

Valon sironta - ilmiöt ja mallinnus

Jouni Mäkitalo
Fysiikan seminaari 2014

Sisältö

Johdanto

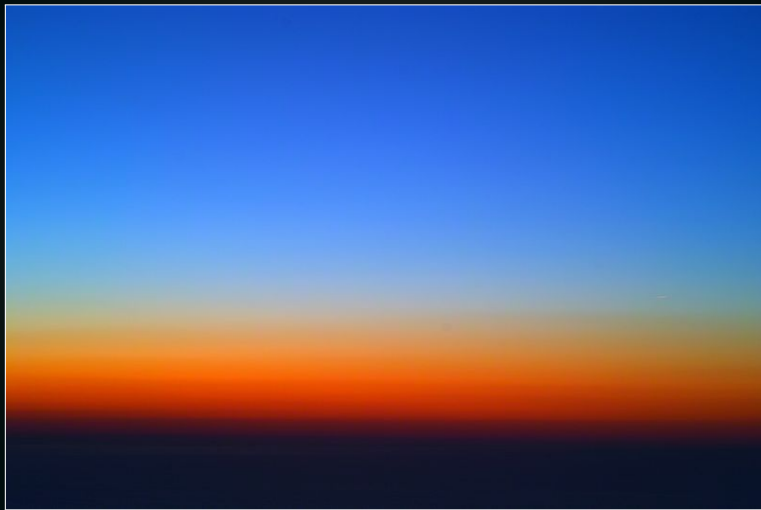
Sironnan sähkömagneettinen mallinnus

Analyttinen sirontateoria

Sironta ei-pallomaisista hiukkasista

JOHDANTO

Taivaan värit



Pilvet



Cumulus congestus

”Every once in a blue moon”



Tähtien välinen pöly



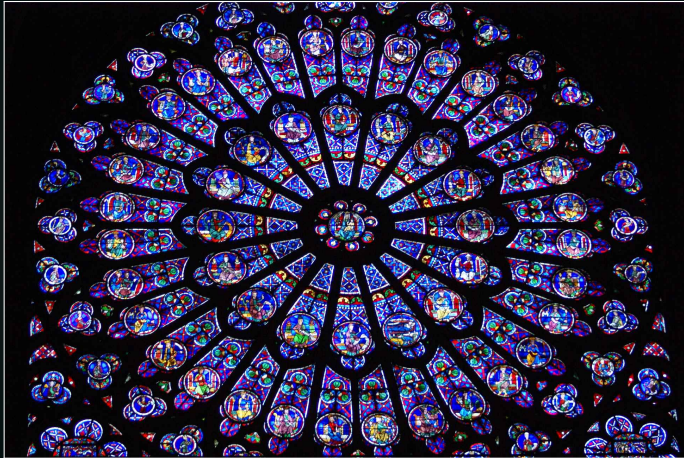
Kääpiögalaksi NGC 1569

Plasmoniset nanohiukkaset



Lycurguksen kuppi

Lisää plasmonisia nanohiukkasia



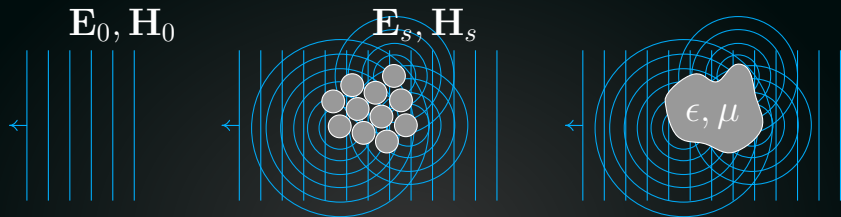
Notre Damen lasimalaukset

Mitat ja mallinnusmenetelmät

- ▶ Valon aallonpituus 400 nm – 700 nm
- ▶ Atomi 0,1 nm
- ▶ Nanohiukkaset 10–1000 nm
- ▶ Vesipisara 1–20 μm
- ▶ ”Isot kappaleet”

