### **POLITECNICO DI MILANO** Facoltà di Ingegneria dei Sistemi

Corso di Laurea in Ingegneria Fisica Dipartimento di Fisica



# Simulazione di nanoantenne ottiche per applicazioni fotovoltaiche

Alunno Matricola Davide Bollini 721777

RelatoreProf. Marco FinazziCorrelatoreDott. Paolo Biagioni

Anno accademico 2009 – 2010

# Indice

| 1 | Introduzione alle nanoantenne ottiche                           |  |    |
|---|---|--|----|
|   | 1.1   | Antenne dipolari   | 6  |
|   | 1.2   | Scalabilità delle antenne                                    | 7  |
|   | 1.3   | Ricorso alle nanoantenne plasmoniche                         | 8  |
|   | 1.4   | Applicazione in ambito fotovoltaico                          | 9  |
| 2 | Plasmonica: interazione della luce con nanostrutture metalliche |  |    |
|   | 2.1   | Proprietà ottiche dei metalli                                | 11 |
|   | 2.2   | Plasmoni di superficie in nanostrutture sferiche             | 14 |
|   | 2.3   | Plasmoni di superficie in nanostrutture di diversa geometria | 16 |
| 3 | Il metodo delle differenze finite nel dominio del tempo (FDTD)  |  |    |
|   | 3.1   | L'algoritmo alle differenze finite di Yee                    | 24 |
|   | 3.2   | Accuratezza e stabilità                                      | 28 |
|   | 3.3   | Sorgenti e condizioni di troncamento del reticolo            | 29 |
|   | 3.4   | Struttura di una simulazione                                 | 33 |

| 4      | Simul   | azioni (                                  | di nanoantenne su substrato di vetro                 | 34 |
|--------|---------|---|--|----|
|        | 4.1     | Antenne dipolari                          |  | 35 |
|        |         | 4.1.1                                     | Parametri, materiali e geometrie                     | 35 |
|        |         | 4.1.2                                     | Presentazione degli spettri                          | 36 |
|        |         | 4.1.3                                     | Commenti e considerazioni                            | 39 |
|        |         | 4.1.4                                     | Fattore di qualità delle risonanze d'antenna         | 42 |
|        | 4.2     | Anten                                     | ne bowtie  | 47 |
|        |         | 4.2.1                                     | Parametri, materiali e geometrie                     | 47 |
|        |         | 4.2.2                                     | Presentazione degli spettri                          | 48 |
|        |         | 4.2.3                                     | Commenti e considerazioni                            | 50 |
|        | 4.3     | Confro                                    | onto tra antenne dipolari ed antenne bowtie          | 52 |
| 5      | Un ap   | plicazi                                   | one tecnologica: dispositivi fotovoltaici            | 54 |
|        | 5.1     | Simula                                    | azione di nanoantenne bowtie su substrato di silicio | 55 |
|        |         | 5.1.1                                     | Scelta dei materiali                                 | 55 |
|        |         | 5.1.2                                     | Scelta della geometria in funzione del substrato     | 56 |
|        | 5.2     | Presentazione e discussione degli spettri |  | 58 |
|        | 5.3     | Comportamento nel substrato               |  | 59 |
|        | 5.4     | Conclu                                    | usioni   | 60 |
| Biblio | ografia |   |  | 62 |

### Indice delle figure

# **Capitolo 1**

# Introduzione alle nanoantenne ottiche

Negli ultimi anni è andato crescendo l'interesse riguardo al fenomeno dell'interazione della luce con oggetti di dimensioni nanometriche.

Due ambiti di particolare rilevanza in cui tale interesse si profila sono quello dei dispositivi fotovoltaici [1] e quello dei circuiti ottici [2], entrambi accomunati dalla necessità di confinare l'onda luminosa in maniera efficiente.

A titolo introduttivo, sebbene questo lavoro abbia l'obiettivo di analizzare il primo ambito, è significativo presentare il problema riferendosi al contesto dei circuiti ottici.

In molti dispositivi elettronici di oggigiorno è ormai consueto trovare microprocessori realizzati con tecnologia produttiva nell'ordine dei 50 nm. Questo significa che i singoli transistor di cui si compongono hanno dimensioni prossime a tale valore.

I miliardi di transistor che compongono un microprocessore posseggono precise funzionalità in quanto collegati tra loro mediante altrettante connessioni di tipo elettrico, tipicamente in rame. In questo contesto appare evidente la difficoltà di gestione di tale insieme di connessioni, soprattutto considerando che non remota è la possibilità di dover connettere transistor tra loro distanti anche qualche centimetro.

Questa difficoltà si tramuta in sfida tecnologica nel momento in cui si ha presente che una connessione di tipo ottico, quale ad esempio la fibra ottica, ha prestazioni in termini di capacità di trasporto dati 1000 volte superiori rispetto alle connessioni tradizionali.

Le dimensioni di una connessione in fibra ottica non sono tuttavia compatibili con il sistema in esame, essendo queste 1000 volte superiori rispetto a quelle dei componenti elettronici sopra citati.

Così nell'esempio trattato e così negli altri ambiti [3], la soluzione ideale appare dunque quella di avere oggetti di dimensioni nanometriche in grado di gestire segnali ottici sia in trasmissione che in ricezione. Ciò porta inevitabilmente alla necessità di ricevere, trasportare e trasmettere segnali a lunghezze d'onda ottiche su dimensioni inferiori a quelle imposte dal limite di diffrazione. Un tipico circuito per il trasporto di un segnale ottico può essere costituito da: (i) un sistema ricevente; (ii) una linea di trasmissione e (iii) un sistema trasmittente. I metalli nobili, dotati di parte reale negativa della costante dielettrica a frequenze ottiche, sono in grado di sostenere oscillazioni di plasma superficiali e localizzate nelle quali il campo è confinato in regioni ben inferiori al limite di diffrazione. Si introduce così una nuova ottica, non più a base dielettrica bensì metallica.

La necessità di sistemi per la ricezione/trasmissione di segnali ottici a base metallica richiama immediatamente il concetto di antenna. Nel mio lavoro di tesi tali antenne di dimensioni nanometriche, definite dunque nanoantenne, sono state prese in considerazione portando conseguentemente, come esposto nel seguito, a dover considerare sia una nuova branca della fotonica chiamata plasmonica, sia un opportuno metodo di simulazione adatto allo studio di questi oggetti.

#### 1.1 Antenne dipolari

Le antenne sono dispositivi impiegati nella trasmissione e nella ricezione di onde elettromagnetiche. Il tipo più semplice di antenna è costituito dalla cosiddetta antenna a dipolo elettrico, formata da uno o più conduttori rettilinei.

Il funzionamento di una comune antenna dipolare, usata ad esempio per trasmissioni radio, è mostrato nel seguito, facendo riferimento alla fig. 1.1.



Figura 1.1: Antenna dipolare configurata in trasmissione.

Un generatore alternato ad alta frequenza  $\omega$  produce una corrente oscillante che dà luogo a un accumulo di cariche Q e - Q sulle due sfere rappresentate poste agli estremi dei due rami d'antenna.

Indicando con q il valore massimo di Q si ha l'espressione

 $Q(t) = q\cos(\omega t) \quad (1.1)$ 

Si ha allora una distribuzione di cariche con un momento di dipolo che varia armonicamente col tempo secondo la legge

$$p(t) = qA\cos(\omega t) \quad (1.2)$$

e quindi l'emissione di un'onda elettromagnetica che si propaga nello spazio.

Per aumentare l'efficienza dell'antenna è possibile porla in condizioni di risonanza, andando a configurare il parametro di lunghezza A pari ad un multiplo di  $\lambda/2$ . Avendo presente che l'impedenza di ingresso di un'antenna è definita come il rapporto tra la tensione e la corrente ai suoi morsetti di ingresso, si dice che l'antenna risuona quando la parte immaginaria dell'impedenza di ingresso è nulla, in analogia con i circuiti risonanti RLC. Quando l'antenna opera in condizioni di risonanza l'energia elettrica media e l'energia magnetica media immagazzinate nel suo campo vicino reattivo sono uguali.

#### 1.2 Scalabilità delle antenne

Avendo presente il funzionamento sopra presentato e volendo realizzare una antenna di dimensioni nanometriche viene in supporto il principio di scalabilità in frequenza delle equazioni di Maxwell.

Riducendo le dimensioni di una antenna di un certo coefficiente  $\alpha$ , la soluzione delle equazioni di Maxwell è difatti ancora valida ma a frequenze  $\alpha$  volte maggiori.

Traducendo ciò con un esempio, mostrato in fig. 1.2, ci si riferisce ad una antenna per trasmissioni a frequenze radio. Antenna di dimensioni macroscopiche, nell'ordine dei metri.

Volendo miniaturizzare tale antenna per renderla adatta al trattamento di frequenze corrispondenti alla luce visibile, seguendo il principio di scalabilità sopra esposto si scopre che è necessario miniaturizzarla sino a dimensioni nanometriche.

Tuttavia, con tale modus operandi, si presentano delle difficoltà e delle limitazioni. In primo luogo la sfida tecnologica di riuscire a produrre oggetti di tali dimensioni. In secondo luogo, le proprietà ottiche dei metalli introducono forti canali di perdita ohmica per le correnti in gioco.



**Figura 1.2:** Raffigurazione semplificata del concetto di miniaturizzazione di un'antenna a) di dimensioni macroscopiche atta alla ricezione di onde radio in un'antenna b) di dimensioni nanometriche per la ricezione di luce visibile.

