fotòniques (ICFO)

Joana Navarro Sánchez

## **Introducció**

La fotònica és un camp científic que té molt potencial. De fet, la llum, especialment la llum làser, és una de les principals tecnologies de suport disponibles, actualment, per a la societat. L'Institut de Ciències Fotòniques (ICFO) és un dels centres pioners de recerca en aquest àmbit. Dins del centre hi ha grups d'allò més diversos, des de teòrics fins a experimentals. Això no obstant, tots investiguen noves propietats de la llum que puguin tenir una aplicació directa en camps com, per exemple, la salut, l'energia o la informació.

Dins dels grups d'investigació que estudien el comportament dels diferents materials quan interaccionen amb la llum, trobem el de *Nanophotonics theory*. Aquest departament, en el qual es va realitzar l'estada, es centra en la comprensió del comportament de les nanopartícules quan interactuen amb la llum. Quan un sistema és modificat per un camp electromagnètic, les partícules involucrades reben molta energia. Una part de l'energia és absorbida i l'altra, reflectida. El moviment dels electrons és oscil·latori; d'aquesta manera el seu comportament pot ser analitzat com el moviment descrit per una molla (moviment harmònic) en el qual el nucli de l'àtom és la paret on la molla està subjecte i els electrons és la partícula que està subjecte a l'altre extrem de la molla. Concretament, es pot establir una analogia entre el moviment dels electrons i el d'un oscil·lador harmònic forçat esmorteït (en el qual hi intervé una força elàstica, una força de fregament i una força externa). Aquest és el model d'àtom conegut com àtom de Lorentz. La llum incident és representada per una força de tendència sinusoidal.

Durant la realització del projecte s'han estudiat els diferents tipus d'oscil·ladors harmònics (simples, esmorteïts i forçats esmorteïts), la ressonància, la resposta òptica de les partícules (concretament, partícules d'or, de plata i d'alumini) així com altres conceptes relacionats amb la nanofotònica (per exemple, la transmissibilitat).

## **Fitxa tècnica**

- **Centre:** Institut de Ciències Fotòniques (ICFO).
- **Adreça:** Avinguda Carl Friedrich Gauss, Castelldefels (Barcelona).
- **Línies d'investigació:** L'institut és un centre pioner centrat en l'estudi de la fotònica. Avui en dia, aquesta àrea d'investigació té moltes aplicacions per al desenvolupament de la societat entre les quals destaquen: la salut, l'energia, la informació, la seguretat i el medi ambient. Concretament, el

grup on es va realitzar el projecte estudia la resposta òptica de materials nanoestructurats. Desenvolupen teories per a explicar nous fenòmens físics associats a la interacció de la llum amb aquestes partícules. En particular, investiguen els plasmons en nanopartícules i nanoestructures així com la interacció d'aquests amb molècules.

- **Àrea i departament:** Nanophotonics theory.
- **Científic al càrrec:** Prof. Dr. Javier García de Abajo.
- **Projecte:** Light interaction with nanoparticles.
- **Període de realització de l'estada:** 16 de juliol — 14 d'agost.

### **Objectius del projecte**

Els objectius que es van marcar durant el projecte van ser diversos els quals van culminar amb la realització d'un informe recopilatori final. Així doncs, els objectius es podrien esmentar de la següent manera:

- I. Estudiar el moviment harmònic que presenten els oscil·ladors simples, esmorteïts i forçats esmorteïts.
- II. Comprendre el fenomen de la ressonància, en el cas de l'oscil·lador forçat esmorteït, i representar gràficament diferents casos modificant diverses variables.
- III. Entendre el model d'àtom de Lorentz.
- IV. Analitzar la resposta òptica de diverses partícules (concretament, partícules d'or, plata i alumini) i variar el sistema on es troben (com per exemple afegir partícules o canviar l'entorn).
- V. Realitzar un informe final com a síntesi de tots els coneixements assolits.

### **Activitats realitzades**

Les activitats realitzades van consistir en tots els casos en la comprensió del moviment harmònic i la seva aplicació per a la comprensió del comportament dels electrons així com la resposta de partícules quan interaccionen amb la llum.

