

# Elektroiekin dantzan nanoeskala argitzeko

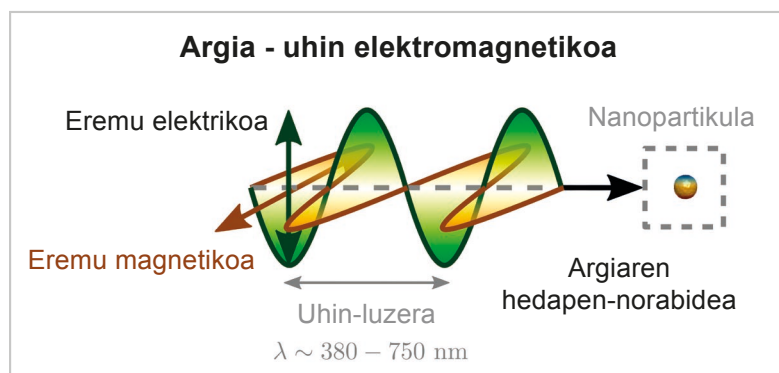
Historian zehar eginiko aurrerapen teknologiko eta aurkikuntza zientifiko ugari gure ikusmen-gaitasunaren hobekuntzan oinarritu dira. XVI. eta XVII. mendeetan, bultzada nabarmena eman zieten biologia eta medikuntzari luparen eta, bereziki, lehen mikroskopio optikoen asmakuntzek. Sistema optiko tradizional horiek, ordea, bereizmen mugatua dute; alegia, difrakzioa pairatzen dute: tresna horien bitartez, erabilitako argiaren uhin-luzeraren antzeko tamaina, edo handiagoa, duten xehetasunak soilik bereiz ditzakegu. Ondoz-ondoko bi uhin-fronte edo gailurren arteko distantzia da uhin-luzera, 1. irudian ageri den bezala. Itsasoko olatuen kasuan, adibidez, gailurren arteko distantzia hamarnaka metrokoa izan ohi da. Argi ikusgaiaren kasuan, aldiz, uhin-luzera 380 nm eta 750 nm bitartekoa da, eta, beraz, ezin ditzakegu bereizi tamaina hori baino txikiagoa duten xehetasunak sistema optiko tradizionalak erabiliz.

Difrakzioak ezartzen duen muga gainditzeko, argia bere uhin-luzera baino txikiagoa den espazioan konfinatzea ahalbidetzen duten teknikak behar ditugu. Zorionez, argiak eta materialak nanoeskalan duten elkarrekintzaren ondorioz,

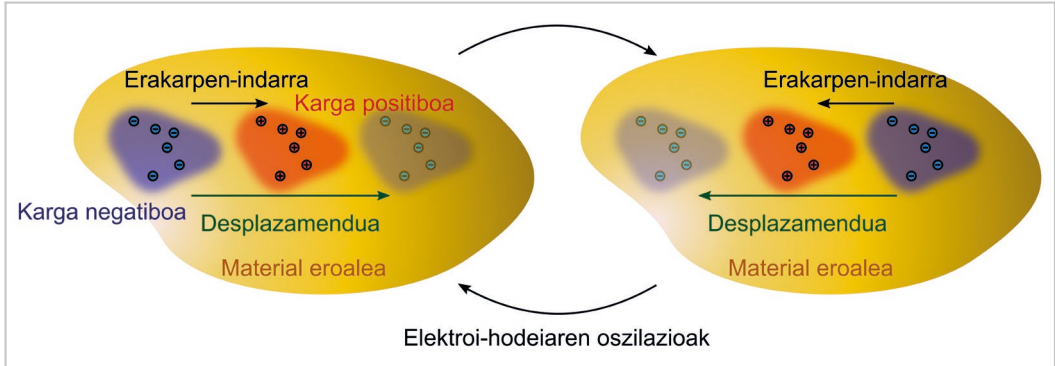
argiaren lokalizazioa lor daiteke eskala honetan. Nanofotonikaren erresuman murgildu behar gara horretarako.

