



Fakultät V: Mathematik und Naturwissenschaften

Institut für Physik

Bachelorstudiengang Physik

Bachelorarbeit

Wärmeabstrahlung eines Nanoteilchens oberhalb eines dielektrischen Substrats

vorgelegt von

Florian Herz

Matrikelnummer: 2856057

Betreuender Gutachter: PD Dr. Svend-Age Biehs

Zweiter Gutachter: Prof. Dr. Martin Holthaus

Oldenburg, den 7. Oktober 2017

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Theoretische Überlegungen	3
2.1	Berechnung der fluktuierenden Felder	4
2.2	Green'sche Funktion	7
2.3	Berechnung der Leistung oberhalb eines dielektrischen Substrats	14
2.4	Berechnung der lokalen Zustandsdichte	22
3	Numerische Berechnungen	27
3.1	Siliziumcarbid und Silizium	27
3.2	Untersuchung der spektralen Leistung für feste Abstände zur Oberfläche und verschiedene Teilchenradien	32
3.3	Untersuchung der Abstandsabhängigkeit der spektralen Leistung für feste Wellenzahlen	34
3.4	Untersuchung der spektralen Leistung in Abhängigkeit vom Winkel zur Oberfläche	36
3.5	Untersuchung der gesamten Leistung	40
4	Diskussion der Ergebnisse und ihr Vergleich mit alternativen Modellen	42
4.1	Vergleich mit experimentellen Ergebnissen	42
4.2	Vergleich mit der am häufigsten angewandten Theorie	43
4.3	Optimierungsmöglichkeiten der hier erarbeiteten Theorie	45
5	Zusammenfassung	47

Abbildungsverzeichnis

1	Schema des betrachteten Systems	5
2	Darstellung der Polarisationsbasis	10
3	Schema des betrachteten Systems mit Detektionsebene	15
4	Permittivität von Siliziumcarbid	29
5	Lokale Zustandsdichte von Siliziumcarbid	30
6	Permittivität von Silizium	32
7	Spektrale Leistung in Abhängigkeit von der Wellenzahl für verschiedene Abstände	33
8	Spektrale Leistung in Abhängigkeit von der Wellenzahl und dem Radius . .	34
9	Spektrale Leistung in Abhängigkeit vom Abstand für verschiedene Wellenzahlen	35
10	Spektrale Leistung in Abhängigkeit von der Wellenzahl und dem Winkel . .	38
11	Betrag der normierten, spektralen Leistung nach Gleichung (3.4.8) in Abhängigkeit von der Wellenzahl und dem Betrag des Wellenvektors	39
12	Vollständige Leistung in Abhängigkeit vom Abstand	41
13	Graphischer Vergleich der Theorien (2.3.26) und (4.2.5) in Abhängigkeit von der Wellenzahl	45

Tabellenverzeichnis

1	Werte zur Berechnung der Permittivität von Siliziumcarbid	28
---	---	----

1 Einleitung

Seit der Formulierung der Strahlungsgesetze von Gustav Robert Kirchhoff (1859), Josef Stefan und Ludwig Boltzmann (1884) sowie Max Planck (1900) kann man die Wärmestrahlung im Fernfeld sehr genau beschreiben bzw. charakterisieren [1]. Aber unterhalb der thermischen Wellenlänge $\lambda_{th} = \frac{hc}{k_B T}$ gelten diese Gesetze nicht mehr, sodass der Wärmetransport im Nahfeld den im Fernfeld um mehrere Größenordnungen übersteigen kann, was Polder und van Hove [2] mit der Theorie der fluktuierenden Elektrodynamik, die von Rytov entwickelt wurde [3], vorhersagten. Grund dafür sind evaneszente Oberflächenmoden, die ins Fernfeld gestreut werden. Dadurch ergeben sich interessante Anwendungen in der modernen Technik, was einige Experimente untermauerten [4, 5, 6].

In dieser Arbeit soll ein Ausdruck für die Leistung im Nahfeld auf Grundlage der makroskopischen Maxwell-Gleichungen gefunden werden, der die Resultate dieser Experimente beschreiben kann, in denen man das Spektrum von Wärmestrahlung nahe einer Oberfläche gestreut an der Spitze eines Rasterkraftmikroskops aufnahm. Dazu wird vereinfacht ein erhitztes Nanoteilchen in der Nähe eines dielektrischen Substrats betrachtet. In mehreren Schritten werden zunächst die Felder, der Poynting-Vektor und schließlich die Leistung berechnet. Zur Untersuchung der Eigenschaften des Substrats und zum späteren Vergleich mit einer für diese Experimente häufig verwendeten Theorie wird zudem die lokale Zustandsdichte berechnet. Es werden die Abhängigkeiten von den verschiedenen Parametern untersucht und die Ergebnisse mit den Experimenten verglichen.

2 Theoretische Überlegungen

Berechnet werden soll die Leistung, die ein Nanoteilchen oberhalb einer Grenzfläche, die die Oberfläche eines dielektrischen Substrats darstellt, in den Raum dahinter abstrahlt. Dabei spielen der Anteil eine Rolle, der vom Nanoteilchen direkt in den Raum hinter sich abgestrahlt wird, sowie der, der in die andere Raumhälfte emittiert wird, mit der Oberfläche interagiert und schließlich am Nanoteilchen gestreut wird. Dazu müssen zunächst das elektrische und magnetische Feld ermittelt werden, die dieses Nanoteilchen emittiert. Träger der Information über die Interaktion mit der Oberfläche sind dabei die Green'schen Funktionen. Deren Matrixeinträge werden hier explizit ermittelt. Mit Hilfe der Felder kann man den Poynting-Vektor berechnen, der, wenn man ihn über eine Fläche integriert, die z.B. ein Detektor sein könnte, die von Teilchen emittierte Leistung liefert. Abschließend wird aus den ermittelten Green'schen Funktionen die Zustandsdichte errechnet, anhand

derer sich schon einige Eigenschaften der Oberfläche ablesen und später Vergleiche zu anderen Modellen ziehen lassen.

2.1 Berechnung der fluktuierenden Felder

Im Allgemeinen lassen sich das elektrische und magnetische Feld im Frequenzbereich über die Definition

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = i\mu_0\omega \int_V d^3r' [\mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \cdot \mathbf{J}^e(\mathbf{r}', \omega) + \mathbb{G}^{\text{EH}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \cdot \mathbf{J}^m(\mathbf{r}', \omega)], \quad (2.1.1)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = i\mu_0\omega \int_V d^3r' [\mathbb{G}^{\text{HH}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \cdot \mathbf{J}^m(\mathbf{r}', \omega) + \mathbb{G}^{\text{HE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \cdot \mathbf{J}^e(\mathbf{r}', \omega)]. \quad (2.1.2)$$

ermitteln [3]. Dabei stehen \mathbf{J}^e und \mathbf{J}^m für die elektrische bzw. magnetische Stromdichte. Die Dyade $\mathbb{G}_{\alpha\beta}^{\text{EE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ bezeichnet die α -te Komponente des elektrischen Feldes am Ort \mathbf{r} erzeugt durch einen elektrischen Dipol am Ort \mathbf{r}' in β -Richtung. $\mathbb{G}_{\alpha\beta}^{\text{HE}}$ beschreibt das zugehörige magnetische Feld. Die Dyade $\mathbb{G}_{\alpha\beta}^{\text{HH}}$ bezeichnet die α -te Komponente des magnetischen Feldes am Ort \mathbf{r} erzeugt durch einen magnetischen Dipol am Ort \mathbf{r}' in β -Richtung. $\mathbb{G}_{\alpha\beta}^{\text{EH}}$ beschreibt das zugehörige elektrische Feld.

Da hier davon ausgegangen wird, dass der Punktdipol lediglich eine elektrische Stromdichte trägt, gilt $\mathbf{J}^m(\mathbf{r}', \omega) \equiv \mathbf{0}$. Dadurch vereinfachen sich die Formeln (2.1.1) und (2.1.2) zu

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = i\mu_0\omega \int_V d^3r' \mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \cdot \mathbf{J}^e(\mathbf{r}', \omega), \quad (2.1.3)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = i\mu_0\omega \int_V d^3r' \mathbb{G}^{\text{HE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \cdot \mathbf{J}^e(\mathbf{r}', \omega). \quad (2.1.4)$$

Die Stromdichte des Punktdipols lässt sich ausdrücken durch die zeitliche Ableitung des elektrischen Dipolmoments \mathbf{p} [7]

$$\mathbf{J}^e(\mathbf{r}, t) = \dot{\mathbf{p}}(t)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p). \quad (2.1.5)$$

Über eine Fouriertransformation in den Frequenzraum ergibt sich also

$$\mathbf{J}^e(\mathbf{r}, \omega) = -i\omega\mathbf{p}(\omega)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p). \quad (2.1.6)$$

\mathbf{r}_p bezeichnet dabei die Position des Punktdipols im Raum. Daher vereinfachen sich die

Gleichungen (2.1.3) und (2.1.4) für einen Punktdipol weiter zu

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \mu_0 \omega^2 \mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega) \cdot \mathbf{p}(\omega), \quad (2.1.7)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = \mu_0 \omega^2 \mathbb{G}^{\text{HE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega) \cdot \mathbf{p}(\omega). \quad (2.1.8)$$

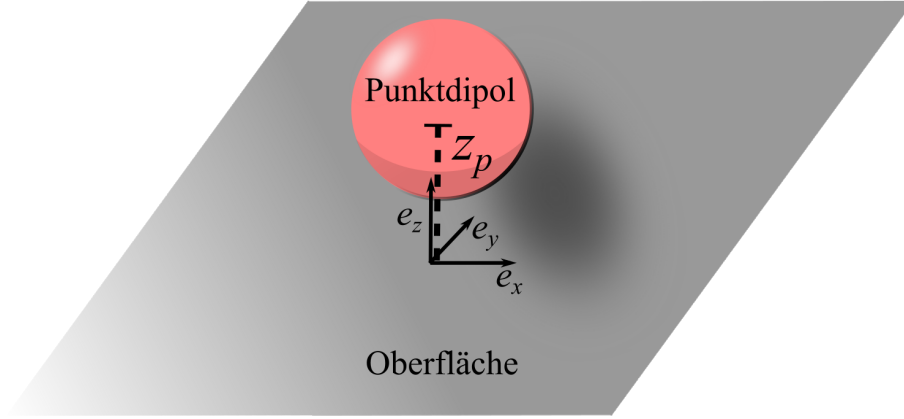


Abbildung 1: Schematische Darstellung des betrachteten Systems mit eingezeichnetem Koordinatensystem.

Betrachtet wird jetzt speziell ein Punktdipol, der sich im Vakuum befindet. Dieser strahlt in zwei Raumhälften ab, wobei sich in einer Raumhälfte im Abstand z_p eine unendlich ausgedehnte Oberfläche befindet. Die Verbindungsachse zwischen Oberfläche und Punktdipol fällt dabei mit der z -Achse zusammen (siehe Abbildung 1). Alle Variablen, die mit der Oberfläche zusammenhängen, werden im Folgenden mit der Zahl 1 indiziert und diejenigen im Vakuum mit der Zahl 0. Der Punktdipol erhält den Index PD. Das Dipolmoment $\mathbf{p}(\omega)$ setzt sich aus einem fluktuierenden Anteil $\mathbf{p}^{\text{fl}}(\omega)$ und induzierten Anteil [8, 9]

$$\mathbf{p}^{\text{ind}}(\omega) = \varepsilon_0 \alpha \mathbf{E}(\mathbf{r}_p, \omega) \quad (2.1.9)$$

zusammen. Hierbei ist die Polarisierbarkeit α des Punktdipols gegeben durch die Clausius-Mosotti-Gleichung [10]

$$\alpha = 4\pi R^3 \left(\frac{\varepsilon_{\text{PD}} - 1}{\varepsilon_{\text{PD}} + 2} \right). \quad (2.1.10)$$

Diese beiden Definitionen werden in Gleichung (2.1.7) eingesetzt, um das elektrische Feld am Ort \mathbf{r}_p zu bestimmen und damit die Stärke des induzierten Dipolmoments. Da diese Gleichung für alle \mathbf{r} gilt, macht sie dies ebenso für $\mathbf{r} = \mathbf{r}_p$. Damit erhält man die Bestim-

mungsgleichung für $\mathbf{E}(\mathbf{r}_p, \omega)$, indem man einige algebraische Umformungen vornimmt:

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}(\mathbf{r}_p, \omega) &= \omega^2 \mu_0 \mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_p, \omega) \cdot \mathbf{p}^{\text{fl}}(\omega) + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \alpha \mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_p, \omega) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_p, \omega) \\
\Leftrightarrow \left[\mathbb{1} - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \alpha \mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_p, \omega) \right] \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_p, \omega) &= \omega^2 \mu_0 \mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_p, \omega) \cdot \mathbf{p}^{\text{fl}}(\omega) \\
\Leftrightarrow \mathbf{E}(\mathbf{r}_p, \omega) &= \omega^2 \mu_0 \left[\mathbb{1} - k_0^2 \alpha \mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_p, \omega) \right]^{-1} \cdot \mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_p, \omega) \cdot \mathbf{p}^{\text{fl}}(\omega). \quad (2.1.11)
\end{aligned}$$

Dabei wurde der Betrag des Wellenvektors $k := \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon(\omega)}$ eingeführt. Der Index 0 verweist auf das Vakuum als Medium, wo $\varepsilon(\omega) = 1$ gilt.