Per a la comprensió del moviment harmònic es va estudiar l'oscil·lador. Existeixen 3 tipus de moviments harmònics i, per tant, d'oscil·ladors: el simple (on només existeix una força elàstica), l'esmorteït (on intervé una força elàstica i una força de fregament) i el forçat esmorteït (on hi ha una força elàstica, una força de fregament i una força externa). Per a estudiar-ho es va procedir a

l'anàlisi i solució de les equacions diferencials de cada tipus de moviment harmònic així com una simple representació esquemàtica del sistema.

Després es va procedir a l'estudi de la ressonància. Es van haver de realitzar tres programes, amb el llenguatge de programació C++, que, a partir de les equacions diferencials anomenades anteriorment, així com també amb les equacions de Maxwell, donessin una sèrie de dades que es corresponguessin a la solució d'aquestes equacions. Els valors d'algunes de les variables implicades van ser fixats; a algunes altres, el seu valor venia definit amb un increment concret de manera que es produís una variació d'aquest. Es van processar les dades obtingudes i es van representar en gràfics. Algunes de les variables canviades van ser el desplaçament, el coeficient de fregament o la relació entre la freqüència natural i la freqüència externa.

Com a últim apartat es va estudiar la resposta òptica de partícules d'or, de plata i d'alumini. Els sistemes analitzats van ser diferents per tal de poder veure de quina manera influenciaven les diferents variables com l'entorn o el nombre de partícules involucrades. Les dades van ser extretes d'un programa creat pel científic a càrrec del projecte, Prof. Dr. Javier García de Abajo, i disponible a la seva pàgina web. En primer lloc, es va simular un sistema format per una única sola partícula de cada element (una per a cadascun dels sistemes definits) que es trobava en el buit. En segon lloc, els sistemes es van modificar amb l'addició d'una altra partícula (del mateix radi que la inicial) separada a una certa distància determinada de la primera i en el mateix entorn. Seguidament, es va variar el radi d'una de les dues partícules que formaven els sistemes anteriors. En últim terme, es va canviar l'entorn dels sistemes de manera que la constant dielèctrica fos diferent i no la del buit (1); els nous sistemes es situaven en l'aire, l'aigua i en diòxid de silici.

Finalment, es va realitzar una síntesi dels conceptes estudiats i apresos amb l'escriptura d'un informe final, on es van incloure les representacions gràfiques i el seu anàlisi.

### **Valoració del projecte**

Valoro positivament el projecte. Si bé és cert que l'organització es podria haver millorat per tal d'optimitzar al màxim el temps de l'estada, la tasca realitzada ha estat d'allò més enriquidora i els continguts, interessants i adequats. La independència horària ha facilitat l'accés al centre i ens ha fet gaudir d'una gran comoditat. A més a més, des de l'institut ens ha estat permesa la incorporació en

determinades conferències i activitats pròpies dels membres (estudiants universitaris i graduats) del *Summer Program* (un programa d'estiu propi de l'ICFO).

Per altra banda, poder inserir-se en un equip d'investigació sempre permet aprendre moltes coses. Disposar de científics de primera fila en el seu camp per tal de poder resoldre dubtes, preguntar-los inquietuds, veure com treballen i assistir en una posada en comú del treball setmanal és un luxe. Aquesta experiència m'ha permès veure com funciona un centre d'investigació punter en fòtonica. Oportunitats com aquesta permeten constatar i reafirmar que la investigació és un món apassionant; un món del qual m'agradaria formar part en un futur.

### Annexes

A continuació, es poden observar alguns dels gràfics realitzats. En primer lloc, tenim la representació gràfica dels tres tipus de casos d'un moviment harmònic:

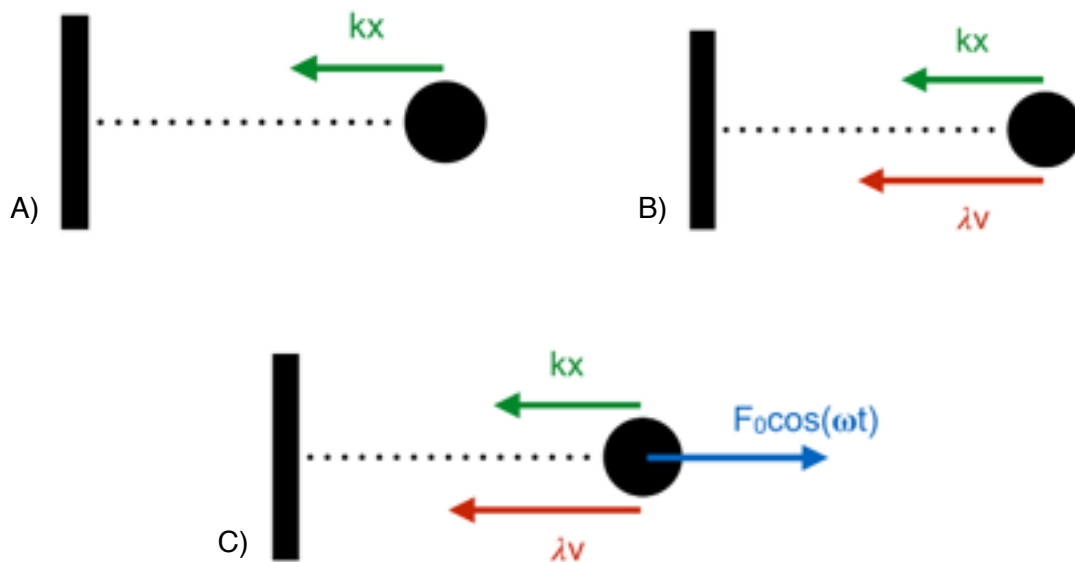


Figura 1: Gràfic on trobem l'esquematzació de les forces que intervenen en l'oscil·lador harmònic simple (A), l'oscil·lador harmònic esmorteït (B) i l'oscil·lador harmònic forçat esmorteït (C).

Amb un dels programes realitzats vam poder extreure dades que es corresponien al moviment d'un oscil·lador esmorteït en funció del temps (concretament, es representa el desplaçament en funció del temps multiplicat per la freqüència natural).