#### **1.3 Ricorso alle nanoantenne plasmoniche**

Si fa dunque necessario il ricorso a tecniche in grado di migliorare la risposta alla luce visibile. La soluzione sta nell'andare a sfruttare fenomeni di risonanza degli elettroni di conduzione in grado di aumentare in maniera considerevole le prestazioni di assorbimento della luce. Per ottenere ciò vi è una possibilità tecnologica ad oggi in fase di studio: il ricorso ai cosiddetti fenomeni di risonanza plasmonica in sistemi di interfaccia con film metallici.

#### 1.4 Applicazione in ambito fotovoltaico

Come detto in principio, un possibile contesto di applicazione per le nanoantenne plasmoniche riguarda i dispositivi fotovoltaici. La possibilità offerta da tali antenne di confinare in maniera molto efficiente la luce visibile, e conseguentemente di poter aumentare le prestazioni di assorbimento della luce, è di grande interesse laddove si voglia andare ad implementare celle solari costituite da film sottili. Un settore questo in forte via di sviluppo, trainato da enormi prospettive di utilizzo in quanto potenzialmente in grado di andare a rimuovere la principale limitazione delle celle solari tradizionali, costituito dalla loro scarsa economicità.

Tale possibilità di interfacciamento tra la plasmonica e il fotovoltaico è l'argomento di interesse di questo lavoro. Andando a studiare le frequenze di risonanza per antenne nanostrutturate in oro ed argento (Cap. 4) si analizzeranno possibili configurazioni da applicare in ambito fotovoltaico, con particolare attenzione alle celle a base di silicio (Cap. 5).

### **Capitolo 2**

# Plasmonica: interazione della luce con nanostrutture metalliche

L'interazione della radiazione elettromagnetica con i metalli è fortemente dipendente dalla presenza in questi ultimi degli elettroni liberi di conduzione. Un gas di elettroni che oscilla ad una frequenza dipendente sia dal materiale sia dal campo elettrico incidente, in accordo con il modello di Drude [4]. Per lunghezze d'onda della radiazione incidente comprese nell'intervallo della luce visibile, considerando i metalli nobili, a questo comportamento è associata per alcuni particolari metalli una costante dielettrica negativa che si manifesta ad esempio con un'alta riflettività.

A queste lunghezze d'onda si denota inoltre la capacità da parte degli elettroni liberi del metallo di sostenere oscillazioni risonanti della densità di carica localizzate alla superficie. Oscillazioni che vanno sotto il nome di plasmoni di superficie e la cui esistenza è caratteristica dell'interazione della luce con nanostrutture metalliche, non facilmente riproducibili in altri intervalli spettrali come ad esempio con strutture metalliche di più ampie dimensioni interagenti con microonde.

E' di interesse considerare tali fenomeni di risonanza plasmonica in quanto contribuiscono ad amplificare l'intensità dei campi in essere in prossimità delle

superfici, come ad esempio in corrispondenza di una interfaccia con un dielettrico. Oltre a ciò, si manifestano un aumento dello scattering della luce incidente e la presenza di bande di assorbimento intense.

Lo studio di questi fenomeni va sotto il nome di plasmonica e in questo capitolo viene presentato a partire dalle proprietà ottiche dei metalli e proseguendo con l'analisi dell'interazione della luce con semplici strutture metalliche di dimensioni nanometriche.

#### 2.1 Proprietà ottiche dei metalli

L'interazione tra un campo elettromagnetico e il materiale in cui esso si propaga qualifica le proprietà ottiche del mezzo attraversato. Generalmente tale interazione si manifesta con effetti diversi a seconda del tipo di materiale in esame, ovvero se si tratta di materiale isolante, conduttore (metalli) o semiconduttore. Ciò che si ottiene è una descrizione delle proprietà ottiche del materiale tipicamente basata su due caratteristiche: l'indice di rifrazione complesso  $N = n_1 + in_2$  e la permettività elettrica complessa  $\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$ , due quantità tra loro legate dalla relazione  $N^2 = \varepsilon$ . Fenomeni di riflessione e trasmissione alle interfacce sono più comodamente descritti da  $n_1$  e  $n_2$  mentre per eventi di scattering ed assorbimento ci si riferisce a  $\varepsilon_1 \in \varepsilon_2$ .

Nel modello di Drude-Lorentz la descrizione di tali proprietà ottiche si basa sull'assunzione di approssimare il solido come un insieme di n-particelle cariche che si comportano come oscillatori armonici classici, dotati di massa *m*, carica *e* ed una frequenza propria di oscillazione  $\omega_0^2 = K/m$ , dove *K* indica la costante di richiamo all'equilibrio di Hooke. Questa è presente in quei materiali in cui gli elettroni sono legati con forza di richiamo al nucleo cui appartengono, come negli isolanti.

Per questi è possibile ricavare la dipendenza delle loro proprietà ottiche dalla frequenza, secondo l'espressione [5]

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{e^2 n}{\varepsilon_0 m} \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2) - i\gamma\omega} \qquad (2.1)$$

dove  $\gamma$  è il coefficiente di smorzamento, proporzionale a  $v_F / \Lambda$ , dove  $v_F$  è la velocità di Fermi e  $\Lambda$  il libero cammino medio degli elettroni tra due eventi di scattering. Nel caso dei metalli la costante di richiamo *K* è nulla, condizione che esprime il fatto che gli elettroni sono liberi. Si ha dunque un nuovo modello, denominato di Drude-Sommerfeld in cui la funzione dielettrica è data dall'equazione [4, 5]

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega} \qquad (2.2)$$

dove  $\omega_p = \sqrt{ne^2 / m_e \varepsilon_0}$  è la frequenza di plasma del gas di elettroni liberi. Per l'oro  $\omega_p \approx 13.8 \times 10^{15} \,\mathrm{s}^{-1}$  e  $\gamma \approx 1.075 \times 10^{14} \,\mathrm{s}^{-1}$  [4]. Usando questi valori nell'equazione (2.2) e tracciando si ottiene il grafico di fig. 2.1a, dove la funzione dielettrica ottenuta è comparata con i valori sperimentali presi da [6].

Dal grafico si nota come il modello di Drude-Sommerfeld dia risultati abbastanza accurati nella regione del vicino infrarosso, e che presenti invece evidenti lacune nella zona spettrale corrispondente alla luce visibile. Si vede infatti come a lunghezze d'onda inferiori a circa 550 nm la parte immaginaria misurata sperimentalmente aumenti in maniera considerevole rispetto a quanto indicato dalla (2.2). Questo perché fotoni incidenti ad alta energia possono eccitare elettroni dai livelli profondi alla banda di conduzione. In una visione classica queste transizioni possono essere descritte immaginando di eccitare le oscillazioni di questi elettroni legati, in maniera analoga a quanto visto per il modello di Drude-Lorentz. Tale contributo degli elettroni legati alla funzione dielettrica può essere scritto come [4]

$$\varepsilon_{corretta}(\omega) = 1 + \frac{\widetilde{\omega}_p^2}{(\omega_0^2 - \omega^2) - i\gamma\omega} \qquad (2.3)$$

dove  $\tilde{\omega}_p$  è introdotta in analogia con la frequenza di plasma del modello di Drude-Sommerfeld.

E' evidente come, pur con questo aggiustamento al modello, si stiano trascurando eventuali altre transizioni interbanda. Tuttavia, osservando la fig. 2.1a, ci si accorge che il grafico della parte reale della funzione dielettrica è in difetto di un valore circa costante in corrispondenza di tutti i punti. E' dunque possibile introdurre una correzione di offset  $\varepsilon_{\infty}$  considerandola come il contributo dovuto a tutte le altre transizioni interbanda non considerate nel modello.

Nel grafico di fig. 2.1b viene presentato l'andamento della funzione dielettrica in virtù delle correzioni al modello sin qui presentate, usando  $\tilde{\omega}_p = 4.5 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ ,  $\gamma = 9 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$ ,  $\omega_0 = 1.117 \times 10^{16} \text{ s}^{-1}$ , e  $\varepsilon_{\infty} = 6$  [4]. Si nota una evidente migliore corrispondenza con i valori sperimentali, dall'infrarosso sino a circa 450 nm, valore sotto il quale il modello presenta altri limiti.



**Figura 2.1a:** Confronto tra i dati sperimentali (punti, ref. [6]) e il modello (linee, (2.2)) per la funzione dielettrica (Permittivity) dell'oro.



**Figura 2.1b:** Confronto tra i dati sperimentali (punti, ref. [6]) e il modello corretto (linee, (2.3)) per la funzione dielettrica (Permittivity) dell'oro.

#### 2.2 Plasmoni di superficie in nanostrutture sferiche

Quando la luce illumina una particella due sono i principali fenomeni da considerare. I fotoni incidenti possono essere assorbiti dalla particella oppure venire diffusi in seguito all'interazione con essa. Si nota che l'intensità dell'assorbimento e la distribuzione angolare dei fotoni diffusi sono fortemente dipendenti dalla geometria e dal materiale della particella.

Per una particella circondata da un mezzo non assorbente è possibile definire una cross-section di estinzione dei fotoni incidenti come

$$\sigma_{ext} = \sigma_{ass} + \sigma_{diff} \qquad (2.4)$$

dove  $\sigma_{ass}$  e  $\sigma_{diff}$  sono rispettivamente le cross-section di assorbimento e di diffusione [7].