Die Green'sche Funktion ist zusammengesetzt aus einem direkt rückwirkenden Anteil des Punktdipols auf sich selbst und einem Streuanteil an der Oberfläche [11], sodass gilt

$$\mathbb{G}^{\text{EE}} = \mathbb{G}^{\text{EE},0} + \mathbb{G}^{\text{EE},\text{Sc}}. \quad (2.1.12)$$

Der direkt rückwirkende Anteil $\mathbb{G}^{\text{EE},0}$ divergiert, da das Teilchen durch einen Punktdipol approximiert wurde. Diese unphysikalische Divergenz wird daher an dieser Stelle nicht berücksichtigt, sodass für die Berechnung von $\mathbf{E}(\omega, \mathbf{r}_p)$ nur $\mathbb{G}^{\text{EE},\text{Sc}}$ verwendet wird. Später wird der Einfluss von $\mathbb{G}^{\text{EE},0}$ durch eine geeignete Anpassung des Dipolmoments mitberücksichtigt. Zusätzlich wird eine neue Dyade \mathbb{D} eingeführt, die den Ausdruck verkürzt. So wird mit (2.1.12) aus Gleichung (2.1.11)

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_p, \omega) = \mu_0 \omega^2 \mathbb{D}^{-1} \cdot \mathbb{G}^{\text{EE},\text{Sc}}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_p, \omega) \cdot \mathbf{p}^{\text{fl}}(\omega) \quad (2.1.13)$$

mit

$$\mathbb{D} := \mathbb{1} - k_0^2 \alpha \mathbb{G}^{\text{EE},\text{Sc}}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_p, \omega). \quad (2.1.14)$$

Die Gleichungen (2.1.13) und (2.1.12) werden ins ursprüngliche elektrische Feld (2.1.7) wieder eingesetzt:

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) &= \mu_0 \omega^2 \mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega) \cdot \mathbf{p}^{\text{fl}}(\omega) + k_0^2 \alpha \mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}_p, \omega) \\
&= \mu_0 \omega^2 \mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega) \cdot \left[\mathbb{1} + k_0^2 \alpha \mathbb{D}^{-1} \cdot \mathbb{G}^{\text{EE},\text{Sc}}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_p, \omega) \right] \cdot \mathbf{p}^{\text{fl}}(\omega) \\
&= \mu_0 \omega^2 \mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega) \cdot \mathbb{D}^{-1} \cdot \left[\mathbb{D} + k_0^2 \alpha \mathbb{G}^{\text{EE},\text{Sc}}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_p, \omega) \right] \cdot \mathbf{p}^{\text{fl}}(\omega) \\
&= \mu_0 \omega^2 \mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega) \cdot \mathbb{D}^{-1} \cdot \mathbf{p}^{\text{fl}}(\omega). \quad (2.1.15)
\end{aligned}$$

Die Klammer im vorletzten Rechenschritt entfällt dabei, weil sie nach der Definition aus Gleichung (2.1.14) gerade die Einheitsmatrix ergibt. Aus dem erhaltenen Ausdruck für

das elektrische Feld kann man über den Zusammenhang zwischen den Feldern [12]

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{1}{i\mu_0\omega} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \quad (2.1.16)$$

direkt das magnetische Feld berechnen, denn es gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) &= \frac{1}{i\mu_0\omega} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \\ &= -i\omega \nabla \times \mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega) \cdot \mathbb{D}^{-1} \cdot \mathbf{p}^{\text{fl}}(\omega). \end{aligned} \quad (2.1.17)$$

Dabei hängt nur die Green'sche Funktion vom Beobachtungspunkt \mathbf{r} ab, weshalb auch nur auf sie die Rotation angewendet wird. Über den Zusammenhang zwischen den Green'schen Funktionen unter Vernachlässigung der magnetischen Eigenschaften

$$\mathbb{G}^{\text{HE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega) = \frac{1}{i\mu_0\omega} \nabla \times \mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega) \quad (2.1.18)$$

ergibt sich für das Magnetfeld in Gleichung (2.1.17) ein analoger Ausdruck im Vergleich zum elektrischen Feld in Gleichung (2.1.15). Dieser lautet

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = \mu_0\omega^2 \mathbb{G}^{\text{HE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega) \cdot \mathbb{D}^{-1} \cdot \mathbf{p}^{\text{fl}}(\omega). \quad (2.1.19)$$

So wurden das elektrische und magnetische Feld direkt durch das fluktuierende Dipolmoment ausgedrückt.

2.2 Green'sche Funktion

Zur vollständigen Berechnung des elektrischen und magnetischen Feldes benötigt man noch die Green'schen Funktionen. Bestimmt wird eigentlich nur $\mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega)$, da die restlichen Dyaden aus dieser errechnet werden können, wie man in Gleichung (2.1.18) sieht. Für diese gilt die Helmholtz-Gleichung [12]

$$\mathbb{L}_E \mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \mathbb{1} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.2.1)$$

mit

$$\mathbb{L}_E := \nabla \times \nabla \times \mathbb{1} - k_0^2 \varepsilon(\mathbf{r}, \omega). \quad (2.2.2)$$

Der Ausdruck $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)$ bezeichnet dabei einen Tensor zweiter Stufe, der die Permittivität des Mediums beschreibt. Oberhalb der Oberfläche ($z \geq 0$) wird der Tensor zweiter Stufe zur Einheitsmatrix, da man sich dort im Vakuum befindet. Auf bzw. unterhalb der Ober-

fläche ($z < 0$) befindet man sich in einem anderen Medium, das hier wie das Vakuum als homogen, isotrop und nichtmagnetisch angenommen wird. Durch die Isotropie und Homogenität des dielektrischen Materials, aus dem das Substrat besteht, wird der Tensor zweiter Stufe diagonal und ist unabhängig vom Ort im Medium. Zusammengefasst ergibt sich

$$\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) = \begin{cases} \varepsilon(\omega)\mathbb{1} & \text{für } z \leq 0 \\ \mathbb{1} & \text{für } z \geq 0 \end{cases}. \quad (2.2.3)$$

Die Lösung von Gleichung (2.2.1) für den Operator aus Gleichung (2.2.2) ist für den betrachteten Fall bekannt [13]. Die Green'sche Funktion wird dabei in der Regel in der Polarisationsbasis angegeben. Dazu wird eine Fouriertransformation bzgl. des Ortes durchgeführt und in den k -Raum durch $\mathbf{r} - \mathbf{r}_p \leftrightarrow \mathbf{k}$ gewechselt. Dort wird der Vektor

$$\boldsymbol{\kappa} := (k_x, k_y)^t \quad (2.2.4)$$

für die x- und y-Komponente des k -Vektors definiert. Er liegt in der Fläche parallel zur Oberfläche. Zur Abkürzung bei der Integration über den k -Raum wird der Ausdruck

$$d^2\kappa := dk_x dk_y \quad (2.2.5)$$

verwendet. Der Betrag des Wellenvektors in z-Richtung wird beschrieben durch

$$\gamma := \sqrt{k^2 - \kappa^2}, \quad (2.2.6)$$

sodass der Betrag des Wellenvektors $\sqrt{k_x^2 + k_y^2 + \gamma^2} = \frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon(\omega)} := k$ ergibt. Mit Hilfe dieser Definitionen lässt sich der Wellenvektor

$$\mathbf{k}_{\pm} := (k_x, k_y, \pm\gamma)^t = (\boldsymbol{\kappa}, \pm\gamma)^t \quad (2.2.7)$$

einführen.

Durch die z-Achse und den Vektor \mathbf{k}_{\pm} wird die sogenannte Einfallsebene aufgespannt. Sind die Felder entlang des Vektors

$$\mathbf{a}_s^{\pm}(k) := \frac{\mathbf{k}_{\pm} \times \mathbf{e}_z}{\sqrt{(\mathbf{k}_{\pm} \times \mathbf{e}_z)^2}} = \frac{1}{\kappa}(k_y, -k_x, 0)^t \quad (2.2.8)$$

polarisiert, nennt man sie senkrecht- bzw. s-polarisiert, weil sie senkrecht zur Einfallsebene

verlaufen. Sind sie entlang des Vektors

$$\mathbf{a}_p^\pm(k) := \frac{\mathbf{a}_s^\pm \times \mathbf{k}_\pm}{\sqrt{(\mathbf{a}_s^\pm \times \mathbf{k}_\pm)^2}} = \frac{1}{\kappa k} (\mp k_x \gamma_0, \mp k_y \gamma, \kappa^2)^t \quad (2.2.9)$$

polarisiert, nennt man sie parallel- bzw. p-polarisiert, weil sie in der Einfallsebene liegen. Für den Fall, dass man sich im Vakuum befindet, erhalten die Variablen k und γ den Index 0. Zusätzlich werden die x- und y-Koordinaten zu dem Vektor

$$\mathbf{x} = (x, y)^t \quad (2.2.10)$$

zusammengefasst. Innerhalb dieser Definitionen lautet die Green'sche Funktion

$$\mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega) = i \int \frac{d^2 \kappa}{(2\pi)^2} e^{i\kappa \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p)} \mathbb{G}^{\text{EE}}(\boldsymbol{\kappa}, z, \omega) \quad (2.2.11)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbb{G}^{\text{EE}}(\boldsymbol{\kappa}, z, \omega) := & \frac{e^{i\gamma_0(z-z_p)}}{2\gamma_0} [\mathbf{a}_s^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_s^+(k_0) + \mathbf{a}_p^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_p^+(k_0)] \\ & + \frac{e^{i\gamma_0(z+z_p)}}{2\gamma_0} [r_s \mathbf{a}_s^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_s^-(k_0) + r_p \mathbf{a}_p^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_p^-(k_0)]. \end{aligned} \quad (2.2.12)$$

Die Faktoren r_s und r_p bezeichnen die bekannten Fresnel'schen Amplitudenreflexionskoeffizienten für die s- und p-Polarisation [14], die für das betrachtete System definiert sind durch

$$r_s = \frac{\gamma_0 - \gamma_1}{\gamma_0 + \gamma_1}, \quad (2.2.13)$$

$$r_p = \frac{\varepsilon_1 \gamma_0 - \gamma_1}{\varepsilon_1 \gamma_0 + \gamma_1}. \quad (2.2.14)$$

Sie beschreiben das Verhältnis aus der Amplitude des reflektierten und der des einfallenden elektrischen Feldes. Die Matrizen in der Green'schen Funktion in Gleichung (2.2.12) werden für die weitere Rechenschritte genau angegeben:

$$\mathbf{a}_s^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_s^\pm(k_0) = \frac{1}{\kappa^2} \begin{pmatrix} k_y^2 & -k_x k_y & 0 \\ -k_x k_y & k_x^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.2.15)$$

und

$$\mathbf{a}_p^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_p^\pm(k_0) = \frac{1}{\kappa^2 k_0^2} \begin{pmatrix} \pm k_x^2 \gamma_0^2 & \pm k_x k_y \gamma_0^2 & -k_x \kappa^2 \gamma_0 \\ \pm k_x k_y \gamma_0^2 & \pm k_y^2 \gamma_0^2 & -k_y \kappa^2 \gamma_0 \\ \mp k_x \kappa^2 \gamma_0 & \mp k_y \kappa^2 \gamma_0 & \kappa^4 \end{pmatrix}. \quad (2.2.16)$$

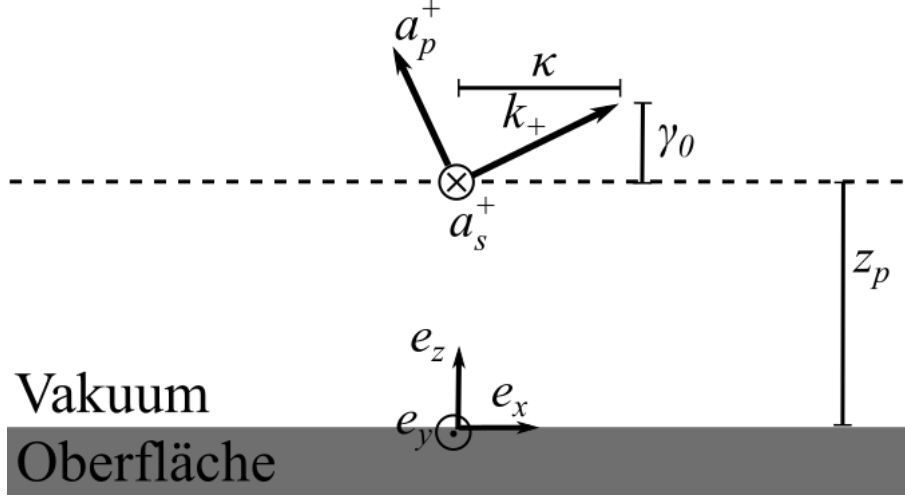


Abbildung 2: Darstellung der definierten Vektoren und Längen für die Polarisationsbasis für den Fall $k_y = 0$.