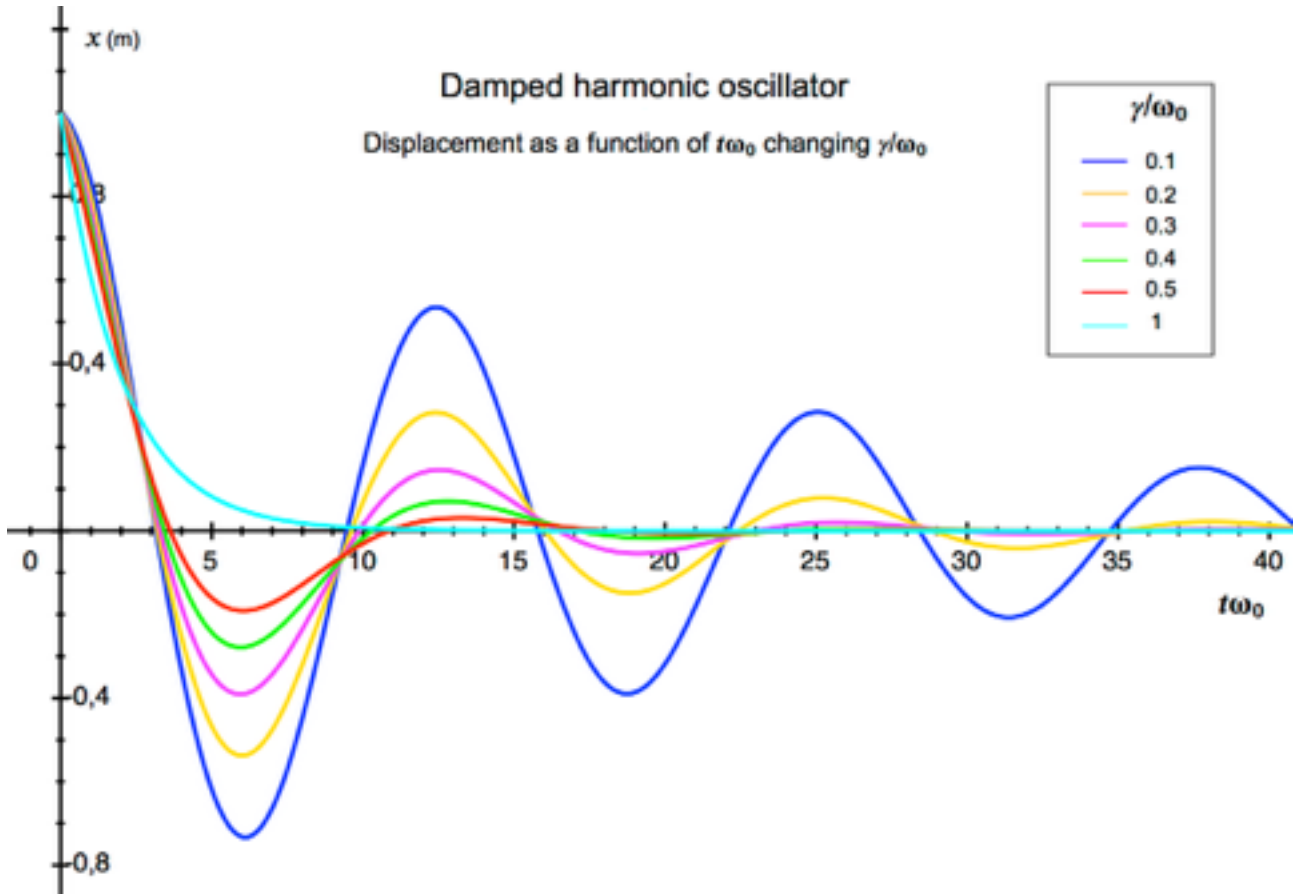


Figura 2: Representació del desplaçament en funció del temps multiplicat per la freqüència natural. Com es pot observar el coeficient de fregament s'incrementa.

Les conclusions que es poden extreure del gràfic (Figura 2) són que a mesura que el coeficient de fregament augmenta, l'oscil·lació s'atenua fins que és nul·la (quan el valor del coeficient de fregament és 1).

Un cop es va estudiar el cas general dels oscil·ladors harmònics es va passar a estudiar la resposta òptica de partícules, com ja s'ha comentat anteriorment. En primer lloc, es va estudiar un sistema format per una sola partícula, amb radi  $R$  que es variava, la qual era il·luminada amb llum, una radiació electromagnètica, i se situava en el buit. Es va estudiar un sistema per a cada tipus de partícula (d'or, de plata i de bronze); és a dir, tres sistemes en total. Concretament, es va estudiar l'evolució de la secció efectiva en funció de la freqüència. La secció efectiva, o *extinction cross*

*section*, es defineix com l'àrea geomètrica de la partícula que reflecteix i absorbeix llum (és a dir, l'àrea on succeeix la combinació d'aquests dos fenòmens).