Per particelle di piccole dimensioni l'assorbimento è il processo dominante, mentre la rilevanza della diffusione aumenta all'incremento delle dimensioni della particella. Considerando un esempio, per una particella d'oro sferica di raggio 20 nm illuminata da luce con  $\lambda = 532$  nm si ha  $\sigma_{diff} / \sigma_{ass} \approx 7 \times 10^{-3}$  [8], valore che scala poi circa linearmente con il volume della particella.

Il problema dell'assorbimento e la diffusione di onde piane da parte di particelle sferiche di raggio e indice di rifrazione arbitrari è stato affrontato all'inizio del ventesimo secolo da Gustav Mie.

La teoria che porta il suo nome risolve il problema sfruttando la simmetria sferica del sistema, riscrivendo l'onda piana incidente come una sovrapposizione di onde sferiche ed ottenendo le componenti di campo interne e diffuse espresse come una serie infinita di armoniche sferiche vettoriali.

Nel nostro caso l'interesse è limitato alla situazione in cui il raggio della particella è molto minore rispetto alla lunghezza d'onda della luce incidente. In questo limite le cross-sections di estinzione e di diffusione che si ottengono sono espresse come [7]

$$\sigma_{ext} = \frac{8\pi^2 r^3 \sqrt{\varepsilon_m}}{\lambda} \left| \operatorname{Im} \left( \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_m}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_m} \right) \right|^2 \quad (2.5)$$
$$\sigma_{diff} = \frac{128\pi^4 r^6 \varepsilon_m^2}{3\lambda^4} \left| \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_m}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_m} \right|^2 \quad (2.6)$$

dove  $\varepsilon_1$  è la permettività (complessa e dipendente dalla frequenza) della sfera mentre  $\varepsilon_m$  è la permettività (reale) del mezzo circostante.

Si nota come esista un fenomeno di risonanza per entrambe le cross-sections in corrispondenza di  $\operatorname{Re}(\varepsilon_1) = -2\varepsilon_m$ , condizione che nell'intervallo delle lunghezze d'onda della luce visibile si ottiene utilizzando come materiale della sfera metalli nobili quali oro ed argento. Tali risonanze, dovute alle oscillazioni collettive degli elettroni liberi definite in precedenza come plasmoni, apportano forti amplificazioni dei campi prossimi alla superficie.

Tali risultati sono ottenibili anche con un altro approccio, considerando la polarizzabilità di una sfera sottoposta ad un campo elettrico che, istante per istante,

considerando valida l'approssimazione quasi-statica può essere trattato come statico ed uniforme. In queste condizioni il campo elettrico indotto all'interno della sfera può essere inteso come la somma di due componenti, una dovuta alle cariche positive dei nuclei e una alle cariche negative degli elettroni oscillanti in risposta al campo incidente.



Figura 2.2: Polarizzazione di una sfera sotto l'effetto di un campo E<sub>0</sub>.

Riferendosi alla fig. 2.2 si può scrivere [9]

$$\begin{cases} \vec{E}_{-} = -\frac{\rho}{3\varepsilon_{0}}\vec{r}_{-} \\ \vec{E}_{+} = \frac{\rho}{3\varepsilon_{0}}\vec{r}_{+} \end{cases}$$
(2.7)

definendo il campo indotto nella sfera come

$$\vec{E}_{IND} = \vec{E}_{-} + \vec{E}_{+} = -\frac{\rho}{3\varepsilon_{0}} (\vec{r}_{-} - \vec{r}_{+}) = -\frac{\rho \vec{d}}{3\varepsilon_{0}} = -\frac{\vec{p}}{3\varepsilon_{0}}$$
(2.8)

Il campo totale interno alla sfera viene dunque espresso come

$$\vec{E}_{INT} = \vec{E}_0 + \vec{E}_{IND} = \vec{E}_0 - \frac{\vec{p}}{3\varepsilon_0}$$
(2.9)  
dove  $\vec{p} = \varepsilon_0 \chi \vec{E}_0 = \varepsilon_0 (\varepsilon_1 - 1) \vec{E}_{INT}$ (2.10)

da cui si ottengono

$$\vec{E}_{INT} = \frac{3}{2+\varepsilon_1}\vec{E}_0 \quad (2.11)$$
$$\vec{p} = 3\varepsilon_0 \frac{\varepsilon_1 - 1}{\varepsilon_1 + 2}\vec{E}_0 \quad (2.12)$$

Il momento di dipolo della sfera di raggio R è dunque ottenuto come

$$\vec{\mu}_{p} = \frac{4}{3}\pi R^{3}\vec{p} = 4\pi R^{3}\varepsilon_{0}\frac{\varepsilon_{1}-1}{\varepsilon_{1}+2}\vec{E}_{0} \qquad (2.13)$$

Nel caso in cui il mezzo circostante alla sfera abbia una permittività  $\varepsilon_m$  si ottiene

$$\vec{\mu}_p = 4\pi R^3 \varepsilon_0 \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_m}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_m} \vec{E}_0 \qquad (2.14)$$

Si ritrova la stessa condizioni per la risonanza  $\operatorname{Re}(\varepsilon_1) = -2\varepsilon_m$ , ed è di interesse notare che con questo modello è possibile ottenere anche le stesse cross-sections ottenute con il modello di Mie, assumendo che le condizioni di staticità del dipolo (istante per istante) qui espresse possano essere traslate a frequenze ottiche.

La validità di tale approssimazione è verificata a patto che il raggio della sfera sia molto minore rispetto alla lunghezza d'onda della luce incidente.

#### 2.3 Plasmoni di superficie in nanostrutture di diversa geometria

Come anticipato nel precedente paragrafo, la geometria riveste un ruolo di fondamentale importanza nella progettazione di una nanostruttura. Al di fuori della sfera le uniche altre geometrie per le quali è semplice trovare soluzioni analitiche al problema dell'interazione con la luce sono gli ellissoidi.



Figura 2.3: Assi principali di un ellissoide.

Considerando nuovamente l'approssimazione quasi statica, la polarizzazione di un ellissoide di volume V e funzione dielettrica  $\varepsilon_1$  lungo uno degli assi indicati in fig. 2.3 è espressa come [10]

$$\vec{\mu}_{p} = \frac{4}{3}\pi V \frac{\varepsilon_{1} - \varepsilon_{m}}{P_{j}\varepsilon_{1} + (1 - P_{j})\varepsilon_{m}} \qquad (2.15)$$

dove  $P_j$  è un parametro geometrico adimensionale dipendente esclusivamente dal rapporto tra gli assi caratteristici dell'ellissoide [11].

Quello che si nota è che rispetto alla situazione sferica la condizione di risonanza ha in aggiunta una dipendenza rispetto alla polarizzazione del campo incidente.



Figura 2.4: Due possibili polarizzazioni della luce incidente nel caso di uno sferoide prolato.

In fig. 2.4 sono mostrati due casi di interesse, laddove si hanno polarizzazione e conseguenti risonanze trasversali e longitudinali rispetto all'asse principale  $a_1$ . Nella situazione di luce polarizzata trasversalmente, nel caso in cui i due assi minori  $a_2 = a_3$  (sferoide prolato) siano sufficientemente piccoli si denota una risonanza che in prima approssimazione coincide con quella della situazione sferica. Nel secondo caso invece, con luce incidente polarizzata longitudinalmente, si manifesta una marcata tendenza del sistema ad avere risonanza a frequenze sempre minori all'aumentare del rapporto  $a_1/a_2$ .

A dimostrazione di ciò vengono presentati a confronto in fig. 2.5 i risultati di due simulazioni in cui sono stati ricavati gli spettri di risonanza, calcolati registrando l'intensità locale di campo in prossimità della nanostrutture stessa rispettivamente per una sfera di raggio pari a 10 nm e un ellissoide con  $a_1 = 25$  nm e  $a_2 = a_3 = 10$  nm.



**Figura 2.5:** Spettri di risonanza normalizzati per una nanostruttura sferica ed una ellissoidale, monitorati a 3 nm dalla superficie.

Appare evidente lo spostamento in frequenza verso l'infrarosso nel caso dell'ellissoide.

E' interessante inoltre presentare per entrambi i casi le distribuzioni spaziali di intensità di campo su un piano che taglia a metà la struttura, mostrate in fig. 2.6. Qui l'intensità di campo è rappresentata normalizzata al campo incidente, in modo da mettere in luce il guadagno locale di intensità.

E' possibile notare la chiara struttura dipolare della distribuzione ed il confinamento spaziale dei campi in prossimità delle superfici dovuto al fenomeno di risonanza plasmonica, nel caso di polarizzazione del campo incidente longitudinale all'asse orizzontale.



Figura 2.6a: Profilo di intensità di campo nel caso di una sfera.



**Figura 2.6b:** Profilo di intensità di campo nel caso di un ellissoide.

E' possibile ottenere un ulteriore spostamento verso l'infrarosso della frequenza di risonanza ricorrendo ad una configurazione a duplice struttura, data ad esempio dall'accoppiamento di due ellissoidi, come mostrato in fig. 2.7.



**Figura 2.7:** Nanostruttura composta dall'accoppiamento di due ellissoidi.

In questa situazione ognuno dei due ellissoidi risente del campo di dipolo dell'altro. Tale contributo si somma costruttivamente al campo esterno facendo si che la risonanza avvenga ad energie ancora minori rispetto a quelle del singolo ellissoide. Come vedremo in seguito, questa struttura accoppiata è quella a cui più tipicamente si ricorre per realizzare nanoantenne plasmoniche a frequenze ottiche.