Zur Berechnung der Dyade \mathbb{D} wird der Fall $\mathbf{r} = \mathbf{r}_p$ in Gleichung (2.2.11) betrachtet. Dadurch entfällt dort der Exponentialterm. In Gleichung (2.2.12) entfällt ebenso der erste Exponentialterm, der zweite wird zu $e^{2i\gamma_0 z_p}$. Zusätzlich werden die Polarkoordinaten

$$\boldsymbol{\kappa} = \kappa(\cos(\varphi), \sin(\varphi))^t \quad (2.2.17)$$

eingeführt. Dadurch bleibt in den Matrizen nur entlang der Diagonalen kein Winkelbeitrag zurück, denn integriert man über den Winkel φ , verschwinden die Nichtdiagonaleinträge, da $\int_0^{2\pi} d\varphi \sin(\varphi) = \int_0^{2\pi} d\varphi \cos(\varphi) = \int_0^{2\pi} d\varphi \sin(\varphi) \cos(\varphi) = 0$ gilt. In diesem Fall erhält man die in Gleichung (2.1.12) schon angesprochenen beiden Teile der Green'schen Funktion

$$\begin{aligned} \mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_p, \omega) &= \frac{i}{8\pi} \int_0^\infty d\kappa \frac{\kappa}{\sqrt{k_0^2 - \kappa^2}} \begin{pmatrix} G_{xx}^0 & 0 & 0 \\ 0 & G_{xx}^0 & 0 \\ 0 & 0 & G_{zz}^0 \end{pmatrix} \\ &+ \frac{i}{8\pi} \int_0^\infty d\kappa \frac{\kappa e^{2iz_p \sqrt{k_0^2 - \kappa^2}}}{\sqrt{k_0^2 - \kappa^2}} \begin{pmatrix} G_{xx}^{\text{Sc}} & 0 & 0 \\ 0 & G_{xx}^{\text{Sc}} & 0 \\ 0 & 0 & G_{zz}^{\text{Sc}} \end{pmatrix} \\ &= \mathbb{G}^{\text{EE},0} + \mathbb{G}^{\text{EE},\text{Sc}} \end{aligned} \quad (2.2.18)$$

mit den Matrixeinträgen

$$G_{xx}^0 := 2 - \frac{\kappa^2}{k_0^2}, \quad (2.2.19)$$

$$G_{zz}^0 := 2 \frac{\kappa^2}{k_0^2}, \quad (2.2.20)$$

$$G_{xx}^{\text{Sc}} := r_s - r_p \left(1 - \frac{\kappa^2}{k_0^2}\right), \quad (2.2.21)$$

$$G_{zz}^{\text{Sc}} := 2r_p \frac{\kappa^2}{k_0^2}. \quad (2.2.22)$$

Das erste Integral würde dabei divergieren. Dies erkennt man leicht, wenn man das Integral aufteilt in die Bereiche $0 \leq \kappa \leq k_0$ und $k_0 \leq \kappa \leq \infty$. Für den ersten Bereich ergäbe sich eine komplexe Zahl und

$$\frac{1}{8\pi} \int_{k_0}^{\infty} d\kappa \frac{\kappa}{\sqrt{\kappa^2 - k_0^2}} \begin{pmatrix} 2 - \frac{\kappa^2}{k_0^2} & 0 & 0 \\ 0 & 2 - \frac{\kappa^2}{k_0^2} & 0 \\ 0 & 0 & 2 \frac{\kappa^2}{k_0^2} \end{pmatrix} = \frac{k_0}{8\pi} \int_0^{\infty} dx \begin{pmatrix} 1 - x^2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - x^2 & 0 \\ 0 & 0 & 2(x^2 + 1) \end{pmatrix}$$

für den zweiten. Dabei wurde die Substitution $x := \sqrt{\frac{\kappa^2}{k_0^2} - 1}$ verwendet. Anhand der quadratischen x -Abhängigkeit erkennt man, dass für jeden Matrixeintrag das Integral divergiert. Das Integral im Ausdruck für $\mathbb{G}^{\text{EE,Sc}}$ dagegen besitzt in diesem Bereich noch eine abklingende Exponentialfunktion, wodurch das Integral konvergiert.

Dass man eine Diagonalmatrix erhalten muss, ergibt sich auch aus der Bedeutung der Green'schen Funktion. Jeder Eintrag $\mathbb{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega)$ beschreibt hier die α -te Komponente des elektrischen Feldes am Ort \mathbf{r} , die von einem Punktdipol ausgerichtet in Richtung β an der Stelle \mathbf{r}_p erzeugt wird. Das elektrische Feld am Ort $\mathbf{r} = \mathbf{r}_p$ kann nur dem des elektrischen Punktdipols folgen, sodass eine Komponente des elektrischen Feldes auch nur durch dieselbe Komponente des Punktdipols generiert werden kann. Mathematisch sieht man dies noch besser, da die Richtungen α des elektrischen Feldes und β des Punktdipol übereinstimmen, wodurch $\mathbb{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_p, \omega) = \mathbb{G}_{\alpha\alpha}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_p, \omega) \delta_{\alpha\beta}$ mit dem Kronecker-Delta $\delta_{\beta\alpha}$ gilt. Daher verschwinden alle Matrixeinträge abgesehen von der Diagonalen. Zusätzlich beschreibt diese Matrix ein uniaxiales, anisotropes System, da zwei der Diagonaleinträge identisch sind, wenn man sich am Ort des Punktdipols befindet. Demnach wäre in diesem Fall die optische Achse des Systems – also die rotationssymmetrische Achse – die z -Achse, da dieser Eintrag von den beiden anderen abweicht. Dies entspricht der Symmetrie des betrachteten Systems.

Zur Berechnung der Inversen der Dyade \mathbb{D} nach Gleichung (2.1.14) muss lediglich der

Kehrwert der Diagonaleinträge gebildet werden:

$$\mathbb{D}^{-1} = \begin{pmatrix} d_{xx}^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & d_{xx}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & d_{zz}^{-1} \end{pmatrix} \quad (2.2.23)$$

mit

$$d_{xx}^{-1} = \frac{1}{1 - k_0^2 \alpha \mathbb{G}_{xx}^{\text{EE,Sc}}}, \quad (2.2.24)$$

$$d_{zz}^{-1} = \frac{1}{1 - k_0^2 \alpha \mathbb{G}_{zz}^{\text{EE,Sc}}}. \quad (2.2.25)$$

Aus der bereits bekannten Dyade für das elektrische Feld erzeugt durch einen elektrischen Dipol lässt sich nun diejenige für das magnetische Feld erzeugt durch selbigen berechnen. Dies geschieht über Gleichung (2.1.18)

$$\mathbb{G}^{\text{HE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega) = \frac{1}{i\mu_0\omega} \nabla \times \mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega). \quad (2.2.26)$$

Angewandt auf die Green'sche Funktion aus (2.2.11) folgt

$$\begin{aligned} \mathbb{G}^{\text{HE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega) &= \frac{1}{i\mu_0\omega} \int \frac{d^2\kappa}{(2\pi)^2} \left[\nabla \times \left(e^{i\boldsymbol{\kappa} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p)} \frac{ie^{i\gamma_0(z-z_p)}}{2\gamma_0} [\mathbf{a}_s^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_s^+(k_0) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \mathbf{a}_p^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_p^+(k_0)] \right) + \nabla \times \left(e^{i\boldsymbol{\kappa} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p)} \frac{ie^{i\gamma_0(z+z_p)}}{2\gamma_0} \right. \\ &\quad \left. \left. [r_s \mathbf{a}_s^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_s^-(k_0) + r_p \mathbf{a}_p^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_p^-(k_0)] \right) \right]. \quad (2.2.27) \end{aligned}$$

Zur Berechnung der Rotation der Dyade wird die Rechenregel

$$\begin{aligned} \nabla \times [f(\mathbf{r})\mathbb{T}] &= \varepsilon_{ijk} \partial_j (f(\mathbf{r})\mathbf{t}_k \otimes \mathbf{e}_k) \\ &= \varepsilon_{ijk} \partial_j f(\mathbf{r})\mathbf{t}_k \otimes \mathbf{e}_k + \varepsilon_{ijk} f(\mathbf{r}) \partial_j \mathbf{t}_k \otimes \mathbf{e}_k \\ &= \nabla f(\mathbf{r}) \times \mathbb{T} + f(\mathbf{r}) \nabla \times \mathbb{T} \end{aligned} \quad (2.2.28)$$

verwendet, wobei \mathbb{T} einen Tensor zweiter Stufe bezeichnet, der hier durch das dyadische Produkt der Polarisationsvektoren entsteht. Da \mathbb{T} in diesem Fall nicht vom Ort abhängt, vereinfacht sich die Rechenregel (2.2.28) zu

$$\nabla \times [f(\mathbf{r})\mathbb{T}] = \nabla f(\mathbf{r}) \times \mathbb{T}. \quad (2.2.29)$$

Mit Hilfe dieser Rechenregel (2.2.29) folgt für die Rotation aus Gleichung (2.2.27)

$$\begin{aligned} \mathbb{G}^{\text{HE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega) &= \frac{1}{i\mu_0\omega} \int \frac{d^2\kappa}{(2\pi)^2} \left[\nabla \left(e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}_p)} \frac{ie^{i\gamma_0(z-z_p)}}{2\gamma_0} \right) \times [\mathbf{a}_s^+ \otimes \mathbf{a}_s^+ + \mathbf{a}_p^+ \otimes \mathbf{a}_p^+] \right. \\ &\quad \left. + \nabla \left(e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}_p)} \frac{ie^{i\gamma_0(z+z_p)}}{2\gamma_0} \right) \times [r_s \mathbf{a}_s^+ \otimes \mathbf{a}_s^- + r_p \mathbf{a}_p^+ \otimes \mathbf{a}_p^-] \right]. \end{aligned} \quad (2.2.30)$$

Als nächstes werden der Gradient und das Kreuzprodukt des daraus entstehenden Vektors mit den jeweiligen Polarisationsvektoren ermittelt:

$$\nabla \frac{e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}_p)} e^{i\gamma_0(z\pm z_p)}}{\gamma_0} = \frac{ie^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}_p)} e^{i\gamma_0(z\pm z_p)}}{\gamma_0} \mathbf{k}_+, \quad (2.2.31)$$

$$\mathbf{k}_+ \times \mathbf{a}_s^+(k_0) = -k_0 \mathbf{a}_p^+(k_0), \quad (2.2.32)$$

$$\mathbf{k}_+ \times \mathbf{a}_p^+(k_0) = \frac{\kappa^2 + \gamma_0^2}{k_0} \mathbf{a}_s^+(k_0) = k_0 \mathbf{a}_s^+(k_0). \quad (2.2.33)$$

Mit diesen Ausdrücken lässt sich $\mathbb{G}^{\text{HE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega)$ als

$$\begin{aligned} \mathbb{G}^{\text{HE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega) &= \frac{i}{\omega\mu_0} \int \frac{d^2\kappa}{(2\pi)^2} \left[e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}_p)} \frac{e^{i\gamma_0(z-z_p)}}{2\gamma_0} [(\mathbf{k}_+ \times \mathbf{a}_s^+) \otimes \mathbf{a}_s^+ \right. \\ &\quad \left. + (\mathbf{k}_+ \times \mathbf{a}_p^+) \otimes \mathbf{a}_p^+] + e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}_p)} \frac{e^{i\gamma_0(z+z_p)}}{2\gamma_0} \right. \\ &\quad \left. [r_s (\mathbf{k}_+ \times \mathbf{a}_s^+) \otimes \mathbf{a}_s^- + r_p (\mathbf{k}_+ \times \mathbf{a}_p^+) \otimes \mathbf{a}_p^-] \right] \\ &= \frac{ik_0}{\omega\mu_0} \int \frac{d^2\kappa}{(2\pi)^2} e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}_p)} \mathbb{G}^{\text{HE}}(\boldsymbol{\kappa}, z, \omega) \end{aligned} \quad (2.2.34)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbb{G}^{\text{HE}}(\boldsymbol{\kappa}, z, \omega) &= \frac{e^{i\gamma_0(z-z_p)}}{2\gamma_0} [\mathbf{a}_s^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_p^+(k_0) - \mathbf{a}_p^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_s^+(k_0)] \\ &\quad + \frac{e^{i\gamma_0(z+z_p)}}{2\gamma_0} [r_p \mathbf{a}_s^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_p^-(k_0) - r_s \mathbf{a}_p^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_s^-(k_0)] \end{aligned} \quad (2.2.35)$$

angeben. Dabei erhält man folgende Matrix für das in unterschiedlichen Varianten in Gleichung (2.2.35) auftretende, gemischte, dyadische Produkt

$$\mathbf{a}_s^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_p^\pm(k_0) = \frac{1}{\kappa^2 k_0} \begin{pmatrix} \mp k_x k_y \gamma_0 & \mp k_y^2 \gamma_0 & k_y \kappa^2 \\ \pm k_x^2 \gamma_0 & \pm k_x k_y \gamma_0 & -k_x \kappa^2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.2.36)$$