## Elektroiekin dantzatzuz

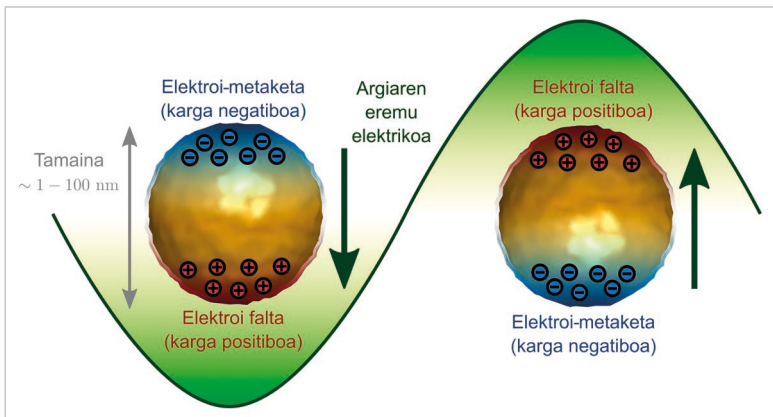
Argiaren uhin-luzeraz azpiko konfinamendua gainazaleko plasmioen bitartez erdiets daiteke, besteak beste. Zer dira, ordea, plasmoiak? Material eroaleetan, isolatzaileetan ez bezala, elektroiak aske higi daitezke. Elektroiei askeen multzoa gas edo hodei baten gisan irudikatu dezakegu. Hodei hori bere oreka egoeratik ateraz gero —2. irudian ageri den bezala—, elektroiei falta egongo da hodei hori hasieran zegoen lekuan. Gune batean, beraz, karga negatiboaren soberakin bat izango dugu, eta, bestetik, elektroiei horiek aurretik zeuden eskualdean, karga positiboaren soberakina. Karga positibo eta negatiboek elkar erakartzen dutenez, elektroiei-hodeiak erakartzen indar bat pairatuko du, eta alde batetik bestera joango da oszilatzen, berezko maiztasun batekin. Alegia, elektroiei dantzan ibil daitezke material eroaleetan, eta berezko erritmo bat dute horretarako, materialaren arabera dena. Plasmoi deritze elektroiei askeen oszilazio kolektibo horiei.



1. irudia. Argia (uhin elektromagnetikoa), eremu elektrikoak, eremu magnetikoak eta uhin-luzera.



2. irudia. Plasmioen (elektroi askeen oszilazio kolektiboan) eskema.



3. irudia. Argiak nanopartikuletan kitzikatutako plasmoiak.

Plasmoiak argiaren eta, oro har, uhin elektromagnetikoen bitartez kitzika daitezke. Eroalea den egitura itxi batean —nanopartikula batean, adibidez—, bertako elektroiek uhin horren eremu elektrikoari jarraituko diote, eta nanopartikularen gainazalaren alde batean metatuko dira, 3. irudian ageri den bezala. Argiaren eremu elektrikoak oszilatzen ahala, elektroi-hodeiak ere oszilatzen egingo du hari segika, argiak markatzen dien erritmoan dantza eginez. Argiaren maiztasuna eta berezko maiztasuna berdinak baldin badira, erresonantzia bat izango dugu nanopartikulan, hau da, plasmoi bat kitzikatuko dugu.

Gainazalean dugun karga-metaketa horrek eremu elektriko bat sortuko du, induzitutako eremua deitu ohi dena. Eremu elektriko induzitu hori oso bortitza izaten da karga metatu den gainazalaren inguruan. Argiztatzeko erabili dugun argiaren intentsitatea baino 100 aldiz bortitzagoa ere izan daiteke, baina oso azkar (esponentzialki) ahultzen da gainazaletik aldentu ahala. Horrela eremuaren handipen bat izan dezakegu nanometro gutxi batzuetako eskualde batean. Ondorioz, plasmoiek argia lokalizatzeko gaitasuna dute, eta difrakzio-muga gainditzeko balia daitezke. Horri esker, nanopartikularen gainazaletik gertu dauden

xehetasunak bereiz ditzakegu; molekulak, adibidez. Nork pentsatuko luke elektroi dantzari batzuek nanoeskala argitu zezaketenik!

Ez hori bakarrik, nanopartikula plasmonikoen, argia nanoeskanan lokalizatzeaz gain, argia urrunera sakabanatzeko gaitasuna ere badute. Alegia, antena baten gisan, uhin elektromagnetikoak jaso eta ondoren igortzeko gaitasuna dute: nanoantena dira. Gaitasun hori dela eta, argia erabiliz nanopartikula plasmonikoak galdekatu ditzakegu, nanopartikulari eta honen inguruneari buruzko informazioa lortzeko.