# **Capitolo 3**

# Il metodo delle differenze finite nel dominio del tempo (FDTD)

Come visto nel precedente capitolo, quando la luce interagisce con una o più nanostrutture metalliche è possibile progettare il sistema il sistema per avere diverse frequenze di risonanza plasmonica, facendo leva su due parametri quali il materiale e la geometria della nanostruttura.

E' dunque di evidente interesse per il progettista poter avere dei riferimenti su cui basare la realizzazione del sistema. Come prima opzione è intuitivo pensare di ricorrere ad un procedimento in serie, preparando e sottoponendo all'esperimento un gran numero di nanostrutture, andando ad analizzare i risultati a posteriori. Trattandosi tuttavia di oggetti di dimensioni nanometriche tali realizzazioni risultano essere tecnologicamente complesse e il procedimento nel suo insieme sconveniente. In conseguenza a ciò è manifesta l'importanza di poter simulare a priori le nanostrutture di interesse. A questo punto si palesa però un altro limite, presentato nel precedente capitolo, riguardo alla possibilità di poter risolvere analiticamente il problema per sole strutture sferiche o ellissoidali.

E' dunque necessario ricorrere ad un approccio di simulazione computazionale, in questo contesto basata sul metodo delle differenze finite nel dominio del tempo (FDTD) proposto nel 1966 da Yee [12]. Tale metodo, approfondito negli anni successivi [13, 14], viene presentato brevemente nel proseguo di questo capitolo.

#### 3.1 L'algoritmo alle differenze finite di Yee

In un mezzo isotropo le equazioni di Maxwell si presentano come

$$\nabla \times \vec{E} = -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \qquad (3.1a)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \sigma \vec{E} + \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$
 (3.1b)

dove  $\mu$  è la permeabilità magnetica,  $\sigma$  è la conducibilità elettrica e  $\varepsilon$  la permettività. Tali equazioni rappresentano un sistema di sei equazioni che in coordinate cartesiani viene espresso come

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right) \quad (3.2a)$$

$$\frac{\partial H_{y}}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_{z}}{\partial x} - \frac{\partial E_{x}}{\partial z} \right) \quad (3.2b)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right) \quad (3.2c)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} - \sigma E_x \right) \quad (3.2d)$$

$$\frac{\partial E_{y}}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{\partial H_{x}}{\partial z} - \frac{\partial H_{z}}{\partial x} - \sigma E_{y} \right) \quad (3.2e)$$
$$\frac{\partial E_{z}}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{\partial H_{y}}{\partial x} - \frac{\partial H_{x}}{\partial y} - \sigma E_{z} \right) \quad (3.2f)$$

Il problema viene a questo punto affrontato discretizzando lo spazio con un reticolo tridimensionale, chiamato reticolo di Yee, descritto dalle coordinate (i,j,k), definite come

$$(i, j, k) = (i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z)$$
 (3.3)

dove  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \delta$  è l'incremento spaziale tra due punti primi vicini appartenenti al reticolo tridimensionale di Yee. Ogni funzione dello spazio e del tempo viene scritta dunque come

$$F^{n}(i, j, k) = F(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t) \quad (3.4)$$

dove  $\Delta t$  è l'incremento temporale tra due step computazionali e *n* l'indice temporale di questi. Le derivate spaziali e temporali di *F* vengono dunque scritte usando l'approssimazione centrale alle differenze finite risultando

$$\frac{\partial F^{n}(i,j,k)}{\partial x} = \frac{F^{n}(i+1/2,j,k) - F^{n}(i-1/2,j,k)}{\delta}$$
(3.5a)

$$\frac{\partial F^{n}(i,j,k)}{\partial y} = \frac{F^{n}(i,j+1/2,k) - F^{n}(i,j-1/2,k)}{\delta}$$
(3.5b)

$$\frac{\partial F^{n}(i,j,k)}{\partial z} = \frac{F^{n}(i,j,k+1/2) - F^{n}(i,j,k-1/2)}{\delta}$$
(3.5c)

$$\frac{\partial F^{n}(i,j,k)}{\partial t} = \frac{F^{n+1/2}(i,j,k) - F^{n-1/2}(i,j,k)}{\Delta t} \quad (3.5d)$$

Applicando le equazioni (3.5) alle sei equazioni scalari (3.2) si ottengono esplicitate le sei equazioni alle differenze finite proprie dell'approssimazione dell'algoritmo di Yee

$$E_{x}^{n+1}(i+1/2,j,k) = A_{i+1/2,j,k}E_{x}^{n}(i+1/2,j,k) + B_{i+1/2,j,k}\left[H_{z}^{n+1/2}(i+1/2,j+1/2,k) - H_{z}^{n+1/2}(i+1/2,j-1/2,k) + H_{y}^{n+1/2}(i+1/2,j,k-1/2) - H_{y}^{n+1/2}(i+1/2,j,k+1/2)\right]$$
(3.6a)

$$E_{y}^{n+1}(i, j+1/2, k) = A_{i,j+1/2,k}E_{y}^{n}(i, j+1/2, k) + B_{i,j+1/2,k}\left[H_{x}^{n+1/2}(i, j+1/2, k+1/2) - H_{x}^{n+1/2}(i, j+1/2, k-1/2) + H_{z}^{n+1/2}(i-1/2, j+1/2, k) - H_{z}^{n+1/2}(i+1/2, j+1/2, k)\right]$$
(3.6b)

$$E_{z}^{n+1}(i, j, k+1/2) = A_{i,j,k+1/2}E_{z}^{n}(i, j, k+1/2) + B_{i,j,k+1/2}\left[H_{y}^{n+1/2}(i+1/2, j, k+1/2) - H_{y}^{n+1/2}(i-1/2, j, k+1/2) + H_{x}^{n+1/2}(i, j-1/2, k+1/2) - H_{x}^{n+1/2}(i, j+1/2, k+1/2)\right]$$
(3.6c)

$$H_{x}^{n+1/2}(i, j+1/2, k+1/2) = H_{x}^{n-1/2}(i, j+1/2, k+1/2) + \frac{\Delta t}{\mu\delta} \Big[ E_{y}^{n}(i, j+1/2, k+1) - E_{y}^{n}(i, j+1/2, k) + E_{z}^{n}(i, j, k+1/2) - E_{z}^{n}(i, j+1, k+1/2) \Big]$$
(3.6d)

$$H_{y}^{n+1/2}(i+1/2, j, k+1/2) = H_{y}^{n-1/2}(i+1/2, j, k+1/2)$$
  
+  $\frac{\Delta t}{\mu\delta} \Big[ E_{z}^{n}(i+1, j, k+1/2) - E_{z}^{n}(i, j, k+1/2)$   
+  $E_{x}^{n}(i+1/2, j, k) - E_{x}^{n}(i+1/2, j, k+1) \Big]$ (3.6e)

$$H_{z}^{n+1/2}(i+1/2, j+1/2, k) = H_{z}^{n-1/2}(i+1/2, j+1/2, k)$$
  
+  $\frac{\Delta t}{\mu\delta} \Big[ E_{x}^{n}(i+1/2, j+1, k) - E_{x}^{n}(i+1/2, j, k) + E_{y}^{n}(i, j+1/2, k) - E_{y}^{n}(i+1, j+1/2, k) \Big]$  (3.6f)

dove i termini A e B sono dati da

$$A_{i,j,k} = 1 - \frac{\sigma(i,j,k)}{\varepsilon(i,j,k)} \quad (3.7)$$

$$B_{i,j,k} = \frac{\Delta t}{\varepsilon(i,j,k)\delta} \qquad (3.8)$$

In tutte le equazioni alle differenze finite le componenti di  $\vec{E}$  e  $\vec{H}$  sono localizzate in una cella unitaria del reticolo tridimensionale di Yee, come presentato in fig. 3.1

In tale figura e dalle equazioni (3.6) si nota che le componenti di  $\vec{E}$  e  $\vec{H}$  vengono calcolate in maniera alternata con uno sfasamento di metà intervallo temporale  $\Delta t$ .



**Figura 3.1:** Posizione delle componenti di campo in una cella unitaria del reticolo di Yee. • e • rappresentano due istanti temporali diversi.

#### 3.2 Accuratezza e stabilità

Per ottenere risultati accurati, la spaziatura  $\delta$  della griglia nella simulazione alle differenze finite deve essere più piccola rispetto alla lunghezza d'onda della radiazione incidente. Nelle simulazioni effettuate nel corso di questo lavoro, è stato scelto un valore di  $\delta$  di circa 1 nm, molto minore alla lunghezza d'onda coinvolta, compresa tra 300 e 1200 nm.

Per quanto riguarda invece la spaziatura temporale  $\Delta t$  tra due step computazionali si considera la seguente condizione di stabilità

$$v_{\max}\Delta t \le \left[\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}\right]^{-1/2}$$
 (3.9)

dove  $v_{\text{max}}$  è la massima velocità di fase dell'onda. Considerando sempre il caso di un reticolo tridimensionale cubico con  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \delta$ , si ottiene la condizione di stabilità diventa

$$\frac{v_{\max}\Delta t}{\delta} \le \frac{1}{\sqrt{3}} \qquad (3.10)$$

Tipicamente all'interno del reticolo si possono avere regioni di materiale diverso. Per sostenere tale ulteriore variabilità del problema il modello richiede di definire per ogni gruppo di celle corrispondenti ad un diverso materiale i parametri di permittività  $\varepsilon(i, j, k)$  e conducibilità  $\sigma(i, j, k)$ .