2.3 Berechnung der Leistung oberhalb eines dielektrischen Substrats

Um die Leistung des abgestrahlten Feldes zu ermitteln, wird zunächst der Poynting-Vektor berechnet, der die Energie angibt, die pro Zeit durch eine Fläche transportiert wird. Dazu wird das Kreuzprodukt des elektrischen mit dem magnetischen Feld betrachtet. Da die hier betrachteten Felder stochastisch fluktuieren, wird der Mittelwert über ein Ensemble stochastischer Poynting-Vektoren gebildet:

$$\begin{aligned}
\langle S_i^\omega \rangle &= \varepsilon_{ijk} \langle E_j H_k^* \rangle + c.c. \\
&= \mu_0^2 \omega^4 \varepsilon_{ijk} \langle G_{jl}^{EE} \mathbb{D}_{ll}^{-1} p_l^{\text{fl}} G_{km}^{\text{HE}*} \mathbb{D}_{mm}^{-1*} p_m^{\text{fl}*} \rangle + c.c. \\
&= \mu_0^2 \omega^4 \varepsilon_{ijk} G_{jl}^{EE} \mathbb{D}_{ll}^{-1} G_{km}^{\text{HE}*} \mathbb{D}_{mm}^{-1*} \langle p_l^{\text{fl}} p_m^{\text{fl}*} \rangle + c.c.
\end{aligned} \tag{2.3.1}$$

Um den Ausdruck $\langle p_l^{\text{fl}} p_m^{\text{fl}*} \rangle$ zu berechnen, wird das Fluktuations-Dissipations-Theorem (FDT) verwendet [15, 16]. Unter Anwendung des FDT gilt für den Ausdruck

$$\langle p_l^{\text{fl}} p_m^{\text{fl}*} \rangle = p(\omega) \delta_{lm} \tag{2.3.2}$$

mit

$$p(\omega) := \frac{2\varepsilon_0 \text{Im}(\alpha)}{\omega} \Theta(\omega, T) \tag{2.3.3}$$

und

$$\Theta(\omega, T) := \frac{\hbar\omega}{e^{k_B T} - 1}. \tag{2.3.4}$$

Dabei wird davon ausgegangen, dass sich das Nanoteilchen im thermodynamischen Gleichgewicht mit der Temperatur T befindet. Bei k_B handelt es sich um die Boltzmannkonstante und bei \hbar um das reduzierte Planck'sche Wirkungsquantum. Dadurch lässt sich der mittlere, spektrale Poynting-Vektor in Gleichung (2.3.1) weiter ausführen zu

$$\langle S_i^\omega \rangle = \mu_0^2 \omega^4 p(\omega) \varepsilon_{ijk} G_{jl}^{EE} |\mathbb{D}_{ll}|^{-2} G_{lk}^{\text{HE}\dagger} + c.c. \tag{2.3.5}$$

Im Bezug auf die später zum Vergleich herangezogenen Experimente wird nun ein Detektor betrachtet, dessen Fläche idealisiert unendlich groß sei und mit der x-y-Ebene zusammenfalle. Damit liegt er parallel zur Oberfläche. Gesucht ist nun die Leistung, die dieser Detektor messen würde. Dazu wird nur die Komponente des Poynting-Vektors benötigt, die entlang des Normalenvektors der Ebene verläuft, was in diesem Fall der Einheitsvektor

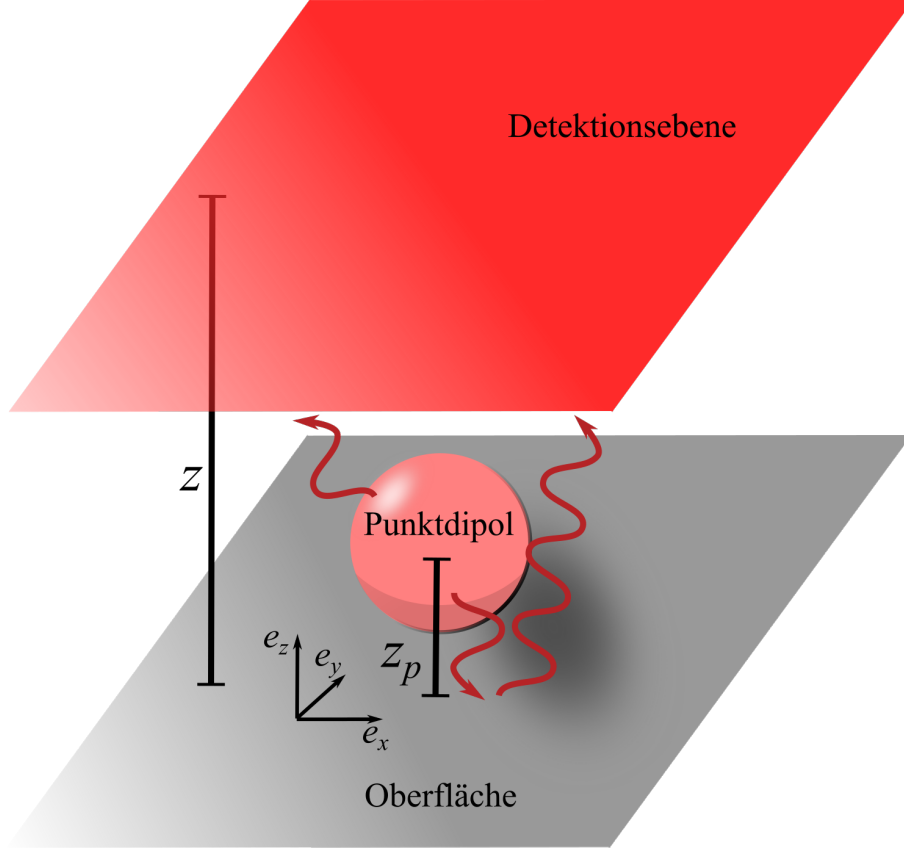


Abbildung 3: Schematische Verdeutlichung zur Detektion der Strahlungsleistung, die der Punktdipol abgibt. Zusätzlich wurden die Strahlengänge eingezeichnet.

in z -Richtung e_z ist. Angewandt auf Gleichung (2.3.5) bedeutet das:

$$\begin{aligned} \langle S_z^\omega \rangle = & \mu_0^2 \omega^4 p(\omega) \left[|d_{xx}|^{-2} \left(\mathbb{G}_{xx}^{\text{EE}} \mathbb{G}_{xy}^{\text{HE}\dagger} - \mathbb{G}_{yx}^{\text{EE}} \mathbb{G}_{xx}^{\text{HE}\dagger} + \mathbb{G}_{xy}^{\text{EE}} \mathbb{G}_{yy}^{\text{HE}\dagger} \right. \right. \\ & \left. \left. - \mathbb{G}_{yy}^{\text{EE}} \mathbb{G}_{yx}^{\text{HE}\dagger} \right) + |d_{zz}|^{-2} \left(\mathbb{G}_{xz}^{\text{EE}} \mathbb{G}_{zy}^{\text{HE}\dagger} - \mathbb{G}_{yz}^{\text{EE}} \mathbb{G}_{zx}^{\text{HE}\dagger} \right) \right] + \text{c.c.} \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

Die Leistung entlang der z -Achse entspricht dem Oberflächenintegral entlang der x - und y -Achse. Für die Berechnungen wird angenommen, dass die indizierten Koordinaten im Ursprung des Koordinatensystems liegen, sodass sich das Nanoteilchen an der Position $r_p = (0, 0, z_p)^t$ befindet. Dadurch erhält man für das Integral über die jeweiligen Komponenten der Green'schen Funktionen

$$\begin{aligned} \int d^2x \mathbb{G}^{\text{EE}} \mathbb{G}^{\text{HE}\dagger} &= \frac{k_0}{\mu_0 \omega} \int d^2x \int \frac{d^2\kappa}{(2\pi)^2} \int \frac{d^2\kappa'}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{x}\cdot(\boldsymbol{\kappa}-\boldsymbol{\kappa}')} \mathbb{G}^{\text{EE}}(\boldsymbol{\kappa}, z, \omega) \mathbb{G}^{\text{HE}\dagger}(\boldsymbol{\kappa}', z, \omega) \\ &= \frac{k_0}{\mu_0 \omega} \int \frac{d^2\kappa}{(2\pi)^2} \int d^2\kappa' \delta(\boldsymbol{\kappa} - \boldsymbol{\kappa}') \mathbb{G}^{\text{EE}}(\boldsymbol{\kappa}, z, \omega) \mathbb{G}^{\text{HE}\dagger}(\boldsymbol{\kappa}', z, \omega) \\ &= \frac{k_0}{4\pi^2 \mu_0 \omega} \int d^2\kappa \mathbb{G}^{\text{EE}}(\boldsymbol{\kappa}, z, \omega) \mathbb{G}^{\text{HE}\dagger}(\boldsymbol{\kappa}, z, \omega). \end{aligned} \quad (2.3.7)$$

Dabei wurde die Definition der 2-dimensionalen Delta-Distribution benutzt:

$$\delta(\boldsymbol{\kappa} - \boldsymbol{\kappa}') = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2x e^{i\mathbf{x}\cdot(\boldsymbol{\kappa}-\boldsymbol{\kappa}')}. \quad (2.3.8)$$

Insgesamt ergibt sich damit für die Leistung

$$P(\omega) = \frac{\mu_0 k_0 \omega^3 p(\omega)}{2\pi^2} [|d_{xx}|^{-2} I_1 + |d_{zz}|^{-2} I_2] + c.c. \quad (2.3.9)$$

mit

$$I_1 = \int d^2\kappa \mathbb{G}_{xx}^{\text{EE}} \mathbb{G}_{xy}^{\text{HE}\dagger} - \int d^2\kappa \mathbb{G}_{xy}^{\text{EE}} \mathbb{G}_{xx}^{\text{HE}\dagger} \quad (2.3.10)$$

und

$$I_2 = \int d^2\kappa \mathbb{G}_{xz}^{\text{EE}} \mathbb{G}_{zy}^{\text{HE}\dagger}. \quad (2.3.11)$$

Hier wurde zusätzlich ausgenutzt, dass die Relationen $\mathbb{G}_{xx}^{\text{EE}} = \mathbb{G}_{yy}^{\text{EE}}$, $\mathbb{G}_{xy}^{\text{EE}} = \mathbb{G}_{yx}^{\text{EE}}$ und $\mathbb{G}_{xx}^{\text{HE}} = -\mathbb{G}_{yy}^{\text{HE}}$, $\mathbb{G}_{xy}^{\text{HE}} = -\mathbb{G}_{yx}^{\text{HE}}$ gelten sowie die Gleichheit der Integrale $\int d^2\kappa \mathbb{G}_{xz}^{\text{EE}} \mathbb{G}_{zy}^{\text{HE}\dagger} = -\int d^2\kappa \mathbb{G}_{yz}^{\text{EE}} \mathbb{G}_{zx}^{\text{HE}\dagger}$. Die Integrale unterschieden sich neben dem Vorzeichen nur in der Verwendung von k_x^2 im Integranden auf der linken Gleichungsseite im Vergleich zu k_y^2 in dem auf der rechten Gleichungsseite. Führt man im Integral eine Koordinatentransformation in Polarkoordinaten durch nach (2.2.17), erkennt man die Gleichheit bis auf ein Vorzeichen. Ausgeschrieben ergeben sich die Integrale

$$\begin{aligned} I_1 = & \int d^2\kappa \frac{e^{-2\text{Im}(\gamma_0)z}}{4k_0\kappa^2\gamma_0} \left[e^{2\text{Im}(\gamma_0)z_p} \left(k_y^2 + k_x^2 \left(1 - \frac{\kappa^2}{k_0^2} \right) \right) \right. \\ & + 2\text{Re} \left(e^{2i\text{Re}(\gamma_0)z_p} \left(r_s k_y^2 - r_p k_x^2 \left(1 - \frac{\kappa^2}{k_0^2} \right) \right) \right) \\ & \left. + e^{-2\text{Im}(\gamma_0)z_p} \left(|r_s|^2 k_y^2 + |r_p|^2 k_x^2 \left(1 - \frac{\kappa^2}{k_0^2} \right) \right) \right] \quad (2.3.12) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} I_2 = & \int d^2\kappa \frac{k_x^2 e^{-2\text{Im}(\gamma_0)z}}{4k_0^3 \gamma_0^*} \left[e^{2\text{Im}(\gamma_0)z_p} + |r_p|^2 e^{-2\text{Im}(\gamma_0)z_p} \right. \\ & \left. + 2\text{Re}(r_p e^{2i\text{Re}(\gamma_0)z_p}) \right]. \quad (2.3.13) \end{aligned}$$

Nach Addition mit dem komplex Konjugierten erhält man den doppelten Realteil. Da in den Integralen aus Gleichung (2.3.12) und (2.3.13) nur noch der Ausdruck $\frac{1}{\gamma_0}$ bzw. $\frac{1}{\gamma_0^*}$ komplex ist, wird er dort durch den Ausdruck $\frac{\text{Re}(\gamma_0)}{|\gamma_0|^2}$ ersetzt. Der Wert von γ_0 kann nur imaginär werden, wenn $\kappa > k_0$ gilt. In diesem Fall gilt aber auch $\text{Re}(\gamma_0) = 0$, sodass die Integrale für $\kappa > k_0$ verschwinden. Dadurch werden die Integrale auf den Bereich

$\kappa = \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \leq k_0$ beschränkt. Dadurch entfallen alle Exponentialterme mit $\text{Im}(\gamma_0)$ im Exponenten. Darum ergibt sich

$$2\text{Re}(I_1) = \int_{\kappa \leq k_0} d^2\kappa \frac{1}{2k_0\kappa^2\gamma_0} \left[k_y^2 (1 + |r_s|^2) + k_x^2 \left(1 - \frac{\kappa^2}{k_0^2}\right) (1 + |r_p|^2) + 2\text{Re} \left(e^{2i\gamma_0 z_p} \left(r_s k_y^2 - r_p k_x^2 \left(1 - \frac{\kappa^2}{k_0^2}\right) \right) \right) \right] \quad (2.3.14)$$

und

$$2\text{Re}(I_2) = \int_{\kappa \leq k_0} d^2\kappa \frac{k_x^2}{2k_0^3\gamma_0} [1 + |r_p|^2 + 2\text{Re}(r_p e^{2i\gamma_0 z_p})]. \quad (2.3.15)$$