### Argiaren lokalizazioa mugara eramanez

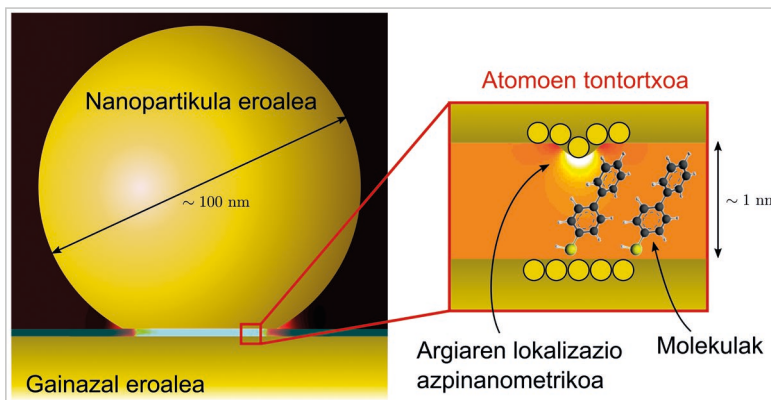
Nanopartikuletan kitzikatu daitezkeen plasmoeien lau ezaugarriekiko menpekotasuna dute: nanopartikularen tamaina, geometria, materiala eta ingurunea. Nire tesian, induzitutako eremuetan nanopartikularen geometriak duen eragina ikertu dut. Izan ere, erpinen inguruan eremu elektrikoak are gehiago lokalizatzen da eroaleetan, bertan elektroi gehiago metatzen direlako. Fenomeno horri tximistorratz-efektua deritzo (tximistorratzen funtzionamenduak fenomeno honetan du oinarria).

Nire tesian ikusi dudanez, eskala atomikoan ere antzeko portaera dute elektroiek. Plasmoeiekin

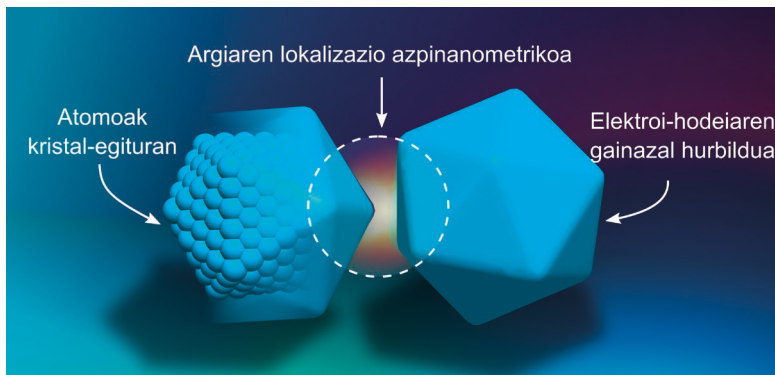
konbinatuz gero, argiaren lokalizazio azpnanometrikoa erdiets dezakegu. Argiaren lokalizazio azpnanometriko horren bidez oso txikia den espazioari buruzko informazioa lortzen da, 4. irudian ageri den bezala. Adibidez, nanopartikula eta gainazal eroaleen artean molekulak baldin baditugu, azken horien bibrazioak kitzikatu eta haien egitura azter dezakegu. Bai, molekulek ere dantza egin dezakete!

### Argiaren lokalizazioa auresateko beharrezko osagaiak

Halako nanopartikula edo nanoegitura baten erpinetan lor dezakegun eremuaren lokalizazioa simulazio bidez auresateko, zenbait eredu erabil ditzakegu. Izatez, atomoen kokalekua, hau da, kristal-egitura aintzat hartzen duen eredu batetik abiatu beharko ginatke. Ez hori bakarrik, elektroien izaera kuantikoa ere kontuan hartu beharko genuke. Tesi honetan, ordea, eremuaren lokalizazioa eta handipenaren zenbatekoa auresateko eredu sinpleagoak erabili ditugu. Elektroi-hodeiak kanpo-kitzikapenik gabe —alegia, argiztapenik gabe— duen itxura edo forma aintzat hartzea nahikoa izan daiteke kasu askotan. 5. irudian ageri dira bi adibide. Hau da, egitura kristalinoa zehatz-mehatz deskribatzea ez da ezinbestekoa. Dantzalekuari hormak jarri dizkiogu, elektroiek dantza egiteko erabiltzen duten espazioa aintzat hartuz, horrela



4. irudia. Ezkerretara, nanopartikula eroalea gainazal eroale baten gainean; tartean, eremua dago. Nanopartikula eta gainazalaren artean dauden atomoen tontortxoan inguruan lokalizatutako eremua.