#### 3.3 Sorgenti e condizioni di troncamento del reticolo

Considerando di utilizzare nella simulazione una sorgente monocromatica, il campo incidente è definito come

$$E^{inc}(x, y, z) = E_0(x, y, z) \sin(\omega t) \quad (3.11)$$

Considerando che la radiazione incidente contenga unicamente la componente  $E_x$  e che si propaghi lungo la alla direzione z, la forma discretizzata corrispondente alla (3.11) da considerarsi nel modello diventa

$$E_x^{inc}(i+1/2, j, k) = E_0(i+1/2, j, k) \sin(2\pi f n \delta t) \quad (3.12)$$

In maniera similare è possibile utilizzare nel modello altri generi di sorgente, quale ad esempio una sorgente di tipo gaussiano, utilizzata in tutte le simulazioni presentate nel prossimo capitolo.

Considerando quanto sin qui esposto, appare chiara la necessità di porre dei limiti alle dimensioni del reticolo. Per venire incontro alla finita capacità computazionale dei calcolatori è necessario dunque porre una limitazione artificiale allo spazio considerato nella simulazione. Limitazione che al contempo deve essere in grado di sostenere a livello numerico un'illusione di spazio infinito.

La scelta di tale contorno artificiale è dunque limitata da una parte dalla capacità elaborativa dei calcolatori e dall'altra dalla necessità di dover troncare lo spazio simulato a una distanza sufficientemente lontana dai centri di interesse della simulazione.

Tra le tecniche di troncamento si considera ad esempio la *Perfectly Matched Layer* (PML), tecnica che consiste nel porre del materiale assorbente ai confini del dominio spaziale della simulazione [13, 14]. Questo permette di ottenere che le onde incidenti su tali bordi non vengano riflesse, ma completamente assorbite, rendendo di fatto una situazione equivalente ad uno spazio infinito.



**Figura 3.2:** Trasmissione priva di riflessione per un'onda incidente all'interfaccia FDTD Region / PML Region.

Si considera un'illustrazione semplificata della tecnica PML valutando le equazioni di Maxwell per un campo incidente all'interfaccia privo di componenti elettriche nella direzione di propagazione, e dunque risultando con le sole  $E_x$ ,  $E_y$  e  $H_z$ . Si ottengono

$$\varepsilon_0 \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma E_x = \frac{\partial H_z}{\partial y}$$
 (3.13a)

$$\varepsilon_0 \frac{\partial E_y}{\partial t} + \sigma E_y = -\frac{\partial H_z}{\partial x}$$
 (3.13b)

$$\mu_0 \frac{\partial H_z}{\partial t} + \sigma * H_z = \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \qquad (3.13c)$$

dove il materiale della regione PML è caratterizzato da una conducibilità elettrica  $\sigma$ e da una conducibilità magnetica  $\sigma^*$ , legate tra loro dalla relazione

$$\frac{\sigma}{\varepsilon_0} = \frac{\sigma^*}{\mu_0} \qquad (3.14)$$

Questa assicura un livello appropriato di attenuazione (l'onda trasmessa si attenua esponenzialmente all'interno della regione PML) e permette una trasmissione all'interfaccia priva di riflessione. Ciò tuttavia è evidente che la radiazione all'interfaccia può anche incidere obliquamente, ed è necessario dunque espandere le condizioni sopra riportate affinché anche in questi casi sia assicurata la trasmissione priva di riflessione. Per ottenere ciò la conducibilità del materiale PML deve possedere una certa anisotropia, che qui definiamo con le componenti  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_x^*$  e  $\sigma_y^*$ . Ci si trova dunque a considerare un sistema di quattro equazioni così espresso

$$\varepsilon_0 \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma_y E_x = \frac{\partial (H_{zx} + H_{zy})}{\partial y}$$
 (3.15a)

$$\varepsilon_0 \frac{\partial E_y}{\partial t} + \sigma_x E_y = -\frac{\partial (H_{zx} + H_{zy})}{\partial x}$$
 (3.15b)

$$\mu_0 \frac{\partial H_{zx}}{\partial t} + \sigma_x * H_{zx} = -\frac{\partial E_y}{\partial x} \qquad (3.15c)$$

$$\mu_0 \frac{\partial H_{zy}}{\partial t} + \sigma_y * H_{zy} = \frac{\partial E_x}{\partial y} \quad (3.15\text{d})$$

Tali equazioni possono essere discretizzate in maniera similare a quanto visto per le (3.2) ottenendo così le equazioni alle differenze finite da inserire nella simulazione riguardo ai confini PML.

#### 3.4 Struttura di una simulazione

Forte degli elementi sin qui presentati, all'atto finale una singola simulazione si sviluppa in questo modo:

- (i) Illuminazione del sistema con un impulso breve, dunque con una sorgente ad ampio spettro
- (ii) Simulazione della dinamica del sistema per un tempo sufficiente all'esaurimento della risposta all'impulso e ritorno a regime
- (iii) Ottenimento per ogni punto della griglia dell'andamento dei campi in funzione del tempo
- (iv) Applicazione della trasformata di Fourier e ottenimento dello spettro corrispondente a quanto trovato nel punto precedente
- (v) Normalizzazione alla sorgente mediante divisione dello spettro ottenuto per la trasformata di Fourier della sorgente.
- (vi) Antitrasformazione dello spettro normalizzato per ottenere la risposta a regime in continua del sistema

Il metodo FDTD si dimostra dunque essere una tecnica di simulazione computazione con numerosi vantaggi. Concettualmente semplice, l'algoritmo non richiede il ricorso a complesse equazioni integrali. Strutture disomogenee in prima analisi complicate possono essere facilmente simulate con il semplice inserimento dei rispettivi parametri  $\sigma$ ,  $\mu \in \varepsilon$ .

Oltre a ciò, ultimo in ordine di citazione ma non in ordine di importanza, il metodo ha il vantaggio di non richiedere sistemi computazionali economicamente proibitivi e può sfruttare al meglio le opportunità di calcolo parallelo dei moderni sistemi multiprocessore.

# **Capitolo 4**

# Simulazioni di nanoantenne su substrato di vetro

Tenendo in considerazione quanto esposto nei precedenti capitoli, al principio del mio lavoro di tesi è stata evidente la necessità di andare a simulare il comportamento di un ampio set di nanoantenne, con l'obiettivo di palesare la dipendenza dai materiali e dalle geometrie. A tale scopo le antenne vengono simulate su un substrato trasparente (fused silica), le cui proprietà ottiche non influenzano significativamente il comportamento dell'antenna, permettendo dunque in prima istanza di concentrare l'analisi sulle proprietà intrinseche dell'antenna.

In questo capitolo vengono presentati, discussi ed infine confrontati i risultati ottenuti per le due principali classi di nanoantenne da me considerate: nanoantenne dipolari e nanoantenne bowtie.

#### 4.1 Antenne dipolari

#### 4.1.1 Parametri, materiali e geometrie

Le prime ad essere simulate sono state le nanoantenne dipolari, nanostrutture di semplice geometria formate da due parallelepipedi rettangoli di dimensioni e posizione come illustrato in fig. 4.1.



**Figura 4.1:** Geometria di una nanoantenna dipolare, con la lunghezza L unica variabile di simulazione.

Queste sono state poste su di un substrato piano di vetro (fused silica), mentre lo spazio rimanente è stato considerato vuoto.

I materiali studiati sono stati l'oro e l'argento, le cui funzioni dielettriche sono state ottenute da dati sperimentali [6]. Per entrambi sono state vagliate lunghezze L della nanoantenna pari a 100 nm, 150 nm, 200 nm, 250 nm e 300 nm, da qui in avanti indicate rispettivamente con le diciture L100, L150, L200, L250 e L300.

In tutti i casi la sorgente luminosa simulata incide perpendicolarmente al piano dell'interfaccia tra antenna e substrato, allineata con il centro della gap e polarizzata longitudinalmente rispetto all'asse lungo delle nanostrutture.

#### 4.1.2 Presentazione degli spettri

Prime ad essere simulate sono state le cinque nanoantenne dipolari in oro. Ricordando quanto esposto nel Cap. 2 riguardo agli effetti dovuti alle risonanze plasmoniche di primo interesse è stato andare a valutare le intensità di campo presenti all'interno delle gap di ogni antenna, considerandole in funzione della frequenza della radiazione incidente. La regione della gap è infatti quella in cui maggiormente si concentra il campo locale in una struttura ad antenna. In questo modo, registrando l'intensità di campo al centro della gap, sono state trovate le frequenze di risonanza in corrispondenza delle quali si manifestano dei picchi di intensità, come mostrato in fig. 4.2a e fig. 4.2b. Nell'intervallo spettrale considerato ogni nanoantenna presenta un solo picco di intensità, corrispondente al primo modo longitudinale di risonanza plasmonica.



Figura 4.2a: Spettro di risonanza per le cinque nanoantenne in oro.



**Figura 4.2b:** Spettro di risonanza normalizzato per le cinque nanoantenne in oro.

In maniera analoga si è proceduto simulando le nanoantenne di argento, ottenendo gli spettri mostrati in fig. 4.3a e fig 4.3b.



Figura 4.3a: Spettro di risonanza per le cinque nanoantenne in argento.