Abschließend werden die Polarkoordinaten nach Gleichung (2.2.17) eingeführt. Die Winkelintegrale ergeben $\int_0^{2\pi} d\varphi \cos^2(\varphi) = \int_0^{2\pi} d\varphi \sin^2(\varphi) = \pi$, sodass die Integrale

$$2\text{Re}(I_1) = \frac{\pi}{2k_0} \int_0^{k_0} d\kappa \frac{\kappa}{\gamma_0} \left[2 - \frac{\kappa^2}{k_0^2} + |r_s|^2 + |r_p|^2 \left(1 - \frac{\kappa^2}{k_0^2}\right) + 2\text{Re} \left(e^{2i\gamma_0 z_p} \left(r_s - r_p \left(1 - \frac{\kappa^2}{k_0^2}\right) \right) \right) \right] \quad (2.3.16)$$

und

$$2\text{Re}(I_2) = \frac{\pi}{2k_0^3} \int_0^{k_0} d\kappa \frac{\kappa^3}{\gamma_0} [1 + |r_p|^2 + 2\text{Re}(r_p e^{2i\gamma_0 z_p})] \quad (2.3.17)$$

übrig bleiben. Die Integrale (2.3.16) und (2.3.17) sind z.T. berechenbar, wodurch man

$$2\text{Re}(I_1) = \frac{\pi}{2} \left(\frac{4}{3} + \int_0^{k_0} d\kappa \frac{\kappa}{k_0\gamma_0} \left[|r_s|^2 + |r_p|^2 \left(1 - \frac{\kappa^2}{k_0^2}\right) + 2\text{Re} \left(e^{2i\gamma_0 z_p} \left(r_s - r_p \left(1 - \frac{\kappa^2}{k_0^2}\right) \right) \right) \right] \right) \quad (2.3.18)$$

und

$$2\text{Re}(I_2) = \frac{\pi}{2} \left(\frac{2}{3} + \int_0^{k_0} d\kappa \frac{\kappa^3}{k_0^3\gamma_0} [|r_p|^2 + 2\text{Re}(r_p e^{2i\gamma_0 z_p})] \right) \quad (2.3.19)$$

erhält. Setzt man die Ausdrücke (2.3.18) und (2.3.19) in Gleichung (2.3.9) ein, erhält man für die Leistung

$$P(\omega) = \frac{\mu_0\omega^4 p(\omega)}{4\pi c} \left[|d_{xx}|^{-2} \left(\frac{4}{3} + \int_0^{k_0} d\kappa \frac{\kappa}{k_0\gamma_0} \left[|r_s|^2 + |r_p|^2 \left(1 - \frac{\kappa^2}{k_0^2}\right) + 2\text{Re} \left(e^{2i\gamma_0 z_p} \left(r_s - r_p \left(1 - \frac{\kappa^2}{k_0^2}\right) \right) \right) \right] \right) + |d_{zz}|^{-2} \left(\frac{2}{3} + \int_0^{k_0} d\kappa \frac{\kappa^3}{k_0^3\gamma_0} [|r_p|^2 + 2\text{Re}(r_p e^{2i\gamma_0 z_p})] \right) \right]. \quad (2.3.20)$$

Auffällig ist, dass die spektrale Leistung nicht von der Position des Detektors z abhängt, sondern nur noch vom Abstand z_p zwischen dem Punktdipol und der Oberfläche. Da der Energiefluss durch zwei Flächen mit unterschiedlichem Abstand zum Punktdipol identisch ist aufgrund fehlender Absorption dazwischen, ist dies physikalisch sinnvoll.

Um den rückwirkenden Anteil der Green'schen Funktion nach Gleichung (2.1.12) mitberücksichtigen zu können, wird der Punktdipol durch ein räumlich ausgedehntes Nanoteilchen ersetzt. Für ein räumlich ausgedehntes Nanoteilchen mit einem Radius R – wie bereits angedeutet bei der Definition der Polarisierbarkeit in Gleichung (2.1.10) – muss die Polarisierbarkeit dieser Geometrie angepasst werden zu

$$\alpha_{\text{kor}} = \frac{\alpha}{1 - i \frac{k_0^3}{6\pi} \alpha} \quad (2.3.21)$$

[16, 17, 18]. Durch Gleichung (2.3.21) muss zudem folgende Korrektur vorgenommen werden:

$$\begin{aligned} \text{Im}(\alpha) &\rightarrow \text{Im}(\alpha_{\text{kor}}) - \frac{k_0^3}{6\pi} |\alpha_{\text{kor}}|^2 \\ &= \frac{\text{Im}(\alpha)}{\left|1 - i \frac{k_0^3}{6\pi} \alpha\right|^2}, \end{aligned} \quad (2.3.22)$$

denn

$$\begin{aligned} \text{Im}(\alpha_{\text{kor}}) - \frac{k_0^3}{6\pi} |\alpha_{\text{kor}}|^2 &= \text{Im}\left(\frac{\alpha}{1 - i \frac{k_0^3}{6\pi} \alpha}\right) - \frac{k_0^3}{6\pi} \left|\frac{\alpha}{1 - i \frac{k_0^3}{6\pi} \alpha}\right|^2 \\ &= \frac{\text{Im}\left(\alpha + i \frac{k_0^3}{6\pi} |\alpha|^2\right) - \frac{k_0^3}{6\pi} |\alpha|^2}{\left|1 - i \frac{k_0^3}{6\pi} \alpha\right|^2} \\ &= \frac{\text{Im}(\alpha)}{\left|1 - i \frac{k_0^3}{6\pi} \alpha\right|^2}. \end{aligned} \quad (2.3.23)$$

Diese Korrektur wird erreicht, indem im Nenner der Inversen der Dyade \mathbb{D} aus (2.2.24) und (2.2.25) der Term $-i \frac{k_0^3}{6\pi} \alpha$ aus Gleichung (2.3.23) eingesetzt wird. Dieser zusätzliche Term drückt den rückwirkenden Anteil der Green'schen Funktion $\mathbb{G}^{\text{EE},0}$ aus, der zu Beginn vernachlässigt wurde. Dadurch werden in (2.3.20) die Veränderungen

$$p(\omega) |d_{xx,zz}|^{-2} \rightarrow p(\omega) |\tilde{d}_{xx,zz}|^{-2} \quad (2.3.24)$$

mit

$$\tilde{d}_{xx,zz} = 1 - i \frac{k_0^3}{6\pi} \alpha - k_0^2 \alpha \mathbb{G}_{xx,zz}^{\text{EE,Sc}} \quad (2.3.25)$$

vorgenommen. Man erhält den leicht veränderten Ausdruck für die Leistung

$$\begin{aligned}
P(\omega) = & \frac{\mu_0 \omega^4 p(\omega)}{4\pi c} \left[|\tilde{d}_{xx}|^{-2} \left(\frac{4}{3} + \int_0^{k_0} d\kappa \frac{\kappa}{k_0 \gamma_0} \left[|r_s|^2 + |r_p|^2 \left(1 - \frac{\kappa^2}{k_0^2} \right) \right. \right. \right. \\
& \left. \left. \left. + 2\operatorname{Re} \left(e^{2i\gamma_0 z_p} \left(r_s - r_p \left(1 - \frac{\kappa^2}{k_0^2} \right) \right) \right) \right] \right) \right. \\
& \left. + |\tilde{d}_{zz}|^{-2} \left(\frac{2}{3} + \int_0^{k_0} d\kappa \frac{\kappa^3}{k_0^3 \gamma_0} \left[|r_p|^2 + 2\operatorname{Re} (r_p e^{2i\gamma_0 z_p}) \right] \right) \right]. \quad (2.3.26)
\end{aligned}$$

Ist der Abstand zwischen dem Punktdipol und der Oberfläche sehr groß, lässt sich der Ausdruck mit der Methode der stationären Phase nähern. Sie wird benutzt zur Näherung der z_p -abhängigen Integrale aus Gleichung (2.3.14) und (2.3.15)

$$2\operatorname{Re} (I_a) = \operatorname{Re} \int_{\kappa \leq k_0} d^2 \kappa \frac{1}{k_0 \kappa^2 \gamma_0} \left(r_s k_y^2 - r_p k_x^2 \left(1 - \frac{\kappa^2}{k_0^2} \right) \right) e^{2i\gamma_0 z_p} \quad (2.3.27)$$

und

$$2\operatorname{Re} (I_b) = \operatorname{Re} \int_{\kappa \leq k_0} d^2 \kappa \frac{k_x^2}{k_0^3 \gamma_0} r_p e^{2i\gamma_0 z_p}. \quad (2.3.28)$$

Ein Integral der Form $I(\omega, z_p) = \int d^2 \kappa g(\omega, k_x, k_y) e^{i z_p f(\omega, k_x, k_y)}$ kann demnach genähert werden durch [19]

$$I(\omega, z_p) \approx \frac{2\pi}{z_p} g(\omega, k_{x0}, k_{y0}) |\det A|^{-\frac{1}{2}} e^{i(z_p f(\omega, k_{x0}, k_{y0}) + \frac{\pi}{4} \sigma)}. \quad (2.3.29)$$

Dabei stellen die Koordinaten k_{x0} und k_{y0} die stationären Punkte dar, für die $\nabla f = (0, 0)^t$ gilt. Hier ist das gerade der Punkt $\boldsymbol{\kappa}_0 = (0, 0)^t$. Die Matrix A ist die Hesse-Matrix $\left(\frac{\partial^2 f}{\partial k_{x_i} \partial k_{x_j}} \right) \Big|_{\boldsymbol{\kappa}=\boldsymbol{\kappa}_0}$. Hier ist dies gerade die Diagonalmatrix $A = -\frac{2}{k_0} \mathbb{1}$. Die Variable σ bezeichnet die Differenz aus der Anzahl der positiven und negativen Eigenwerte von A , sodass hier $\sigma = -1$ gilt. Da in Gleichung (2.3.28) im Zähler des Integrals die Variable k_x steht, verschwindet dieses Integral nach Gleichung (2.3.29) innerhalb dieser Näherung. Dadurch erhält man die genäherten Ausdrücke für das Fernfeld:

$$2\operatorname{Re} (I_a) = \frac{\pi}{k_0 z_p} \operatorname{Re} \left(\frac{1 - \sqrt{\varepsilon(\omega)}}{1 + \sqrt{\varepsilon(\omega)}} e^{i(2k_0 z_p - \frac{\pi}{4})} \right) \quad (2.3.30)$$

und

$$2\operatorname{Re} (I_b) = 0. \quad (2.3.31)$$

Dabei sind auch die Einträge der Dyade \mathbb{D} verändert: Dort kann man den Bereich $\kappa \geq k_0$

vernachlässigen, da dort die komplexe Exponentialfunktion zur einer abklingenden wird, die für große Abstände z_p verschwindet. Deshalb gilt

$$\tilde{d}_{xx}^{-1} = \frac{1}{1 - i\frac{k_0^3}{6\pi}\alpha - i\frac{k_0^2\alpha}{8\pi z_p} \frac{1 - \sqrt{\varepsilon(\omega)}}{1 + \sqrt{\varepsilon(\omega)}} e^{i(2z_p k_0 - \frac{\pi}{4})}}, \quad (2.3.32)$$

$$\tilde{d}_{zz}^{-1} = \frac{1}{1 - i\frac{k_0^3}{6\pi}\alpha}. \quad (2.3.33)$$

Setzt man diese Näherungen in Gleichung (2.3.20) für die oszillierenden Integrale ein, erhält man im Fernfeld die Leistung

$$P(\omega) = \frac{\mu_0\omega^4 p(\omega)}{4\pi c} \left[|\tilde{d}_{xx}|^{-2} \left(\frac{4}{3} + \frac{2}{k_0^2 z_p} \operatorname{Re} \left(\frac{1 - \sqrt{\varepsilon(\omega)}}{1 + \sqrt{\varepsilon(\omega)}} e^{i(2k_0 z_p - \frac{\pi}{4})} \right) + \int_0^{k_0} d\kappa \frac{\kappa}{k_0 \gamma_0} \right. \right. \\ \left. \left. \left[|r_s|^2 + |r_p|^2 \left(1 - \frac{\kappa^2}{k_0^2} \right) \right] \right) + |\tilde{d}_{zz}|^{-2} \left(\frac{2}{3} + \int_0^{k_0} d\kappa \frac{\kappa^3}{k_0^3 \gamma_0} |r_p|^2 \right) \right]. \quad (2.3.34)$$

Im Falle einer unendlich weit entfernten Oberfläche vom Nanoteilchen erhält man sogar

$$P(\omega) \xrightarrow{z_p \rightarrow \infty} \frac{\mu_0\omega^4 p(\omega)}{4\pi c \left| 1 - i\frac{k_0^3}{6\pi}\alpha \right|^2} \left[2 + \int_0^{k_0} d\kappa \frac{\kappa}{k_0 \gamma_0} (|r_s|^2 + |r_p|^2) \right]. \quad (2.3.35)$$

Zur Überprüfung der Plausibilität der Gleichung (2.3.26) wird für zwei Spezialfälle das jeweilige Ergebnis mit einer bereits existierenden Lösung verglichen [20, 21]. Diese bezieht sich auf die spektrale Leistung, die ein Nanoteilchen im Vakuum abstrahlt. Dort wurde die Korrektur aus (2.3.23) nicht verwendet, sondern die unveränderte Polarisierbarkeit α . Unter Berücksichtigung der Korrektur gilt für die Leistung eines Nanoteilchens im Vakuum

$$P_{vac}(\omega) = \frac{\mu_0\omega^4 p(\omega)}{\pi c \left| 1 - i\frac{k_0^3}{6\pi}\alpha \right|^2}. \quad (2.3.36)$$

Für den Fall, dass keine Reflexion auftritt, also $|r_s|^2 = |r_p|^2 = 0$ gilt, sollte sich die Leistung aus (2.3.20) gerade auf die halbe Leistung aus (2.3.36) zurückführen lassen, da so nur die Abstrahlung in den Halbraum $z \geq z_p$ berücksichtigt wird. In Gleichung (2.3.36) ist jedoch die ganze Abstrahlung enthalten. Für diesen Spezialfall keiner Reflexion fallen die noch nicht ausgerechneten Integrale weg, sodass sich

$$P(\omega) = \frac{\mu_0\omega^4 p(\omega)}{2\pi c \left| 1 - i\frac{k_0^3}{6\pi}\alpha \right|^2} \\ = \frac{1}{2} P_{vac}(\omega) \quad (2.3.37)$$

ergibt. Man erhält aus Gleichung (2.3.20) für den Spezialfall keiner Reflexion also tatsächlich die halbe Leistung eines Punktdipols im Vakuum ohne Oberfläche in der Nähe aus Gleichung (2.3.36).