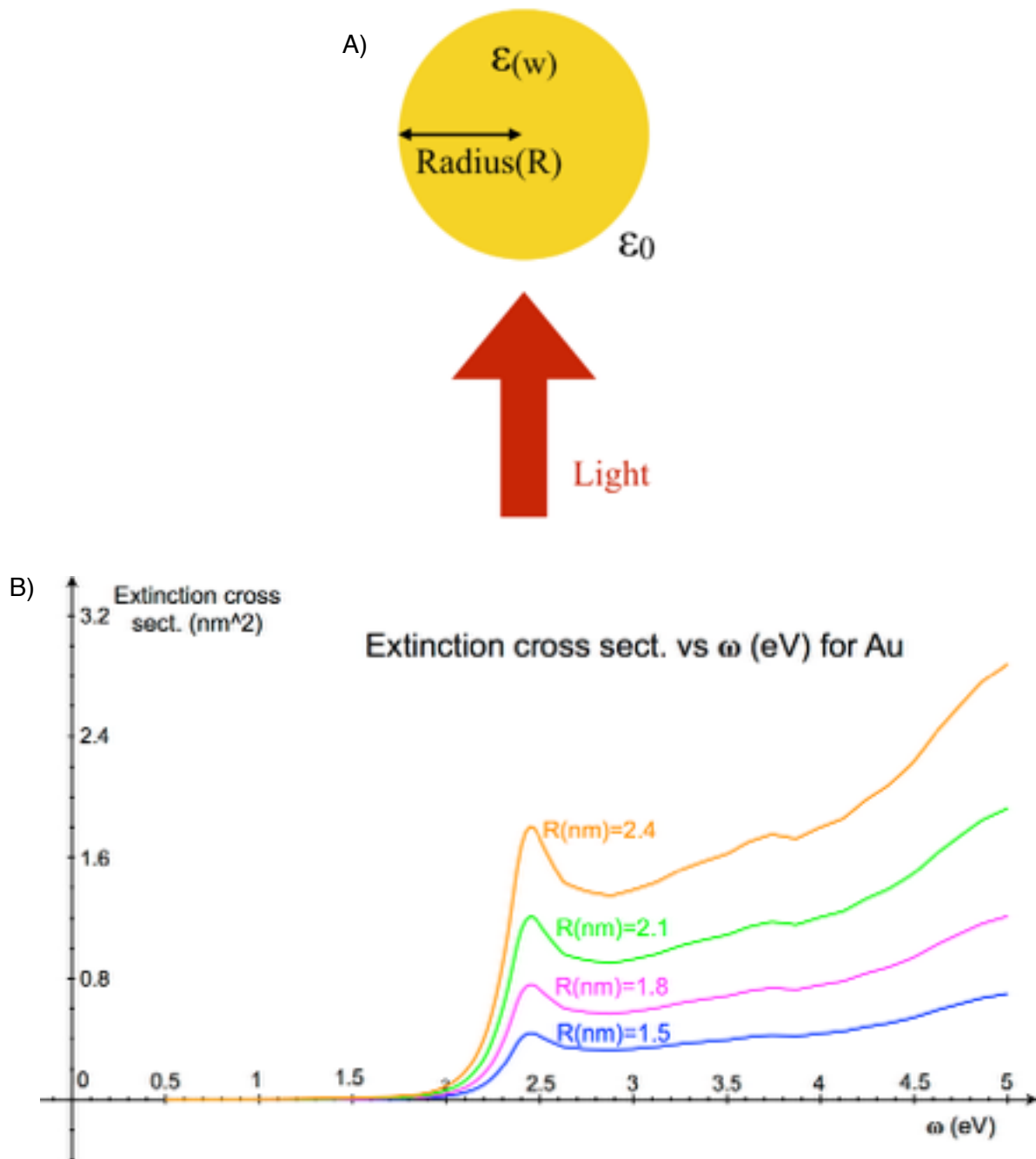


Figura 3: Esquema dels sistemes estudiats per a analitzar la resposta òptica de les partícules (A). Representació de la secció efectiva en funció de la freqüència amb un sistema format per una partícula d'or (B).

En aquesta figura (Figura 3), es pot observar com la secció efectiva a mesura que augmenta la freqüència de la llum incident també augmenta. El radi s'ha anat incrementant de manera que es pot afirmar que com més gran sigui aquest, la secció efectiva també ho serà (augmentarà a mesura que el radi és major). A més a més, es pot veure que a la freqüència de 2.45 eV hi ha un màxim relatiu.

El segon cas estudiat, va ser un sistema format per dues partícules del mateix radi (10 nm) separades a una distància  $D$  variant. Les partícules també estaven il·luminades amb llum i es va introduir un camo elèctric perpendicular a la llum.