SIRONNAN SÄHKÖMAGNEETTINEN MALLINNUS

Sironta ja absorptio



- ▶ Virittävä kenttä + häiriö väliaineessa
→ Sironnut valo + absorptio
- ▶ Ekstinktio = sironta + absorptio
- ▶ Sirontakuvio $F(\theta, \phi)$
- ▶ Polarisaatio

Maxwell-yhtälöt

- Yhtälöt makroskooppisille kentille

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{B}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \partial_t \mathbf{D}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

Väliainerelaatit

- Relaatio vuolle (pinnat) ja kentälle (polut)

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}$$

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$$

- Tyypillisesti

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) = \epsilon(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega),$$

$$\tilde{\mathbf{D}}(\mathbf{r}, t) = \int_0^t \tilde{\epsilon}(\mathbf{r}, t - t') \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, t') dt'$$

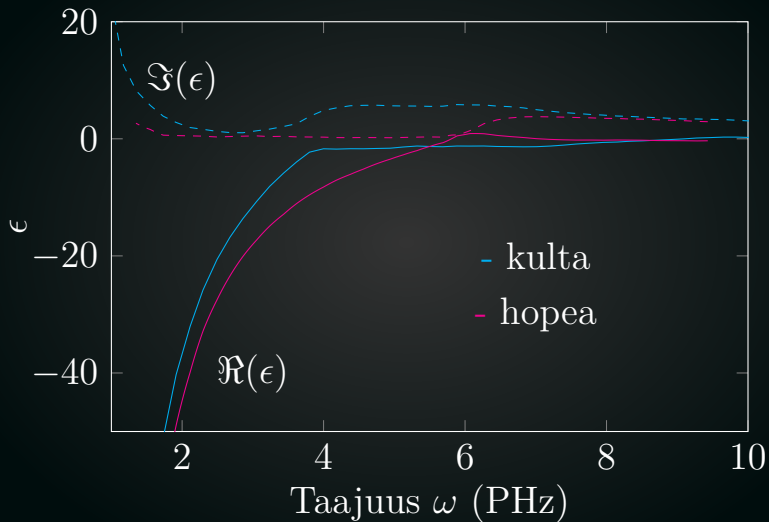
Miten löytää ϵ ?

- ▶ Mittaamalla (ellipsometria)
- ▶ Yksinkertaistetut mallit, kuten Drude-malli

$$\epsilon(\omega)/\epsilon_0 = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}$$

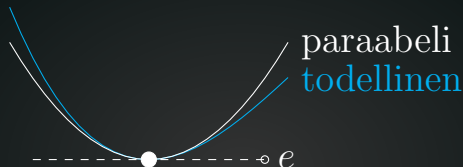
- ▶ Kvanttiteoria: $\epsilon/\epsilon_0 = 1 + N \langle \psi | \boldsymbol{\mu} | \psi \rangle$

Kulta ja hopea



Epälineaarisuus

- ▶ Hooken laki: $F = -kx + hx^2 + \dots$



- ▶ $m\ddot{x} + kx - hx^2 = -eE$
- ▶ Polarisaatio $P = -Nex$
- ▶ Seuraus: taajuus ei säily, esim. $\omega \rightarrow 2\omega$
- ▶ Ilmiöt heikkoja, mutta herkkiä E :n vaihteluille

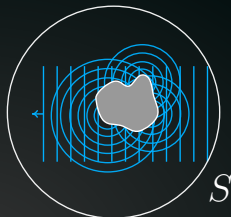
Reuna-arvotehtävät

- ▶ Yksikäsitteinen ratkaisu, joka toteuttaa Maxwellin yhtälöt?
- ▶ Reunaehdot $\rightarrow$ Geometria
- ▶ Sironnatehtävä: tunnetaan $\mathbf{E}_0$, ratkaise $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_s$ s.e.