Für den Fall, dass das Material das Licht komplett reflektiert, sodass $|r_s|^2 = |r_p|^2 = 1$ gilt, sollte sich dagegen gerade die Leistung aus (2.3.36) wieder einstellen, da nun die gesamte Strahlung zum Detektor gelangt. Um Abschattungseffekte wie durch die Abschirmung des Nanoteilchens oder Dissipation im Medium nahe der Oberfläche zu vermeiden, wird eine große Entfernung zwischen Nanoteilchen und Oberfläche angenommen. Daher genügt es, Gleichung (2.3.35) zu betrachten:

$$\begin{aligned}
P(\omega) &= \frac{\mu_0 \omega^4 p(\omega)}{2\pi c \left| 1 - i \frac{k_0^3}{6\pi} \alpha \right|^2} \left[1 + \int_0^{k_0} d\kappa \frac{\kappa}{k_0 \gamma_0} \right] \\
&= \frac{\mu_0 \omega^4 p(\omega)}{\pi c \left| 1 - i \frac{k_0^3}{6\pi} \alpha \right|^2} \\
&= P_{vac}
\end{aligned} \tag{2.3.38}$$

Man erhält aus der Leistung aus (2.3.20) also wieder die Leistung eines Punktdipols im Vakuum nach (2.3.36). Damit lassen sich bereits bekannte Ergebnisse aus der errechneten Leistung reproduzieren. Anhand von Näherung (2.3.35), wobei dort die Korrektur der Polarisierbarkeit hinzukommt, erkennt man, dass für $z_p \rightarrow \infty$ die Leistung gerade zwischen den beiden betrachteten Fällen ohne bzw. mit kompletter Reflexion liegt.

Um aus der spektralen Leistung $P(\omega)$ die zeitabhängige Leistung $P(t)$ zu erhalten, muss eine Fourierreücktransformation durchgeführt werden. Durch die Stationarität des Fluktuations-Dissipations-Theorems gilt die Proportionalität $\langle (\mathbf{E} \times \mathbf{H})_i \rangle \propto \delta(\omega + \omega')$, sodass man für die Rücktransformation

$$\begin{aligned}
P(t) &= \varepsilon_{zjk} \int dx dy \left\langle \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} E_j(\mathbf{r}, \omega) e^{i\omega t} \int_0^\infty \frac{d\omega'}{2\pi} H_k^*(\mathbf{r}, \omega') e^{i\omega' t} \right\rangle + c.c. \\
&= \varepsilon_{zjk} \int dx dy \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \langle E_j(\mathbf{r}, \omega) H_k^*(\mathbf{r}, -\omega) \rangle + c.c. \\
&= \int dx dy \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \langle S_z^\omega \rangle = \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} P(\omega)
\end{aligned} \tag{2.3.39}$$

erhält. Die mittlere Leistung ist also konstant bzgl. der Zeit und man erhält sie aus der Integration der spektralen Leistung $P(\omega)$ aus Gleichung (2.3.26).

2.4 Berechnung der lokalen Zustandsdichte

Zum Vergleich der hier erarbeiteten Theorie zur Wärmeabstrahlung eines Nanoteilchens oberhalb eines dielektrischen Substrats mit anderen, bereits vorhandenen Theorien wird die lokale Zustandsdichte herangezogen. Diese wird definiert durch

$$D(\mathbf{r}, \omega) = \frac{\mu_0 \omega}{\pi} \left[\varepsilon_0 \text{Im} \left(\text{Tr} \mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega) \right) + \mu_0 \text{Im} \left(\text{Tr} \mathbb{G}^{\text{HH}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega) \right) \right]. \quad (2.4.1)$$

Zur Berechnung der Zustandsdichte wird also zusätzlich die Green'sche Funktion \mathbb{G}^{HH} benötigt, die man über die Relation

$$\mathbb{G}^{\text{HH}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega) = \frac{1}{\mu_0^2 \omega^2} \nabla \times \mathbb{G}^{\text{EE}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega) \times \nabla_p \quad (2.4.2)$$

erhält [22]. Man beachte, dass die mit p indizierte Rotation nach links angewandt wird. Angewandt auf Gleichung (2.2.11) erhält man daher unter Ausnutzung der Regel (2.2.29) und Ausrechnen des Gradienten nach Gleichung (2.2.31)

$$\begin{aligned} \mathbb{G}^{\text{HH}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega) &= -\frac{1}{\mu_0^2 \omega^2} \int \frac{d^2 \kappa}{(2\pi)^2} \left(\mathbf{k}_+ \times [\mathbf{a}_s^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_s^+(k_0) + \mathbf{a}_p^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_p^+(k_0)] \right. \\ &\quad \times \nabla_p e^{i\boldsymbol{\kappa} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p)} \frac{e^{i\gamma_0(z-z_p)}}{2\gamma_0} + \mathbf{k}_+ \times [\mathbf{r}_s \mathbf{a}_s^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_s^-(k_0) \\ &\quad \left. + \mathbf{r}_p \mathbf{a}_p^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_p^-(k_0)] \times \nabla_p e^{i\boldsymbol{\kappa} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p)} \frac{e^{i\gamma_0(z+z_p)}}{2\gamma_0} \right). \end{aligned} \quad (2.4.3)$$

Zusätzlich wurde hier schon die zweite Rotation umgedreht und angewandt nach Regel (2.2.29). Der indizierte Gradient berechnet sich zu

$$\nabla_p \frac{e^{i\boldsymbol{\kappa} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p)} e^{i\gamma_0(z \pm z_p)}}{\gamma_0} = -\frac{i e^{i\boldsymbol{\kappa} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p)} e^{i\gamma_0(z \pm z_p)}}{\gamma_0} \mathbf{k}_\mp. \quad (2.4.4)$$

Setzt man dies für den indizierten Gradienten aus Gleichung (2.4.3) ein, erhält man

$$\begin{aligned} \mathbb{G}^{\text{HH}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega) &= \frac{-i}{\mu_0^2 \omega^2} \int \frac{d^2 \kappa}{(2\pi)^2} e^{i\boldsymbol{\kappa} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p)} \left(\frac{e^{i\gamma_0(z-z_p)}}{2\gamma_0} \left[(\mathbf{k}_+ \times \mathbf{a}_s^+(k_0)) \otimes (\mathbf{a}_s^+(k_0) \times \mathbf{k}_+) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (\mathbf{k}_+ \times \mathbf{a}_p^+(k_0)) \otimes (\mathbf{a}_p^+(k_0) \times \mathbf{k}_+) \right] + \frac{e^{i\gamma_0(z+z_p)}}{2\gamma_0} \left[\mathbf{r}_s (\mathbf{k}_+ \times \mathbf{a}_s^+(k_0)) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \otimes (\mathbf{a}_s^-(k_0) \times \mathbf{k}_-) + \mathbf{r}_p (\mathbf{k}_+ \times \mathbf{a}_p^+(k_0)) \otimes (\mathbf{a}_p^-(k_0) \times \mathbf{k}_-) \right] \right). \end{aligned} \quad (2.4.5)$$

Neben den Kreuzprodukten aus (2.2.32) und (2.2.33) werden hier noch die Kreuzprodukte

$$\mathbf{k}_\pm \times \mathbf{a}_s^\pm(k_0) = -k_0 \mathbf{a}_p^\pm(k_0) \quad (2.4.6)$$

und

$$\mathbf{k}_\pm \times \mathbf{a}_p^\pm(k_0) = k_0 \mathbf{a}_s^\pm(k_0) \quad (2.4.7)$$

benötigt. Eingesetzt in Gleichung (2.4.5) erhält man die Green'sche Funktion

$$\mathbb{G}^{\text{HH}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_p, \omega) = \frac{ik_0^2}{\mu_0^2 \omega^2} \int \frac{d^2 \kappa}{(2\pi)^2} e^{i\kappa \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p)} \mathbb{G}^{\text{HH}}(\boldsymbol{\kappa}, z, \omega) \quad (2.4.8)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbb{G}^{\text{HH}}(\boldsymbol{\kappa}, z, \omega) &= \frac{e^{i\gamma_0(z-z_p)}}{2\gamma_0} [\mathbf{a}_p^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_p^+(k_0) + \mathbf{a}_s^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_s^+(k_0)] \\ &+ \frac{e^{i\gamma_0(z+z_p)}}{2\gamma_0} [r_s \mathbf{a}_p^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_p^-(k_0) + r_p \mathbf{a}_s^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_s^-(k_0)]. \end{aligned} \quad (2.4.9)$$

Jetzt kann die Zustandsdichte nach (2.4.1) ausgerechnet werden. Man erhält

$$\begin{aligned} D(z, \omega) &= \frac{\mu_0 \omega}{\pi} \left(\varepsilon_0 \text{Im} \left(i \int \frac{d^2 \kappa}{(2\pi)^2} \text{Tr} \mathbb{G}^{\text{EE}}(\boldsymbol{\kappa}, z, \omega) \right) \right. \\ &\quad \left. + \mu_0 \text{Im} \left(-\frac{ik_0^2}{\mu_0^2 \omega^2} \int \frac{d^2 \kappa}{(2\pi)^2} \text{Tr} \mathbb{G}^{\text{HH}}(\boldsymbol{\kappa}, z, \omega) \right) \right) \\ &= \frac{\omega}{\pi c^2} \int \frac{d^2 \kappa}{(2\pi)^2} \text{Im} \left(\frac{i}{\gamma_0} \left[\text{Tr} (\mathbf{a}_s^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_s^+(k_0) + \mathbf{a}_p^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_p^+(k_0)) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{e^{2i\gamma_0 z} (r_s + r_p)}{2} \text{Tr} (\mathbf{a}_s^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_s^-(k_0) + \mathbf{a}_p^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_p^-(k_0)) \right] \right). \end{aligned} \quad (2.4.10)$$

Die Spur einer Matrix, die aus dem dyadischen Produkt zweier Vektoren gebildet wird, ist gerade das Skalarprodukt dieser Vektoren. Daher lässt sich leicht zeigen, dass

$$\begin{aligned} \text{Tr} (\mathbf{a}_s^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_s^\pm(k_0) + \mathbf{a}_p^+(k_0) \otimes \mathbf{a}_p^\pm(k_0)) &= \mathbf{a}_s^+(k_0) \cdot \mathbf{a}_s^\pm(k_0) + \mathbf{a}_p^+(k_0) \cdot \mathbf{a}_p^\pm(k_0) \\ &= \frac{1}{\kappa^2} \left(k_x^2 + k_y^2 \pm \frac{k_x^2 \gamma_0^2 + k_y^2 \gamma_0^2 \pm \kappa^4}{k_0^2} \right) \\ &= 1 \pm \frac{\gamma_0^2 \pm \kappa^2}{k_0^2} \\ &= \begin{cases} 2 & \text{für } \mathbf{a}_p^+ \\ 2 \frac{\kappa^2}{k_0^2} & \text{für } \mathbf{a}_p^- \end{cases}, \end{aligned} \quad (2.4.11)$$

wobei hier die Definitionen aus (2.2.8) bis (2.2.4) verwendet wurden. Dies wird nun in Gleichung (2.4.10) eingesetzt, wobei erneut Polarkoordinaten eingeführt wurden und das