**Figura 4.3b:** Spettro di risonanza normalizzato per le cinque nanoantenne in argento.

Di interesse è stato in seguito visualizzare la distribuzione spaziale dell'intensità di campo in corrispondenza delle frequenze di risonanza, così da studiare la localizzazione del campo dovuta alle risonanze plasmoniche localizzate. Si consideri ad esempio la distribuzione di intensità di campo per una nanoantenne L100 d'oro, mostrata in fig. 4.4, dove si vede che i campi sono effettivamente ben concentrati nella gap, a conferma del fatto che l'antenna è in grado di amplificare localmente i campi.



**Figura 4.4:** Distribuzione dell'intensità di campo mostrata mediante un monitor spaziale bidimensionale posizionato 5 nm sopra alla nanoantenna (indicata in tratteggio) L100 in oro.

#### 4.1.3 Commenti e considerazioni

Osservando gli spettri presentati nel precedente paragrafo è immediato notare la presenza di una dipendenza della frequenza di risonanza dalla lunghezza dell'antenna. All'aumentare della lunghezza della nanostrutture il manifestarsi del fenomeno di risonanza si sposta a frequenze sempre minori. Tale relazione viene presentata per le nanoantenne in oro in fig. 4.5a e per le nanoantenne in argento in fig 4.5b. In entrambi i casi viene palesata una dipendenza di tipo circa lineare, così come presentato in [15] ed evidenziato attraverso l'interpolazione lineare in figura.

Risulta altresì evidente una simile dipendenza per quanto riguarda l'ampiezza dei picchi di intensità corrispondenti alle risonanze, come mostrato per entrambi i materiali nelle fig 4.6.



**Figura 4.5a:** Dipendenza della lunghezza d'onda corrispondente alla frequenza di risonanza rispetto alla lunghezza della nanoantenna in oro.



**Figura 4.5b:** Dipendenza della lunghezza d'onda corrispondente alla frequenza di risonanza rispetto alla lunghezza della nanoantenna in argento.



**Figura 4.6a:** Dipendenza dell'intensità massima del picco di risonanza rispetto alla lunghezza della nanoantenna in oro.



**Figura 4.6b:** Dipendenza dell'intensità massima del picco di risonanza rispetto alla lunghezza della nanoantenna in argento.

Come detto tali valori sono stati misurati con un monitor puntuale posto al centro della gap. Tornando ad osservare la fig. 4.3 si nota come l'intensità di campo

ottenuta in condizioni di risonanza plasmonica sia fortemente localizzata proprio all'interno della gap, rendendola di fatto un ottimo punto di monitoraggio.

L'aumento dell'intensità locale di campo con il crescere della lunghezza dell'antenna può essere attribuito principalmente alla riduzione dell'assorbimento con lo spostarsi della risonanza verso frequenze sempre più basse e ad un maggiore "effetto punta" ("effetto parafulmine") in strutture via via più allungate.

#### 4.1.4 Fattore di qualità delle risonanze d'antenna

Come si è visto, osservando gli spettri di fig. 4.2 e fig. 4.3 vi è stato interesse ad analizzare la relazione tra l'ampiezza dei picchi di intensità di campo e le corrispondenti frequenze di risonanza. Similmente, il passo successivo è stato quello di andare a studiare il fattore di qualità Q, definito come il rapporto tra la lunghezza d'onda di risonanza e la larghezza a metà altezza del rispettivo picco di intensità

$$Q = \frac{\lambda_{RES}}{\Delta \lambda} \qquad (4.1)$$

Tale analisi è anch'essa di forte interesse in quanto spesso la larghezza della banda di risonanza è un obiettivo ben preciso, come verrà mostrato nel prossimo capitolo. Andando dunque ad analizzare tale relazione sono state ottenuti, rispettivamente per oro ed argento, gli andamenti mostrati in fig. 4.7a e fig. 4.7b.







**Figura 4.7b:** Relazione tra il fattore Q e le lunghezze d'onda di risonanza per nanoantenne in argento.

Data la particolarità del loro andamento si è evidenziata la necessità di approfondire il livello di analisi, procedendo su due vie.

In primo luogo si è voluto valutare, per ciascuna antenna nelle condizioni di risonanza, il rapporto R tra l'energia dei campi all'interno delle nanostrutture metalliche e l'energia dei campi presenti nello spazio circostante ad esse. Questo per valutare la distribuzione relativa dell'intensità di campo nelle regioni di perdita (all'interno del metallo) e in quelle prive di perdita (nel vuoto o nel substrato dielettrico), laddove ad un rapporto elevato corrisponde un elevato fattore Q, e viceversa.

E' stato possibile così ottenere una conferma dell'andamento qualitativo del fattore Q, come mostrato in fig. 4.8.

In secondo luogo si è cercato di motivare ulteriormente la particolare dipendenza di Q nei confronti della frequenza di risonanza. Considerando valida l'approssimazione quasi statica, verificata per  $\frac{L}{\lambda_{RES}} \ll 1$ , si può in prima approssimazione supporre che, per una data frequenza di risonanza, il fattore Q dipenda esclusivamente dalla funzione dielettrica del metallo di cui è fatta l'antenna, assumendo di fatto irrilevante la geometria della stessa [16].

Si suppone inoltre che in tale condizioni la nanostrutture non sia soggetta a perdite energetiche di tipo radiativo [16].

Considerando l'espressione della funzione dielettrica espressa come  $\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$ , è possibile ricavare per il fattore di qualità Q [16]:

$$Q = \frac{\omega \frac{d\varepsilon_1^{met}}{d\omega}}{2\varepsilon_2^{met}} \quad (4.2)$$

dove  $\varepsilon^{met}$  è la funzione dielettrica del metallo considerato.

Il grafico di tale espressione è stato anch'esso riportato in fig. 4.8 a titolo di confronto. Una nanoantenna in condizioni di risonanza plasmonica dissipa energia sostanzialmente con perdite di tipo radiativo e perdite ohmiche. Considerando dunque l'assenza del contributo radiativo ipotizzato nel modello [16], ci si aspetta un andamento di (4.2) non coincidente con quanto ottenuto con le simulazioni.

Come si evince in fig. 4.8, l'andamento del modello è qualitativamente simile a quello delle simulazioni ma prevede un fattore di qualità Q maggiore (si veda il fattore di scala x0.5 in fig. 4.8). Questo conferma che le perdite ohmiche sono alla base del comportamento crescente e poi decrescente di Q. Il valore assoluto ottenuto dalle simulazioni è invece minore perché in questo caso c'è un ulteriore canale di perdita radiativi dovuto alle dimensioni non infinitesime dell'antenna.



**Figura 4.8a:** Confronto grafico per le nanoantenne in oro tra l'andamento in funzione di lambda del fattore Q calcolato secondo la (4.1) in blu, il rapporto R tra l'energia dei campi interni ed esterni alla nanostrutture in rosso, e la funzione Q calcolata secondo la (4.2) in giallo.



**Figura 4.8b:** Confronto grafico per le antenne in argento tra l'andamento in funzione di lambda del fattore Q calcolato secondo la (4.1) in blu, il rapporto R tra l'energia dei campi interni ed esterni alla nanostrutture in rosso, e la funzione Q calcolata secondo la (4.2) in argento.

#### 4.2 Antenne bowtie

#### 4.2.1 Parametri, materiali e geometrie

Il passo successivo del lavoro di ricerca è stato quello di simulare nanoantenne bowtie, nanostrutture la cui geometria è descritta in fig. 4.9. La scelta di tale struttura è dettata dall'opportunità di allargare la risposta spettrale dell'antenna grazie alla peculiare geometria.



**Figura 4.9:** Geometria di una nanoantenna bowtie, con la lunghezza L unica variabile di simulazione.

Anche in questo caso le nanoantenne sono state poste sopra ad un substrato di vetro. I materiali studiati sono stati ugualmente oro ed argento, con le rispettive funzioni dielettriche ottenute da dati sperimentali [6].

Per ogni materiale sono state simulate cinque antenne caratterizzate da lunghezze L diverse, mantenendo fissata la gap, l'angolo  $\alpha = 45^{\circ}$  e lo spessore.

Le lunghezze L vagliate sono state pari a 100 nm, 150 nm, 200 nm, 250 nm e 300 nm, da qui in avanti indicate rispettivamente con le diciture L100, L150, L200, L250 e L300.

In maniera analoga a quanto visto per le antenne dipolari si è proceduto simulando le nanoantenne bowtie in oro e in argento con l'intento di trovare i picchi di intensità e le corrispondenti frequenze di risonanza. I risultati sono mostrati nelle fig. 4.10 e fig. 4.11, dai quali si evince che alcune delle antenne bowtie supportano risonanze plasmoniche multiple.



**Figura 4.10a:** Spettro di risonanza per le cinque nanoantenne bowtie in oro.



**Figura 4.10b:** Spettro di risonanza normalizzato per le cinque nanoantenne bowtie in oro.



**Figura 4.11a:** Spettro di risonanza per le cinque nanoantenne bowtie in argento.



**Figura 4.11b:** Spettro di risonanza normalizzato per le cinque nanoantenne bowtie in argento.

#### 4.2.3 Commenti e considerazioni

E' evidente anche nel caso delle antenne bowtie una marcata dipendenza della frequenza di risonanza dalla lunghezza dell'antenna. Allo stesso modo, anche le ampiezze dei picchi di intensità aumentano all'aumentare della frequenza. Non è tuttavia possibile quantificare queste informazioni a causa della molteplicità e della asimmetria dei picchi presenti per ogni antenna.

Per questo stesso motivo non è stato possibile raccogliere dati significativi riguardo al fattore di qualità Q.