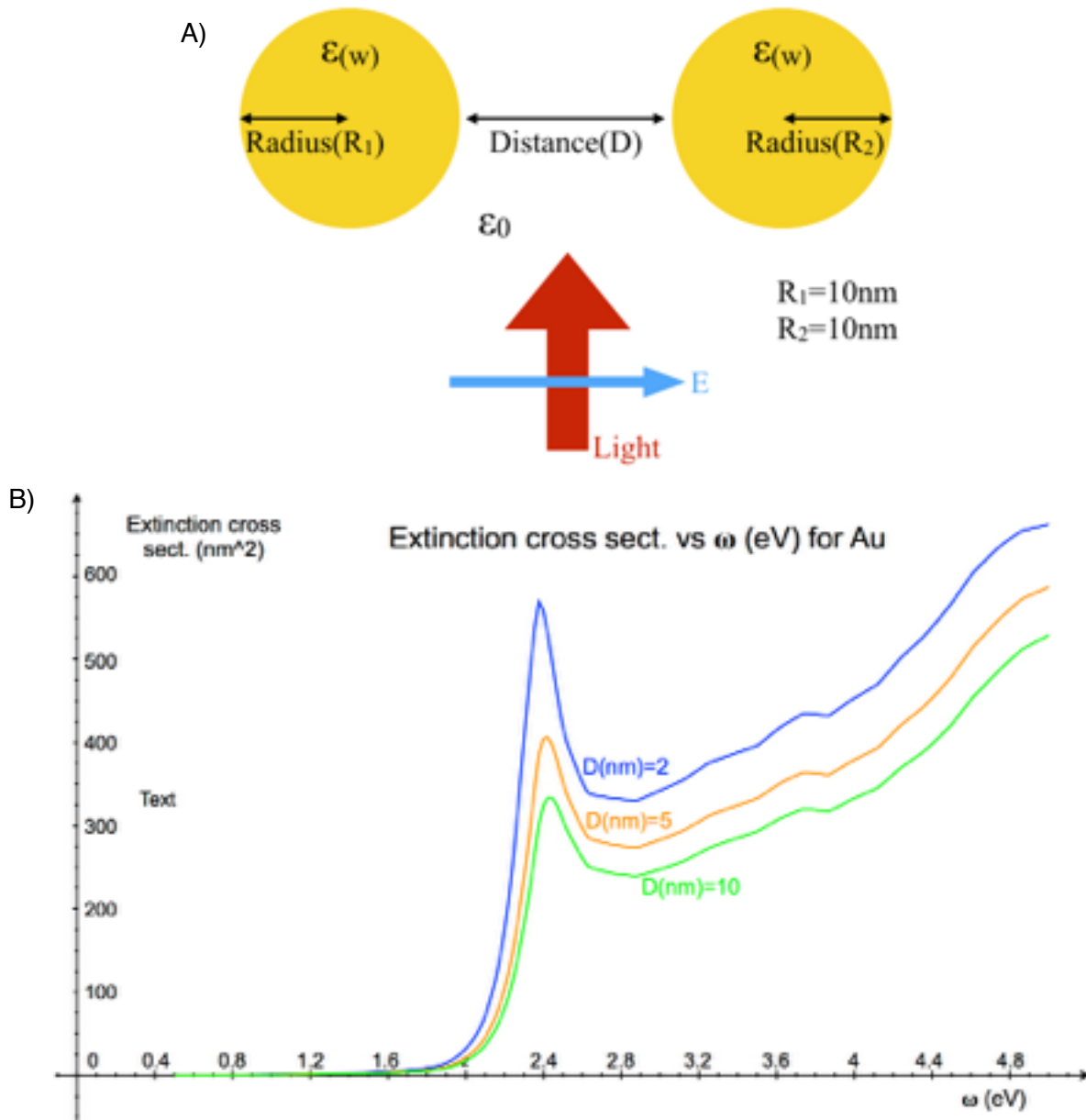


Figura 4: Esquema dels sistemes estudiats per a analitzar la resposta òptica de les partícules (A). Representació de la secció efectiva en funció de la freqüència amb un sistema format per dues partícules d'or amb el mateix radi (10 nm) i separades a distàncies concretes (B).

La figura (Figura 4) mostra la variació de la secció efectiva en el sistema format per dues partícules separades a una distància  $D$  que varia. Si comparem aquesta figura amb l'anterior (Figura 3) podem comprovar que tenen tendències anàlogues: s'observa un màxim relatiu a la mateixa freqüència



(2.45 eV) i, a mesura que aquesta (la freqüència) augmenta, la secció efectiva és major. A més a més, el gràfic ens proporciona una altra conclusió: com menys distància hi hagi entre les dues partícules, més secció efectiva hi haurà.