Winkelintegral schon ausgeführt wurde. Es ergibt sich

$$\begin{aligned}
D(z, \omega) &= \frac{\omega}{2\pi^2 c^2} \int_0^\infty d\kappa \kappa \left[2\text{Im} \left(\frac{i}{\gamma_0} \right) + \frac{\kappa^2}{k_0^2} \text{Im} \left(\frac{i}{\gamma_0} e^{2i\gamma_0 z} (r_s + r_p) \right) \right] \\
&= \frac{\omega}{\pi^2 c^2} \int_0^\infty d\kappa \kappa \text{Re} \left(\frac{1}{\gamma_0} \right) + \frac{\omega}{2\pi^2 c^2} \int_0^{k_0} d\kappa \frac{\kappa^3}{k_0^2} \text{Re} \left(\frac{1}{\gamma_0} e^{2i\gamma_0 z} (r_s + r_p) \right) \\
&\quad + \frac{\omega}{2\pi^2 c^2} \int_{k_0}^\infty d\kappa \frac{\kappa^3}{k_0^2 \tilde{\gamma}_0} e^{-2\tilde{\gamma}_0 z} \text{Im} (r_s + r_p) \tag{2.4.12}
\end{aligned}$$

mit $\gamma_0 = i\tilde{\gamma}_0$. Da γ_0 nur im Bereich $\kappa \leq k_0$ reell ist, liefert das erste Integral nur bis zur oberen Grenze k_0 einen Beitrag. Ebenso lässt sich im zweiten Integral argumentieren, das sowieso nur bis k_0 geht, weshalb dort γ_0 eine reelle Zahl ist und aus dem Imaginärteil herausgezogen werden darf. Somit ergibt sich:

$$\begin{aligned}
D(z, \omega) &= \frac{\omega}{\pi^2 c^2} \int_0^{k_0} d\kappa \frac{\kappa}{\gamma_0} \left[1 + \frac{\kappa^2}{2k_0^2} \text{Re} (e^{2i\gamma_0 z} (r_s + r_p)) \right] \\
&\quad + \frac{\omega}{2\pi^2 c^2} \int_{k_0}^\infty d\kappa \frac{\kappa^3}{k_0^2 \tilde{\gamma}_0} e^{-2\tilde{\gamma}_0 z} \text{Im} (r_s + r_p) \\
&= D_{pr}(z, \omega) + D_{ev}(z, \omega). \tag{2.4.13}
\end{aligned}$$

Die Unterteilung der lokalen Zustandsdichte in einen propagierenden Anteil $D_{pr}(z, \omega)$ und einen evaneszenten Anteil $D_{ev}(z, \omega)$ lässt sich gut anhand der Exponentialterme in den Integralen nachvollziehen. Im ersten Integral wird der Realteil einer komplexen Exponentialfunktion gebildet, weshalb dieser Term eine ebene Welle in positive z -Richtung ausdrückt. Das zweite Integral enthält dagegen eine abklingende Exponentialfunktion, wie man sie von evaneszenten Wellen kennt. Im Fernfeld, wo $z \gg \frac{2\pi}{k_0}$ gilt, wird der propagierende Anteil der lokalen Zustandsdichte überwiegen, da der evaneszente Anteil durch die abklingende Exponentialfunktion immer kleiner wird. Daher gilt im Fernfeld $D_{pr} \gg D_{ev}$. Im Grenzfall $z \rightarrow \infty$ wird sogar $D_{ev}(z, \omega) = 0$ gelten. Das Integral über den Realteil der komplexen Exponentialfunktion und der Summe der Fresnel'schen Amplitudenreflexionskoeffizienten wird für eine sehr schnelle Schwingung ebenfalls verschwinden. Dieses Ergebnis erhält man über Anwendung der Methode der stationären Phase aus Gleichung (2.3.29) für das Integral $\frac{1}{4\pi^3 \omega} \text{Re} \left(\int d^2 \kappa \frac{\kappa^2}{\gamma_0} e^{2i\gamma_0 z} (r_s + r_p) \right)$, das durch das κ^2 im Integral demnach verschwindet. Damit bliebe in diesem Fall nur noch übrig:

$$\begin{aligned}
D_{\text{fern}}(\omega) &\xrightarrow{z_p \rightarrow \infty} \frac{\omega}{\pi^2 c^2} \int_0^{k_0} d\kappa \frac{\kappa}{\gamma_0} \\
&= \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}. \tag{2.4.14}
\end{aligned}$$

Dieses Ergebnis lässt sich reproduzieren, wenn in Gleichung (2.4.13) die Fresnel'schen Amplitudenreflexionskoeffizienten jeweils auf 0 gesetzt werden. Daher beschreibt (2.4.14) die lokale Zustandsdichte im Vakuum ohne eine Oberfläche in der Nähe. Sie stimmt zudem mit dem bekannten Ausdruck für die Zustandsdichte eines idealen Photonengases überein. Dies ist sinnvoll, da für große Abstände der Punktdipol die Oberfläche nicht mehr wahrnimmt. Zudem ist sie gegenüber dem Abstand z konstant und verändert sich nur mit der Frequenz ω .

Für den entgegengesetzten Fall $z_p \rightarrow 0$ lässt sich annehmen, dass die Endlichkeit der Lichtgeschwindigkeit keine Rolle spielt, weshalb man die Näherung $c \rightarrow \infty$ betrachtet. Daraus folgt direkt, dass auch $k_0 \rightarrow 0$ gilt, da dort die Lichtgeschwindigkeit im Nenner steht. In Gleichung (2.4.13) befindet sich in den Integralgrenzen jeweils ein k_0 . Daher wird der Bereich, über den man integriert, um $D_{pr}(z, \omega)$ zu erhalten, immer geringer, weil k_0 dort die obere Grenze darstellt. Im Grenzfall $c \rightarrow \infty$ verschwindet es sogar, da nur noch über einen Punkt integriert wird. Umgekehrt wird der Bereich, über den man integriert, um $D_{ev}(z, \omega)$ zu erhalten, immer größer, da dort k_0 die untere Grenze darstellt. Daher gilt im Nahfeld immer $D_{ev} \gg D_{pr}$. Für die Näherung im Nahfeld genügt es also, wenn man sich auf eine Näherung des evaneszenten Anteils der lokalen Zustandsdichte beschränkt und $D(z, \omega) \approx D_{ev}(z, \omega)$ festlegt. Innerhalb dieser Näherung kann man die Fresnel'schen Amplitudenreflexionskoeffizienten umschreiben:

$$\begin{aligned}
r_s + r_p &= \frac{\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - \kappa^2} - \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\omega) - \kappa^2}}{\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - \kappa^2} + \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\omega) - \kappa^2}} + \frac{\varepsilon(\omega) \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - \kappa^2} - \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\omega) - \kappa^2}}{\varepsilon(\omega) \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - \kappa^2} + \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\omega) - \kappa^2}} \\
&\xrightarrow{c \rightarrow \infty} \frac{i\kappa - i\kappa}{i\kappa + i\kappa} + \frac{\varepsilon(\omega) i\kappa - i\kappa}{\varepsilon(\omega) i\kappa + i\kappa} = \frac{|\varepsilon(\omega)|^2 - 1}{|\varepsilon(\omega) + 1|^2} + 2i \frac{\text{Im}(\varepsilon(\omega))}{|\varepsilon(\omega) + 1|^2}. \quad (2.4.15)
\end{aligned}$$

Dadurch lässt sich auch die lokale Zustandsdichte einfacher berechnen, da die Fresnel'schen Amplitudenreflexionskoeffizienten nun unabhängig von κ sind. Gleichung (2.4.13) lässt sich somit vereinfachen zu:

$$\begin{aligned}
D(z, \omega) &\approx \frac{1}{\pi^2 \omega} \frac{\text{Im}(\varepsilon(\omega))}{|\varepsilon(\omega) + 1|^2} \int_{k_0}^{\infty} d\kappa \frac{\kappa^3}{\tilde{\gamma}_0} e^{-2\tilde{\gamma}_0 z} \\
&= \frac{1}{8\pi^2 \omega z^3} \frac{\text{Im}(\varepsilon(\omega))}{|\varepsilon(\omega) + 1|^2} [4k_0^2 z^2 \Gamma(1) + \Gamma(3)] \\
&= \frac{1}{4\pi^2 \omega z^3} \frac{\text{Im}(\varepsilon(\omega))}{|\varepsilon(\omega) + 1|^2} [2k_0^2 z^2 + 1]. \quad (2.4.16)
\end{aligned}$$

Da sowohl $k_0 \rightarrow 0$ als auch $z \rightarrow 0$ geht, ist die Vernachlässigung des Terms $2k_0^2 z^2$ gerecht-

fertigt. In Gleichung (2.4.16) erhält man also

$$D(z, \omega) \approx \frac{1}{4\pi^2 \omega z^3} \frac{\text{Im}(\varepsilon(\omega))}{|\varepsilon(\omega) + 1|^2}. \quad (2.4.17)$$

Der evaneszente Anteil bestimmt nahe an der Oberfläche also durch eine Proportionalität zu $\frac{1}{z^3}$ die lokalen Zustandsdichte. Sowohl die Näherung als auch der exakte Wert stimmen mit denen überein, die allgemein in der Literatur verwendet werden [5, 6, 23].

3 Numerische Berechnungen

Im Folgenden werden als Beispielmateriale für ein dielektrisches Substrat Siliziumcarbid (SiC) und für das Nanoteilchen Silizium (Si) verwendet, das die Strahlung emittiert. Bevor erste Ergebnisse auf Grundlage der zuvor angestellten theoretischen Überlegungen angegeben werden können, müssen die Permittivitäten dieser Materialien bestimmt werden, da die von SiC in den Fresnel'schen Amplitudenreflexionskoeffizienten und die von Si in der Polarisierbarkeit vorkommt. Dabei werden einige Eigenschaften dieser Materialien diskutiert, die Einfluss auf die Leistung und Zustandsdichte haben werden. Zur Berechnung der Permittivität wird das Lorentz-Oszillator-Modell verwendet. Anschließend werden die numerischen Berechnungen zur Leistung vorgestellt.

3.1 Siliziumcarbid und Silizium

Anregungen in SiC lassen sich in guter Näherung mit einem Lorentz-Oszillator-Modell beschreiben. In diesem Modell wird angenommen, dass man ein polarisierbares Medium durch identische, isotrope und unabhängige harmonische Oszillatoren beschreiben kann [24, 25]. Ein äußeres, elektrisches Feld treibt die harmonischen Oszillatoren an, wobei ihre Schwingung gedämpft wird, was der phänomenologische Dämpfungsfaktor γ ausdrückt. Er beschreibt die Dissipation im Medium. Dadurch erhält man die Differentialgleichung

$$\ddot{\mathbf{r}}(t) + \gamma \dot{\mathbf{r}}(t) + \omega_0^2 \mathbf{r}(t) = \frac{e}{m} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \quad (3.1.1)$$

mit der Ladung e , Masse m und Eigenfrequenz ω_0 eines Oszillators. Für N gleiche Oszillatoren pro Einheitsvolumen mit dem Dipolmoment $\mathbf{p} = e\mathbf{r}$ erhält man die Polarisation

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = N e \mathbf{r}(t). \quad (3.1.2)$$

Drückt man die Ortsvektoren nach Gleichung (3.1.2) durch die Polarisation aus und führt eine Fouriertransformation der Differentialgleichung in den Frequenzraum durch, erhält man die neue Gleichung

$$\begin{aligned} -\omega^2 \mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) - i\omega\gamma \mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) + \omega_0^2 \mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) &= \frac{N e^2}{m} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \\ \Leftrightarrow \mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) &= \varepsilon_0 \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega), \end{aligned} \quad (3.1.3)$$

wobei die Frequenz $\omega_p^2 := \frac{Ne^2}{\varepsilon_0 m}$ eingeführt wurde. Die gesuchte Permittivität erhält man im Falle eines isotropen Mediums durch einen Vergleich mit Gleichung (3.1.3), denn gleichzeitig muss

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, \omega) = \varepsilon_0 [\varepsilon(\omega) - 1] \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \quad (3.1.4)$$

gelten. Dadurch lässt sich sofort die gesuchte Permittivität ablesen:

$$\varepsilon(\omega) = \frac{\omega_p^2 + \omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma}. \quad (3.1.5)$$

Ein Ionenkristall wie SiC mit zwei Atomen pro Einheitszelle kann nur von einem elektrischen Feld polarisiert werden, das im Infrarotbereich schwingt, da nur so die longitudinal und transversal optischen Phononen angeregt und die Dispersionsrelationen erfüllt werden. Weil nur gegenphasig schwingende optische Phononen durch Licht angeregt werden können, lässt sich $\omega_{TO} := \omega_0$ festlegen – die Frequenz der transversal optischen Phononen entspricht also der Resonanzfrequenz des Lorentz-Oszillator-Systems. Zusätzlich wird die Frequenz der longitudinal optischen Phononen identifiziert mit $\omega_{LO} := \sqrt{\omega_0^2 + \omega_p^2}$. Durch diese Definition wird festgelegt, dass immer $\omega_{LO}^2 > \omega_{TO}^2$ gilt. Damit ergibt sich für das Lorentz-Modell die Permittivität

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty \frac{\omega_{LO}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma}{\omega_{TO}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma} \quad (3.1.6)$$

mit dem zusätzlichen Parameter ε_∞ , um Beiträge fernab der Resonanzfrequenz zu berücksichtigen [16]. Für SiC sind diese Lorentz-Parameter bekannt:

Variable	Wert von SiC
ε_∞	6,9
ω_{LO} bzw. ν_{LO}	$1,827 \cdot 10^{14} \frac{\text{rad}}{\text{s}}$ bzw. 970 cm^{-1}
ω_{TO} bzw. ν_{TO}	$1,495 \cdot 10^{14} \frac{\text{rad}}{\text{s}}$ bzw. 794 cm^{-1}
γ	$0,9 \cdot 10^{12} \frac{\text{rad}}{\text{s}}$

Tabelle 1: Werte der Variablen aus Gleichung (3.1.6) für SiC nach [26].