L'interesse è stato dunque spostato sulla natura dei molteplici picchi per un caso campione, con l'intento di verificare l'effettiva corrispettiva esistenza di due modi di risonanza plasmonica. Si è considerata l'antenna L150 in oro, il cui spettro è mostrato in fig. 4.12. Per questa si palesano molto bene due picchi di simile ampiezza, molto vicini tra loro, centrati rispettivamente alle frequenze di 628 nm e 678 nm.



Figura 4.12: Spettro di risonanza per la nanoantenna L150 in oro.

In fig. 4.13 è mostrata la distribuzione dell'intensità di campo in corrispondenza delle due frequenze, misurata su un piano posto 5 nm al di sopra dell'antenna.



**Figura 4.13:** Distribuzione spaziale dell'intensità di campo nel caso dell'antenna L150 in oro in corrispondenza delle due frequenze di picco. Si nota una forte localizzazione dei campi (in rosso in una scala da blu a rosso) nella gap e in corrispondenza degli angoli esterni.

I due casi sembrano riconducibili a due modi di oscillazione plasmonica diversi in quanto, sebbene siano entrambi caratterizzati da una buona localizzazione di campo nella gap, differiscono per il profilo complessivo in quanto per il primo i massimi di campo sono in corrispondenza degli angoli esterni mentre per il secondo i massimi sono in corrispondenza della gap.

#### 4.3 Confronto tra antenne dipolari ed antenne bowtie

Andando a confrontare le due classi di nanoantenne è di prima evidenza il fatto che entrambe presentino caratteristiche di rilievo fortemente dipendenti dalla lunghezza della nanostruttura. Ciò fornisce per entrambe una leva di progettazione decisamente interessante.



**Figura 4.14:** Confronto tra gli spettri di risonanza per nanoantenne in oro L300 dipolari e bowtie.

Nelle condizioni di risonanza, a parità di lunghezza le antenne dipolari hanno mostrato intensità di campo maggiori rispetto alle antenne bowtie, mentre queste ultime hanno presentato bande di risonanza più estese, come mostrato in fig. 4.14 dove si confrontano un'antenna dipolare e un'antenna bowtie, entrambe d'oro e con simile frequenza di risonanza, mettendo in luce la più ampia risposta spettrale dell'antenna bowtie caratterizzata da un fattore di qualità inferiore. Oltre a ciò, per le antenne bowtie la presenza di spettri con molteplici picchi di risonanza rappresenta un ulteriore ingrediente per estenderne la risposta spettrale. Queste due caratteristiche di grande interesse si traducono in un sicuro vantaggio tecnologico laddove vi sia la necessità di lavorare con luce bianca.

# **Capitolo 5**

# Un applicazione tecnologica: dispositivi fotovoltaici

I dispositivi fotovoltaici permettono la generazione di energia elettrica convertendo la luce solare in elettricità. Sempre più conosciuti e diffusi, a livello mondiale questi dispositivi hanno prodotto 5 GW nel 2008 e si prevede che produrranno 20 GW nel 2015 [1]. Un considerevole contributo per supplire ai sempre più grandi consumi energetici della nostra società.

Allo stato attuale tale metodo di produzione energetica si trova a confrontarsi con altri metodi decisamente più competitivi sul piano economico, come ad esempio quei sistemi di produzione che ricorrono a carburanti di tipo fossile.

La maggiore parte dei dispositivi fotovoltaici presenti oggi sul mercato sono basati su celle solari composte da wafer di silicio cristallino di spessore compreso tra 180  $\mu$ m e 300  $\mu$ m [1]. Il costo di realizzazione di tale materiale rappresenta il maggior contributo al prezzo di vendita del dispositivo finale.

E' dunque chiaro l'interesse nel poter sviluppare celle solari composte da film sottili di materiale, con spessori nell'ordine di 1-2  $\mu$ m. I materiali usati in questo senso sono Si, GaAs, CdTe, CuInSe<sub>2</sub>, così come semiconduttori di tipo organico.

Questa configurazione presenta però un limite intrinseco, determinato dalla capacità di assorbimento della luce compresa nella banda prossima alla gap del materiale, proporzionale al ridotto spessore del film sottile. Infatti ad energie dei fotoni incidenti prossime alla gap del materiale, la profondità di assorbimento della luce nel semiconduttore è molto maggiore rispetto al libero cammino medio delle cariche eccitate. Come risultato, la cella solare non riesce a catturare efficacemente la luce incidente [1].

Per questo motivo si fa evidente la necessità di sviluppare una tecnologia in grado di confinare la luce all'interno del film sottile, così da migliorarne la capacità di assorbimento.

#### 5.1 Simulazione di nanoantenne bowtie su substrato di silicio

Un modo per ottenere quanto esposto è quello di ricorrere all'accoppiamento del film sottile con nanoantenne metalliche in grado, come visto, di localizzare molto efficacemente campi intensi prossimi alla superficie come conseguenza delle risonanze plasmoniche eccitate dalla luce incidente.

In base a ciò, nell'ultimo periodo della mia tesi l'attenzione è stata portata sullo studio di nanostrutture interfacciate con un substrato di silicio.

Nel simulare questa nuova configurazione, numerose scelte di natura progettuale sono state effettuate basandosi sui risultati guida ottenuti per antenna su substrato trasparente di vetro.

#### 5.1.1 Scelta dei materiali

E' stata focalizzata l'attenzione sulle nanoantenne d'oro, escludendo dalle simulazioni nanoantenne d'argento. Questo per via del fatto che l'argento è un metallo più reattivo rispetto all'oro, cosa che lo porta a degenerare le proprie caratteristiche in tempi più celeri quando esposto all'aria, come dimostrato in letteratura. Dovendo dunque simulare un'interfaccia con riscontri pratici a livello tecnologico è stato considerato il solo oro, caratterizzato dalla funzione dielettrica ottenuta dai dati sperimentali [6].

#### 5.1.2 Scelta della geometria in funzione del substrato

In via preliminare si è dovuto tenere conto che le caratteristiche dello spettro di risonanza di una nanostrutture sono fortemente dipendenti dal tipo di materiale usato come substrato [15].

Come noto in ambito di antenne a radiofrequenza, l'indice di rifrazione  $n_s$  (e rispettiva funzione dielettrica) del substrato ha una forte influenza sullo spettro di risonanza dell'antenna. Lo stesso effetto è osservabile per le nanoantenne risonanti a frequenze proprie della luce visibile, dove la risonanza si sposta sempre più verso l'infrarosso all'aumentare di  $n_s$ . Ciò è evidenziato in fig. 5.1 dove la risonanza fondamentale di una stessa nanoantenna bowtie L100 in oro è stata simulata su un substrato di vetro e su un substrato di silicio.

Essendo l'indice di rifrazione del silicio maggiore rispetto a quello del vetro è spiegato lo spostamento verso il vicino infrarosso del principale picco di risonanza nel caso del substrato di silicio.



**Figura 5.1:** Principali picchi di risonanza per una nanoantenna bowtie d'oro al variare del substrato.

Considerando una cella di silicio cristallino sensibile alla luce nell'intervallo fra circa 0,35  $\mu$ m e circa 1,1  $\mu$ m, è apparsa chiara la necessità di simulare una nanoantenne che presentasse una risposta spettrale la più ampia possibile e centrata nell'intervallo di interesse.

Poiché l'antenna bowtie L100 su silicio mostrata in fig. 5.1 presenta una risonanza già spostata nella regione dei 900-1100 nm, ci si è trovati nelle condizioni di dover escludere dalle simulazioni nanoantenne di lunghezza L superiore a 100 nm dato che queste, come mostrato precedentemente, avrebbero presentato spettri di risonanza ancor più spostati nell'infrarosso rispetto all'antenna L100, uscendo dunque dall'intervallo di sensibilità all'assorbimento del silicio cristallino.

Per via invece di limitazioni di forma e di possibilità realizzative si sono escluse antenne di dimensioni inferiori a 100 nm.

#### 5.2 Presentazione e discussione degli spettri

Per quanto esposto in precedenza, è stata simulata approfonditamente un'unica nanoantenna bowtie L100 in oro, il cui spettro è presentato in fig. 5.2.

Come indicato in figura, appaiono ben definiti due picchi principali distanziati di circa 100 nm, più una serie di altri picchi ad energie maggiori. Sono state effettuate verifiche anche per lunghezze d'onda maggiori, sino a 2000 nm, non trovando tuttavia nessun altro picco di interesse.

In maniera analoga a quanto visto per le antenne bowtie su substrato di vetro vi è stato interesse ad andare a studiare la natura dei due picchi di intensità, con l'obiettivo di verificare l'effettiva presenza di due diversi modi di risonanza plasmonica.



Figura 5.2: Spettro per una nanoantenna L100 d'oro su substrato di silicio.

Andando a monitorare la distribuzione spaziale dei campi in corrispondenza delle due frequenze di interesse, come mostrato in fig. 5.3. Si notano chiaramente le diverse localizzazioni dei campi nei due casi, in corrispondenza di due modi di risonanza plasmonica differenti. Il modo a lunghezza d'onda maggiore (modo fondamentale) presenta una distribuzione di campo fortemente concentrata nella regione della gap, mentre il secondo modo a lunghezza d'onda minore mostra una maggiore intensità di campo nella regione esterna ai bracci dell'antenna.





#### 5.3 Comportamento nel substrato

Il passo conclusivo è stato quello di andare a studiare l'accoppiamento tra la nanoantenna in oro e il substrato, che si traduce in una maggiore o minore penetrazione dei campi all'interno del substrato stesso.