El tercer tipus de sistema ideat va estar format per dues partícules de radis diferents (10 i 5 nm respectivament) separades a una distància  $D$  que es variava. Les altres variables es van mantenir; és a dir, les partícules estaven il·luminades amb llum i hi havia un camp elèctric perpendicular a aquesta.

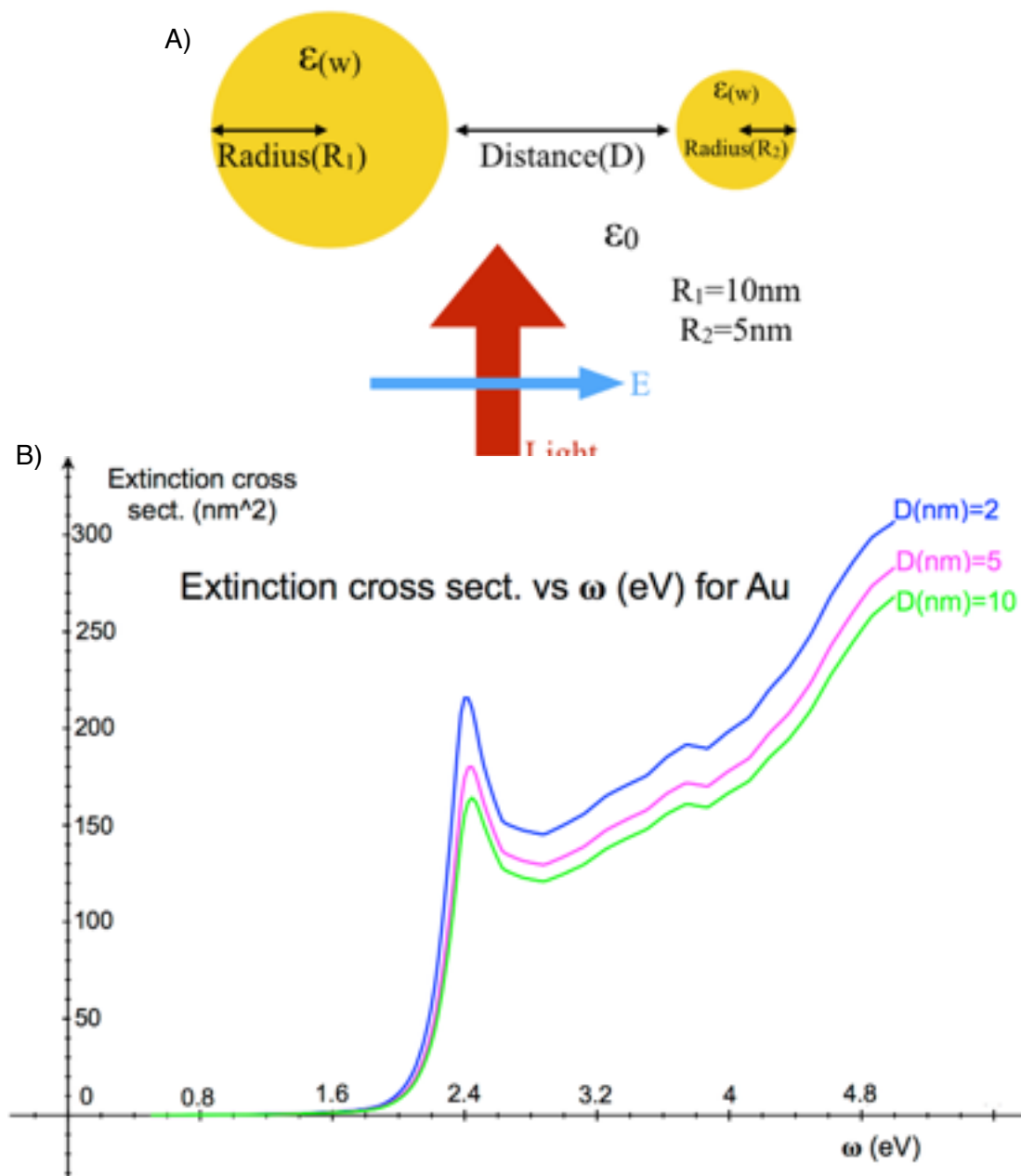


Figura 5: Esquema dels sistemes estudiats per a analitzar la resposta òptica de les partícules (A). Representació de la secció efectiva en funció de la freqüència amb un sistema format per dues partícules d'or de radis diferents (10 i 5 nm) i separades a distàncies concretes (B).