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} - k^2 \mathbf{E} = \mathbf{0}$$

$$\lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} \nabla \times \mathbf{E}_s \times \mathbf{r} - ik|\mathbf{r}|\mathbf{E}_s = \mathbf{0}$$

Vuorovaikutusalat



- ▶ Vuorovaikutusala C , $[C] = \text{m}^2$
- ▶ Sirona: $C_s = \frac{1}{I_0} \int_S \mathbf{E}_s \times \mathbf{H}_s^* \cdot \mathbf{n} dS$
- ▶ Absorptio: $C_a = -\frac{1}{I_0} \int_S \mathbf{E} \times \mathbf{H}^* \cdot \mathbf{n} dS$
- ▶ Ekstinktio $C_e = C_s + C_a$
- ▶ Detektori (ala A) mittaa tehon

$$U = I_0(A - C_e)$$
- ▶ $\int_0^\infty C_e(\lambda) d\lambda \leq 4\pi^3 a^3$ (summasääntö)



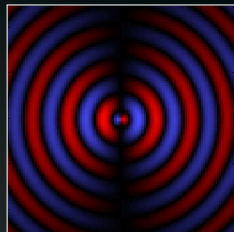
ANALYYTTINEN SIRONTATEORIA

Pistelähde



Säteilevä dipoli

- ▶ Dipolikenttä: $\mathbf{E} = \omega^2 \mu \mathbf{G} \cdot \mathbf{p}$
- ▶ $\mathbf{G} = \left(\mathbf{I} + \frac{\nabla \nabla}{k^2} \right) \frac{e^{-ikR}}{4\pi R}$
- ▶ Säteilytehon aikakeskiarvo $\sim \omega^4$
- ▶ Rayleigh: taivaan värit



Dipolin polaroituvuus

- ▶ Polaroituvuus α : $\mathbf{p} = \epsilon_0 \alpha \mathbf{E}_0$
- ▶ Miten löytää α ?
Esim. ”pieni” pallohiukkanen (säde a):

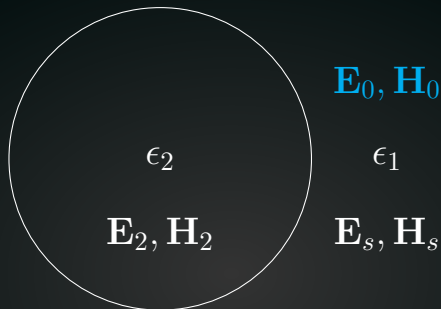
$$\alpha = 4\pi a^3 \frac{\epsilon - \epsilon_0}{\epsilon + 2\epsilon_0}$$

- ▶ Entä jos $\epsilon = -2\epsilon_0$? $\rightarrow$ *Plasmoniresonanssi*

Pallohiukkanen



Mie-teoria (Gustav Mie 1869–1957)



$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}_s - k_1^2 \mathbf{E}_s = 0$$

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}_2 - k_2^2 \mathbf{E}_2 = 0$$

$$\mathbf{n} \times (\mathbf{E}_s + \mathbf{E}_0) = \mathbf{n} \times \mathbf{E}_2$$

$$\mathbf{n} \times (\mathbf{H}_s + \mathbf{H}_0) = \mathbf{n} \times \mathbf{H}_2$$

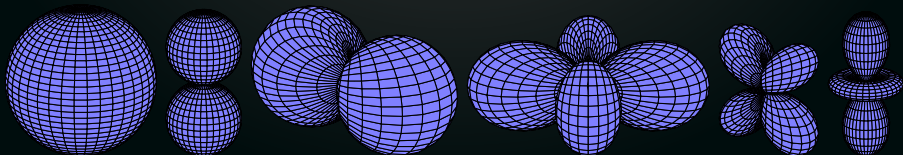
$$\lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} \nabla \times \mathbf{E}_s \times \mathbf{r} - ik_1 |\mathbf{r}| \mathbf{E}_s = 0$$

Palloharmoniset

- ▶ Skalaarifunktioita $Y_{lm}(\theta, \phi)$
- ▶ Kanta pallopinnan yli määritellyille funktioille

$$f = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} Y_{lm}$$

- ▶ Ortogonaalisuus $\langle Y_{l_1 m_1}, Y_{l_2 m_2} \rangle = \delta_{l_1 l_2} \delta_{m_1 m_2}$