Come detto al principio di capitolo, tale accoppiamento è di interesse per via della possibilità di intrappolare la luce mediante fenomeni di risonanza plasmonica in grado di localizzare i campi in prossimità delle superfici.

Per vedere ciò il substrato è stato considerato tagliato in piani paralleli all'interfaccia a progressive profondità. Per ogni piano, di dimensioni 200 nm x 200 nm, è stata calcolata l'energia del campo elettromagnetico normalizzata alla situazione senza antenna, così da poter valutare il guadagno in termini di intensità locale di campo alle varie profondità, ottenendo quanto mostrato in fig. 5.4



Figura 5.4: Amplificazione dei campi a diverse profondità nel substrato.

Si evince dal grafico che l'amplificazione localizzata di campo determinata dalla nanoantenna è efficace all'interno del substrato entro una profondità di 20-30 nm.

#### 5.4 Conclusioni

Come risultato è stato dunque verificato il comportamento dato dall'applicazione di una nanoantenne in oro su di un substrato in silicio, tenendo in considerazione l'intento iniziale di valutarne l'utilità in ambito fotovoltaico.

Si è dimostrato innanzitutto di poter ottenere un'ampia risposta spettrale nell'intervallo della luce visibile, con molteplici picchi di risonanza, mediante la configurazione d'antenna bowtie in oro.

E' stato inoltre studiato il conseguente fenomeno di aumento localizzato dell'intensità di campo in prossimità dell'antenna. Come evidente in fig. 5.4 tale aumento è consistente nei primi 10 nm di profondità. Un confinamento in direzione

verticale molto spinto che di fatto rende l'utilizzo di questa configurazione adatto soprattutto ad applicazioni in cui si usino film estremamente sottili (inferiori a 100 nm). In questi scenari l'aumento locale dell'intensità di campo di un ordine di grandezza può fare la differenza. Correlata a ciò, non dimostrata in questo lavoro, si fa presente l'esistenza di un'ulteriore leva di progetto: è possibile avere minor confinamento verticale (maggiore penetrazione nel substrato) aumentando le dimensioni della gap dell'antenna, a scapito tuttavia di una minore intensità di campo.

Pur non essendo stato possibile metterlo in evidenza con il livello di analisi e simulazioni svolte, da considerare c'è inoltre un altro effetto fondamentale che può aumentare l'efficienza della cella: l'antenna diffonde infatti il campo incidente come un dipolo quasi ideale, con un pattern di emissione molto esteso angolarmente. Questo comportamento costituisce un ulteriore canale di assorbimento della luce, che si somma a quello dato dagli intensi campi locali non propaganti, in quanto va ad aumentare il cammino ottico medio all'interno del materiale [1] e può al limite anche lanciare modi guidati all'interno del film del materiale attivo. Si ha dunque una seconda leva di progettazione che viene usata in letteratura contribuendo all'ottimizzazione dell'accoppiamento tra array plasmonici e film fotovoltaici.

### **Bibliografia**

- [1] H. A. Atwater and A. Polman, "Plasmonics for improved photovoltaic devices", Nature Materials, Vol 10, 2010
- [2] E. Ozbay, "Plasmonics: Merging Photonics and Electronics at Nanoscale Dimensions", Science, Vol. 311, 2006
- [3] J. A. Schuller, E. S. Barnard, W. Cai, Y. C. Jun, J. S. White, M. L. Brongersma, "Plasmonics for extreme light concentration and manipulation, Nature Materials, Vol 9, 2010
- [4] L. Novotny and B. Hecht, *Principles of Nano-Optics*, Cambridge University Press (2006)
- [5] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid state physics*, Saunders College Publishing, Orlando, Florida, US (1976)
- [6] P. B. Johnson and R. W. Christy, "Optical constants of noble metals", Phys. Rev B 6, 4370 (1972)
- [7] C. F. Bohren, D. R. Huffman, *Absorption and scattering of light by small particles*, John Wiley and Sons, Inc. (1983)
- [8] A. Arbouet, D. Christofilos, N. Del Fatti, F. Vallée, J. R. Huntzinger, L. Arnaud, P. Billaud, M. Broyer, "Direct measurement of the single-metal-cluster optical absorbtion", Phys. Rev. Lett. 93, 127401 (2004)
- [9] S. Focardi, I. Massa, A. Uguzzoni, *Fisica Generale: Elettromagnetismo*, Casa Editrice Ambrosiana (2003)
- [10] J. D. Jackson, *Classical electrodynamics*, third edn, John Wiley and Sons, Inc. (1998)
- [11] S. Link, M. B. Mohamed, M. A. El-Sayed, "Spectral properties and relaxation dynamics of surface plasmon electronic oscillations in gold and silver nanodots and nanorods", J. Phys. Chem. B 103, 8410 (1999)

- [12] K. Yee, "Numerical solutions of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media", IEEE Transactions on Antennas and Propagation, vol. AP-14, pp. 302-307, 1966.
- [13] M.N.O. Sadiku, *Numerical Techniques in Electromagnetics*, second edn, CRC Press (2001)
- [14] K. S. Kunz, The Finite Difference Time Domain Method for Electromagnetics, CRC Press
- [15] H. Fischer and O. J. F. Martin, "Engineering the optical responce of plasmonic nanoantennas", Optics Express, Vol. 16, No. 12, 2006
- [16] F. Wang, Y. R. Shen, "General Properties of Local Plasmons in Metal Nanostructures", Phys. Rev. Lett. 97, 206806 (2006)

# Indice delle figure

| 1.1  | Antenna dipolare configurata in trasmissione   | 6  |
|------|--|----|
| 1.2  | Raffigurazione semplificata del concetto di miniaturizzazione di un'antenna  | 8  |
| 2.1a | Permettività dell'oro con dati sperimentali e dal modello  | 13 |
| 2.1b | Permettività dell'oro con dati sperimentali e dal modello corretto   | 14 |
| 2.2  | Polarizzazione di una sfera sotto l'effetto di un campo $E_0$  | 16 |
| 2.3  | Assi principali di un ellissoide   | 18 |
| 2.4  | Due possibili polarizzazioni della luce incidente nel caso di uno sferoide prolato                                   | 19 |
| 2.5  | Confronto degli spettri di risonanza normalizzati di una sfera e di un ellissoide                                    | 20 |
| 2.6a | Profilo di intensità di campo per una sfera  | 21 |
| 2.6b | Profilo di intensità di campo per un ellissoide  | 21 |
| 2.7  | Nanostruttura composta dall'accoppiamento di due ellissoidi  | 22 |
| 3.1  | Posizione delle componenti di campo in una cella unitaria del reticolo di Yee  | 28 |
| 3.2  | Interfaccia FDTD region / PML region   | 31 |
| 4.1  | Geometria di una nanoantenne dipolare  | 35 |
| 4.2a | Spettro di risonanza per le cinque nanoantenne in oro  | 36 |
| 4.2b | Spettro di risonanza normalizzato per le cinque nanoantenne in oro   | 37 |
| 4.3a | Spettro di risonanza per le cinque nanoantenne in argento  | 37 |
| 4.3b | Spettro di risonanza normalizzato per le cinque nanoantenne in argento   | 38 |
| 4.4  | Distribuzione dell'intensità di campo per una nanoantenne L100 in oro  | 39 |
| 4.5a | Dipendenza della frequenza di risonanza dalla lunghezza dell'antenna in oro  | 40 |
| 4.5b | Dipendenza della frequenza di risonanza dalla lunghezza dell'antenna in argento                                      | 40 |
| 4.6a | Dipendenza dell'intensità di risonanza dalla lunghezza dell'antenna in oro   | 41 |
| 4.6b | Dipendenza dell'intensità di risonanza dalla lunghezza dell'antenna in argento                                       | 41 |
| 4.7a | Relazione tra il fattore di qualità e la lunghezza di un'antenna in oro  | 43 |
| 4.7b | Relazione tra il fattore di qualità e la lunghezza di un'antenna in argento  | 43 |
| 4.8a | Confronto grafico tra i valori sperimentali e i valori dal modello del fattore di<br>gualità O per un'antenna in oro | 45 |
| 4.8b | Confronto grafico tra i valori sperimentali e i valori dal modello del fattore di<br>gualità O per un'antenna in oro | 46 |
| 4.9  | Geometria di una nanoantenne bowtie  | 47 |

| 4.10a | Spettro di risonanza per le cinque nanoantenne bowtie in oro                         | 48 |
|-------|--|----|
| 4.10b | Spettro di risonanza normalizzato per le cinque nanoantenne bowtie in oro            | 49 |
| 4.11a | Spettro di risonanza per le cinque nanoantenne bowtie in argento                     | 49 |
| 4.11b | Spettro di risonanza normalizzato per le cinque nanoantenne bowtie in argento        | 50 |
| 4.12  | Spettro di risonanza per la nanoantenne L150 in oro                                  | 51 |
| 4.13  | Distribuzione dell'intensità di campo per l'antenna L150 in oro                      | 51 |
| 4.14  | Confronto tra gli spettri di risonanza per nanoantenne in oro L300 dipolari e bowtie | 52 |
| 5.1   | Picchi di risonanza per una nanoantenne bowtie d'oro al variare del substrato        | 57 |
| 5.2   | Spettro per una nanoantenne L100 in oro su substrato di silicio                      | 58 |
| 5.3   | Distribuzione dell'intensità di campo per l'antenna L100 in oro su silicio           | 59 |
| 5.4   | Energia del campo elettromagnetico a diverse profondità nel substrato                | 60 |