Aquest gràfic (Figura 5) permet observar la variació de la secció efectiva en el sistema format per dues partícules separades a una distància  $D$  variant. Si comparem aquesta figura amb les anteriors (Figura 3 i 4) podem comprovar que, efectivament, l'analogia es manté també en aquest sistema.

Finalment, l'últim sistema estudiat estava format per una sola partícula i el que es modificava en aquest cas era l'entorn (per tant, la constant dielèctrica de l'entorn). Es van escollir 3 medis: aire, aigua i diòxid de silici, com ja s'ha comentat abans.

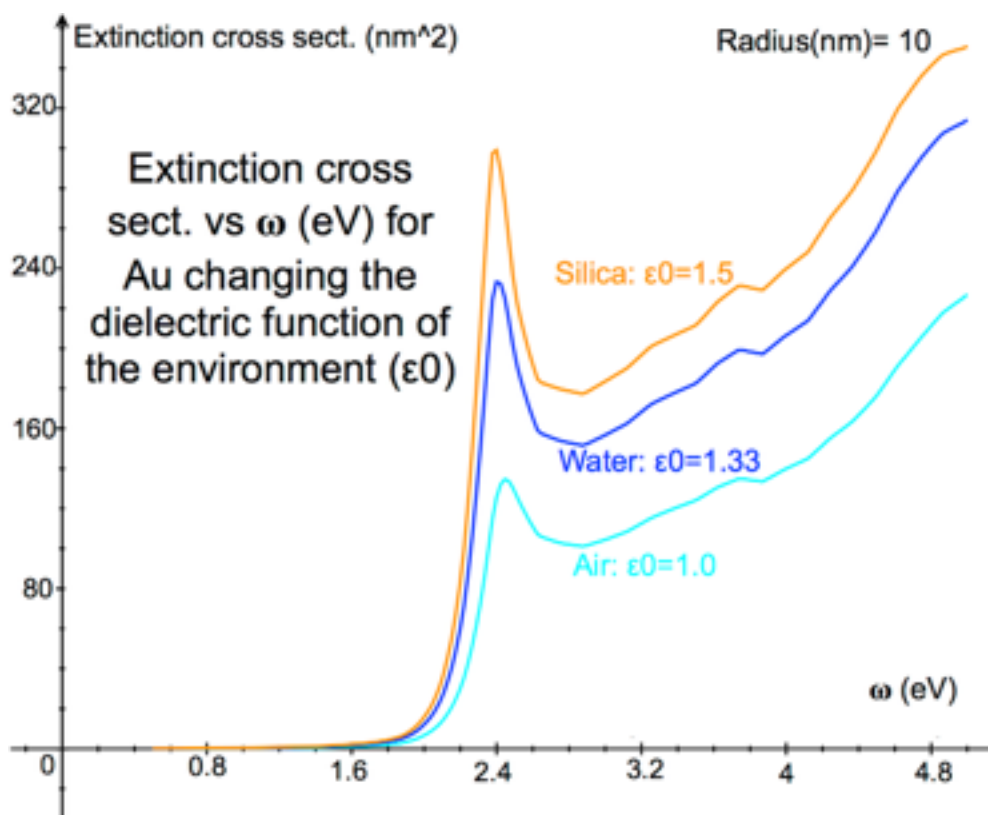


Figura 6: Gràfic que mostra la secció efectiva en funció de la freqüència de la llum incident d'una partícula d'or en diversos medis (aire, aigua i diòxid de silici).

El gràfic (Figura 6) manté l'analogia amb tots els altres sistemes formats per partícules d'or. A més, es pot extreure una conclusió més: com més petita sigui la constant dielèctrica, més gran serà la secció efectiva.