Vektoriharmoniset

- ▶ Kulmaliikemääräoperaattori $\mathbf{L} = -i\mathbf{r} \times \nabla$
- ▶ Vektoriharmoniset
$$\mathbf{N}_{lm}(r, \theta, \phi) = f_l(r)\mathbf{L}Y_{lm}(\theta, \phi)$$
- ▶ Esitys kentille:

$$\mathbf{E} = \eta \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} \mathbf{N}_{lm} - \frac{i}{k} b_{lm} \nabla \times \mathbf{N}_{lm}$$

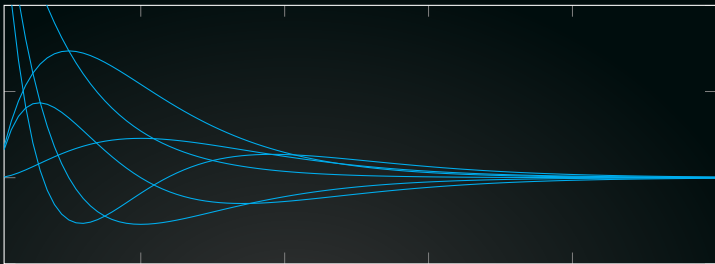
$$\mathbf{H} = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l b_{lm} \mathbf{N}_{lm} + \frac{i}{k} a_{lm} \nabla \times \mathbf{N}_{lm}$$

Hyödyllistä matematiikkaa

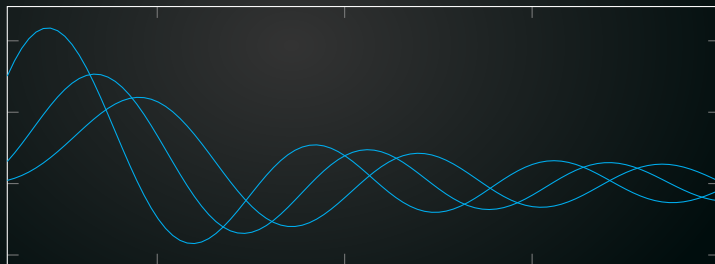
Vetyatomi	$\psi = \sum a_{nlm} R_{nl}(r) Y_{lm}$
Mie-teoria	$\mathbf{E} \cdot \mathbf{n} = \sum a_{lm} h_l(kr) Y_{lm}$