5. irudia. Ezkerretara, atomoak eta haien kokalekua kontuan hartzen dituen eredu. Erdian, argiaren lokalizazio azpinanometrikoa. Ezkerrean, elektroi-hodeiaren itxura era hurbilduan aintzat hartzen duen gainazala.

musikaren erritmoak eta dantzarien mugimenduek ez dezaten aldaketa nabarmenik pairatu.

Laginak aztertzeko eta plasmioiak kitzikatzeko argia erabili beharrean, beste teknika batzuk ere erabil ditzakegu. Elektroi-sortez balia gaitzake, adibidez, ekorketa eta transmisioko mikroskopia elektronikoa erabiliz. Halako mikroskopiaek elektroi-sortak jaurtitzen dituzte laginekin talka egin edo horiek zeharkatu ondoren berriz jasotzeko. Elektroi-sorta horiek galdu duten energia, pairatu duten desbideraketa eta beste hainbat parametro neurtzen dira horrela. Datu horiek erabiliz laginaren propietateak zein diren azter dezakegu. Gainera, argia erabiliz baino askoz bereizmen hobea lortzen da, eta nanometroz azpiko bereizmena ahalbidetzen da. Horrez gain, nanoegitura eroaleetan plasmioiak kitzikatzeko erabil daitezke elektroi-sortak. Duten bereizmenagatik elektroi-sortak nanopartikularen geometriarekiko argia erabiltzen duten teknikak baino sentikorragoak dira. Aukera paregabea, beraz, eredu mugak zehazteko. Nire tesian erakutsi dudanez, aipatutako eredu sinpleetan nanopartikularen geometria xehetasunez deskribatzea ezinbestekoa da eredu konplexuagoetan lortzen diren emaitzak berresteko.

Geometria modu hurbilduan, xehetasun gehiago edo gutxiagorekin, aintzat hartzeak nabarmen errazten ditu simulazioak. Are gehiago, esperimendu askotan erabiltzen diren nanoegitura asko handiegiak eta konplexuegiak dira atomoak banan-banan kontuan hartu ahal izateko eta modu horretan ordenagailu bidezko simulazioak egiteko.

Besterik gabe, gaur egun ditugun ordenagailuek ez dute nahikoa potentzia hain kalkulu astunak egiteko. Hortaz, ezinbestekoa da eskuragarri ditugun eredu sinpleagoek dituzten mugak eta gaitasunak zein diren zehaztea simulazioetan lorturiko emaitzen eta aurreikuspenen fidagarritasuna berresteko. Ez genuke eta nahi elektroik erritmoa galduta dantzan ibiltzea. ●

## Bibliografia

- [1] L. Novotny and B. Hecht, "Principles of Nano-Optics", Cambridge University Press, Cambridge, 2012.
- [2] P. N. Prasad, "Nanophotonics", John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ, 2004.
- [3] M. Pelton, J. Aizpurua eta G. Bryant, "Metal-nanoparticle plasmonics", *Laser & Photonics Review* 2, 136–159 (2008).
- [4] F. Benz, M. K. Schmidt, A. Dreismann, R. Chikkaraddy, Y. Zhang, A. Demetriadou, C. Carnegie, H. Ohadi, B. de Nijs, R. Esteban, J. Aizpurua eta J. J. Baumberg, "Single-molecule optomechanics in "picocavities"", *Science* 354, 726–729 (2016).
- [5] M. Urbieto, M. Barbry, Y. Zhang, P. Koval, D. Sánchez-Portal, N. Zabala eta J. Aizpurua, "Atomic-Scale Lightning Rod Effect in Plasmonic Picocavities: A Classical View to a Quantum Effect", *ACS Nano* 12, 585–595 (2018)
- [6] R. Egerton, "Electron Energy-Loss Spectroscopy in the Electron Microscope". Springer US, Boston, MA, 2011.
- [7] F. J. García De Abajo, "Optical excitations in electron microscopy", *Reviews of Modern Physics* 82, 209–275 (2010).