- ▶ R_{nl} : Laguerren liittofunktiot
- ▶ h_l : Pallo-Hankel-funktiot

R_{nl}



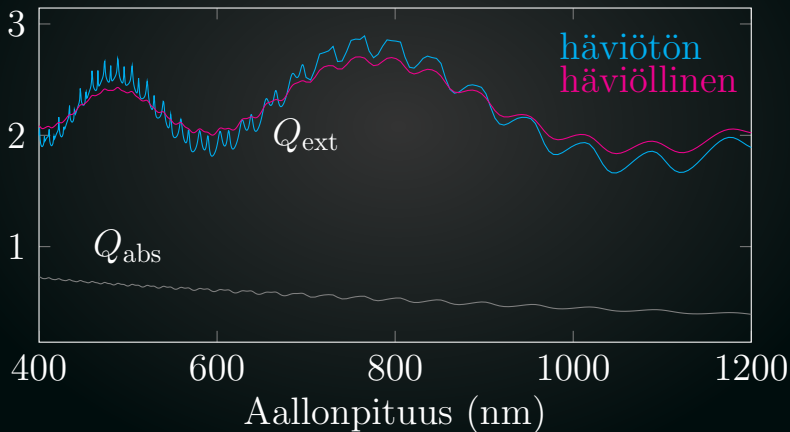
$\Re(h_l)$



Etäisyys

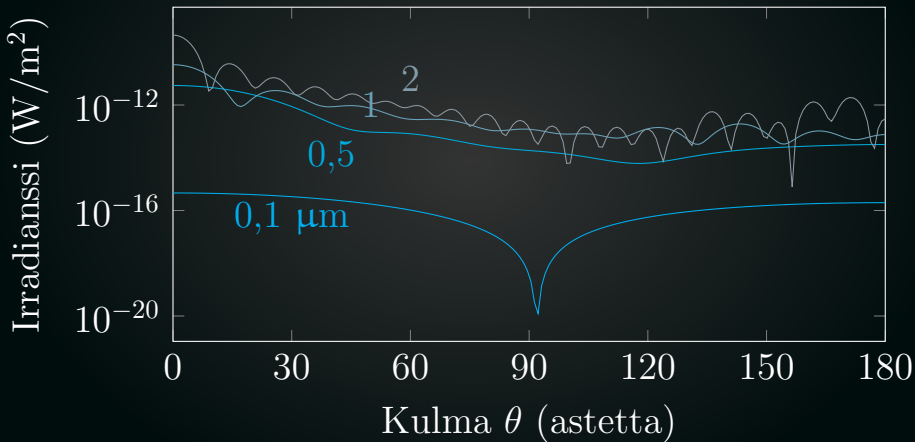
Vesipisara

- ▶ Säde $2\text{ }\mu\text{m}$
- ▶ Interferenssi- ja värerakenne



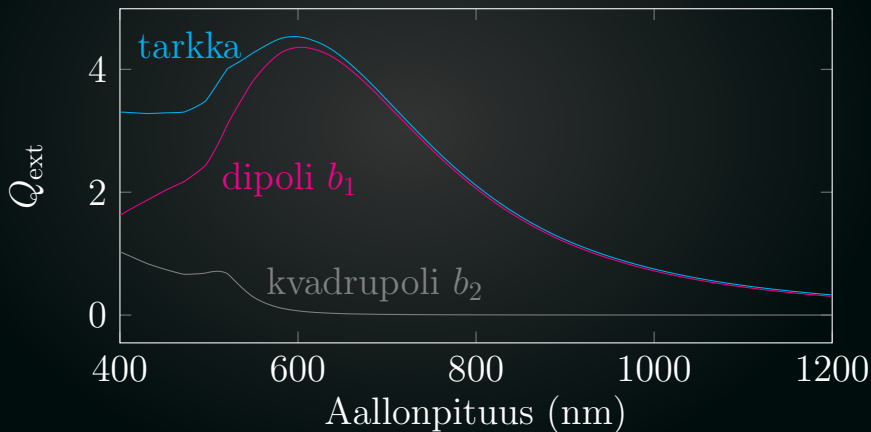
Sironnan suuntariippuvuus

- Vesipisara, $\lambda = 650$ nm

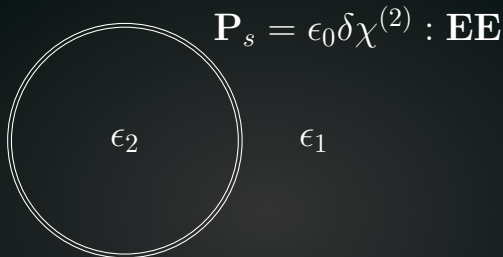


Kultainen nanopallo

- ▶ Säde 100 nm
- ▶ Plasmoniresonanssit



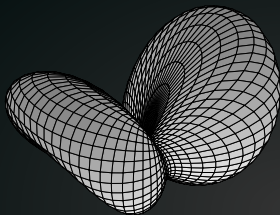
Taajuuden kahdennus pallopinnalla



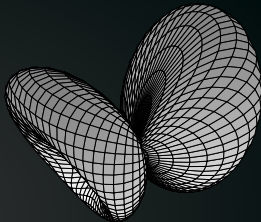
- ▶ Rajapintaehdot $\rightarrow$
 $a_{lm}, b_{lm} \propto \sum_{l_1 l_2 m_1 m_2} c_{l_1 m_1} c_{l_2 m_2} \langle Y_{lm}, Y_{l_1 m_1} Y_{l_2 m_2} \rangle$
- ▶ Clebsch–Gordan-ongelma
- ▶ Valintasäännöt:
 $|l_2 - l_1| \leq l \leq l_1 + l_2, m = m_1 + m_2$

Taajuuskahdennettu säteily

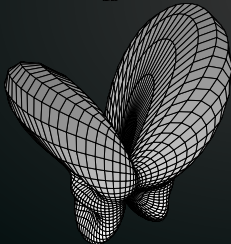
50 nm



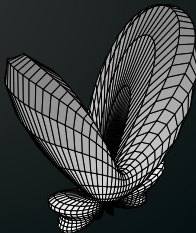
100 nm



150 nm



200 nm



SIRONTA EI-PALLOMAISISTA HIUKKASISTA

Ekvivalentti virrantiheys



- ▶ Ampere-Maxwell: $\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\epsilon\mathbf{E}$
- ▶ Ekvivalenttilähde $\mathbf{J} = -i\omega(\epsilon - \epsilon_0)\mathbf{E}$
 $\rightarrow \nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} - i\omega\epsilon_0\mathbf{E}$
- ▶ Helmholtz $\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} - k_0^2\mathbf{E} = i\omega\mu_0\mathbf{J}$

Tilavuusintegraaliyhtälöt 1/2

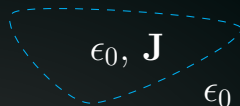
- ▶ Helmholtz $\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} - k_0^2 \mathbf{E} = i\omega\mu_0 \mathbf{J}$
- ▶ Dipolisäteilijä: $\nabla \times \nabla \times \mathbf{G} - k_0^2 \mathbf{G} = \delta \mathbf{I}$

$$\begin{aligned} & (\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} - k_0^2 \mathbf{E}) \cdot \mathbf{G} - \mathbf{E} \cdot (\nabla \times \nabla \times \mathbf{G} - k_0^2 \mathbf{G}) \\ &= i\omega\mu_0 \mathbf{J} \cdot \mathbf{G} - \delta \mathbf{E} \end{aligned}$$

- ▶ Integrointi koko avaruuden yli
- ▶ Green:

$$\begin{aligned} & \int_V \nabla \times \nabla \times \mathbf{E} \cdot \mathbf{G} - \mathbf{E} \cdot \nabla \times \nabla \times \mathbf{G} dV \\ &= \int_{\partial V} (\nabla \times \mathbf{E} \times \mathbf{G} + \mathbf{E} \times \nabla \times \mathbf{G}) \cdot \mathbf{n} dS = 0 \end{aligned}$$

Tilavuusintegraaliyhtälöt 2/2



- Tehtävän muotoilu:

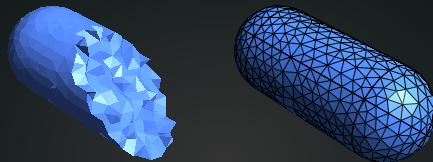
$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + i\omega\mu_0 \int_V \overline{\overline{G}} \mathbf{J} dV'$$

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \omega^2\mu_0 \int_v (\epsilon - \epsilon_0) \overline{\overline{G}} \mathbf{E} dV'$$

- Tehtävän määrittely äärellisessä alueessa
 $v \subset V$

Numeeriset menetelmät

- ▶ Etsi $\mathbf{E}$ alueessa v



- ▶ Likiarvoesitys $\mathbf{E} = \sum_{n=1}^N a_n \mathbf{f}_n$
- ▶ Variaatiomenetelmät $\rightarrow$ lineaarinen yhtälöryhmä
- ▶ Greenin funktio $\overline{\overline{G}} \propto \frac{1}{R^3}$ kun $R \rightarrow 0$

Yhteenveto

- ▶ Valon sironta arkipäiväisten ilmiöiden taustalla
- ▶ Sähkömagneettinen teoria hyvä mallinnuslähtökohta
- ▶ Väliaine – Reuna-arvotehtävä
- ▶ Dipolisäteilijä: yksinkertainen malli ja teoreettinen työkalu
- ▶ Pallohiukkanen: muuttujien separointi puree
- ▶ Ei-pallomaiset hiukkaset: integraalimenetelmät mielekkäitä

KIITOS.