In Abbildung 4 werden der Real- und Imaginärteil aus Gleichung (3.1.6) mit den Werten aus Tabelle 1 dargestellt. Aufgeteilt in Real- und Imaginärteil erhält man:

$$\text{Re}(\varepsilon(\omega)) = \varepsilon_\infty \frac{(\omega_{LO}^2 - \omega^2)(\omega_{TO}^2 - \omega^2) + \omega^2\gamma^2}{(\omega_{TO}^2 - \omega^2)^2 + \omega^2\gamma^2}, \quad (3.1.7)$$

$$\text{Im}(\varepsilon(\omega)) = \varepsilon_\infty \omega \gamma \frac{\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2}{(\omega_{TO}^2 - \omega^2)^2 + \omega^2\gamma^2}. \quad (3.1.8)$$

Zur Bestimmung der Nullstellen wird die Näherung $\frac{\gamma}{\omega_{LO,TO}} \ll 1$ verwendet, da γ mehr

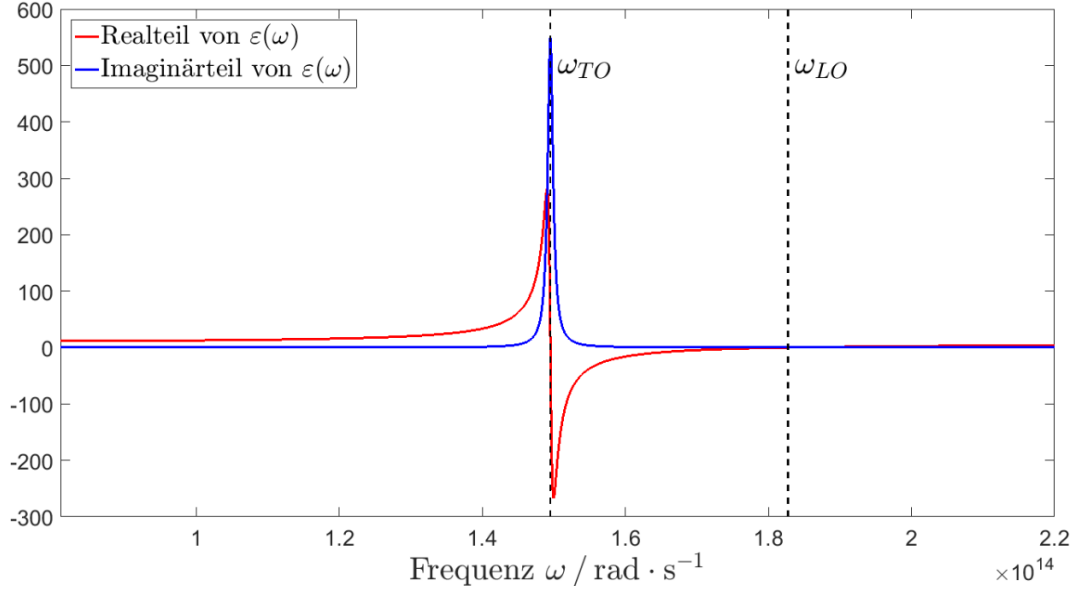


Abbildung 4: Real- und Imaginärteil der Permittivität $\varepsilon(\omega)$ von SiC aufgetragen über die Frequenz ω . Die gestrichelten Linien markieren die Frequenzen der longitudinal und transversal optischen Phononen ω_{LO} bzw. ω_{TO} .

als zwei Größenordnungen kleiner ist als die Frequenzen der optischen Phononen. Dann kann man die Nullstellen direkt aus Gleichung (3.1.7) ablesen unter Ausschluss negativer Frequenzen. Sie liegen bei $\omega \approx \omega_{LO}$ und $\omega \approx \omega_{TO}$, was man auch in Abbildung 4 nachverfolgen kann. Ebenso liegt bei $\omega = \omega_{TO}$ ein Maximum im Imaginärteil vor nach Gleichung (3.1.8), da der Nenner bei dieser Frequenz verschwindet. Außerdem erkennt man, dass der Realteil der Permittivität im Frequenzbereich zwischen den beiden Nullstellen gerade negativ wird und ansonsten positiv ist. Diesen Bereich negativer Permittivität bezeichnet man auch als Reststrahlenband. Um $\omega \approx \omega_{TO}$ besitzen Real- und Imaginärteil zusätzlich ein Maximum, da dort der Nenner unter Vernachlässigung der Dissipation eine Nullstelle besitzt.

Bei der Betrachtung der Reflexionskoeffizienten wird der Imaginärteil vernachlässigt, was gerechtfertigt ist, solange man sich nicht im Bereich um $\omega \approx \omega_{TO}$ befindet. Dann erkennt man, dass im Reststrahlenband sowohl r_s als auch r_p immer die Bedingung für eine vollständige Reflexion erfüllen, solange die Bedingung $\kappa \leq k_0$ erfüllt ist, da gilt:

$$|r_s|^2 = \frac{|\sqrt{k_0^2 - \kappa^2} - i\sqrt{k_0^2}|\varepsilon(\omega)| + \kappa^2|^2}{|\sqrt{k_0^2 - \kappa^2} + i\sqrt{k_0^2}|\varepsilon(\omega)| + \kappa^2|^2} = 1, \quad (3.1.9)$$

$$|r_p|^2 = \frac{|\varepsilon(\omega)|\sqrt{k_0^2 - \kappa^2} + i\sqrt{k_0^2}|\varepsilon(\omega)| + \kappa^2|^2}{|\varepsilon(\omega)|\sqrt{k_0^2 - \kappa^2} - i\sqrt{k_0^2}|\varepsilon(\omega)| + \kappa^2|^2} = 1. \quad (3.1.10)$$

Ist die Permittivität positiv, muss dagegen entweder die Dispersionsrelation im Medium

$\kappa = k_0 \sqrt{\varepsilon(\omega)}$ oder die im Vakuum $\kappa = k_0$ erfüllt sein, damit $|r_s|^2 = |r_p|^2 = 1$ gilt.

Für vollständige Absorption ($r_s = r_p = 0$) muss die Bedingung $\varepsilon(\omega) = 1$, was dem sogenannten Christiansen-Punkt entspricht, erfüllt sein. Am Christiansen-Punkt stimmt also die Permittivität des Vakuums mit der des Mediums überein. Für $\varepsilon(\omega) \neq 1$ kann bei der p-Polarisation für

$$\kappa = k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon(\omega) + 1}} \quad (3.1.11)$$

dennoch vollständige Absorption eintreten. Dabei werden $\varepsilon(\omega) \geq 0$ und $\kappa \leq k_0$ vorausgesetzt. Führt man zwischen der Verbindungslinie von Nanoteilchen und der Oberfläche den Winkel ϑ ein, sodass sich $\kappa := k_0 \sin(\vartheta)$ definieren lässt, erhält man eine Definition für den sogenannten Brewster-Winkel

$$\vartheta = \arcsin \left(\sqrt{\frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon(\omega) + 1}} \right). \quad (3.1.12)$$

Mit der Permittivität kann man die lokale Zustandsdichte von SiC ausrechnen. In Abbildung 5 wird diese für verschiedene Abstände z dargestellt. Zusätzlich wurden die Näherungen für das Nah- und Fernfeld aus den Gleichungen (2.4.14) und (2.4.17) gestrichelt eingezeichnet sowie die Wellenzahlen der longitudinal und transversal optischen Phononen.

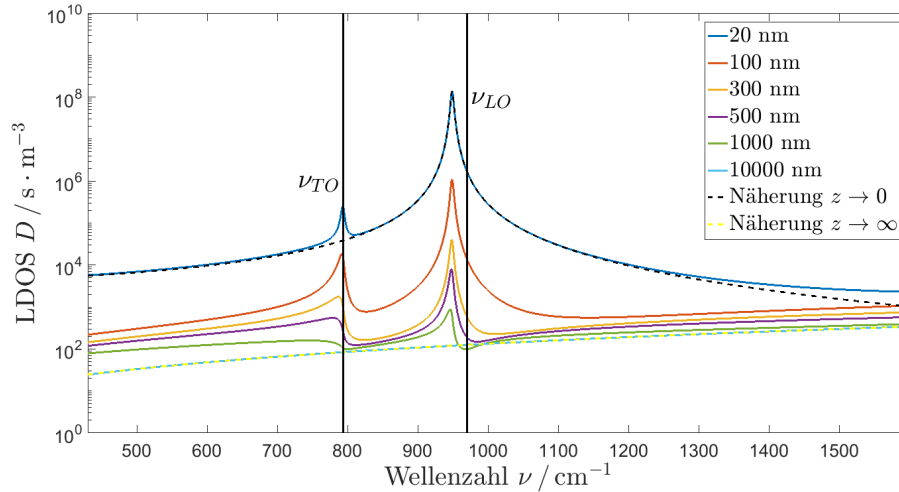


Abbildung 5: Lokale Zustandsdichte $D(\nu)$ aus Gleichung (2.4.13) von SiC halblogarithmisch aufgetragen über die Wellenzahl ν für unterschiedliche Abstände z zwischen dem Nanoteilchen und der SiC-Oberfläche. Zusätzlich wurden die Näherungen $z \rightarrow 0$ und $z \rightarrow \infty$ eingezeichnet. Die beiden vertikalen Striche repräsentieren die Wellenzahlen der transversal und longitudinal optischen Phononen.

Der linke der beiden Peaks liegt bei der Frequenz der transversal optischen Phononen.

Diese entspricht der Resonanzfrequenz des Lorentz-Oszillators – also dem ω_0 in Gleichung (3.1.1). Wird das SiC also mit dieser Frequenz angeregt, so schwingt das Gitter resonant, weshalb in der lokalen Zustandsdichte ein Maximum auftritt. Dieses fällt immer schwächer aus als ein weiteres Maximum bei $\omega = 1,787 \cdot 10^{14} \frac{\text{rad}}{\text{s}}$, dessen Einfluss für kleinere Abstände z weiter zunimmt. Anhand der Näherung (2.4.17) erkennt man, dass die lokale Zustandsdichte besonders groß wird, wenn $\varepsilon(\omega) \approx -1$ gilt. Negativ wird die Permittivität wie bereits angesprochenen im Reststrahlenband. Um die Herkunft des rechten Peaks zu verstehen, müssen die Polstellen der lokalen Zustandsdichte bzw. der elektrischen Green'schen Funktion bestimmt werden. Dies gelingt, indem man die Amplitudenreflexionskoeffizienten betrachtet. r_s divergiert nach (2.2.13) für den Fall

$$\gamma_0 = \sqrt{k_0^2 - \kappa^2} = -\sqrt{k_0^2 \varepsilon(\omega) - \kappa^2} = -\gamma_1, \quad (3.1.13)$$

was nicht zu erfüllen ist. r_p divergiert nach (2.2.14) für den Fall

$$\varepsilon(\omega)\gamma_0 = \varepsilon(\omega)\sqrt{k_0^2 - \kappa^2} = -\sqrt{k_0^2 \varepsilon(\omega) - \kappa^2} = -\gamma_1. \quad (3.1.14)$$

Diese Bedingung kann man nur erfüllen, wenn die Permittivität negativ wird, sodass dieses Maximum im Reststrahlenband auftritt. Daraus folgt für (3.1.14)

$$\gamma_1 = \sqrt{k_0^2 \varepsilon(\omega) - \kappa^2} = i\sqrt{k_0^2 |\varepsilon(\omega)| + \kappa^2} =: i\hat{\gamma}_1. \quad (3.1.15)$$

Im Medium selbst bilden sich durch das $i\hat{\gamma}_1$ evaneszente Wellen aus, da im Exponenten der abklingenden Exponentialfunktion nur noch reelle Zahlen stehen, denn $\hat{\gamma}_1$ ist immer positiv. Um auf das Verhalten im Vakuum zu schließen, wird Gleichung (3.1.14) nach κ umgeformt. Dadurch ergibt sich wieder die Brewster-Bedingung aus Gleichung (3.1.11), allerdings diesmal unter der Bedingung $\varepsilon(\omega) < 0$. Anhand dieser Gleichung erkennt man, dass für negative Permittivitäten auch $\kappa > k_0$ gilt. Dadurch wird wiederum γ_0 imaginär, sodass sich auch im Vakuum evaneszente Wellen ausbilden. Diese Wellen bezeichnet man als Oberflächenmoden, da sie entlang der Oberfläche propagieren, aber senkrecht dazu exponentiell abnehmen. Für dielektrische Materialien wie SiC nennt man sie auch Oberflächenphonon-Polaritonen. Die Oberflächenmoden schwingen resonant bei $\varepsilon(\omega) \approx -1$ nach (3.1.11), was bei $\omega = 1,787 \cdot 10^{14} \frac{\text{rad}}{\text{s}}$ bzw. $\nu = 949 \text{ cm}^{-1}$ geschieht. Diese Resonanz verursacht gerade den rechten Peak in Abbildung 5.

Man kann erkennen, dass die Peaks immer weiter abnehmen, je weiter sich der Messpunkt von der Oberfläche entfernt, bis die Zustandsdichte schließlich identisch der im

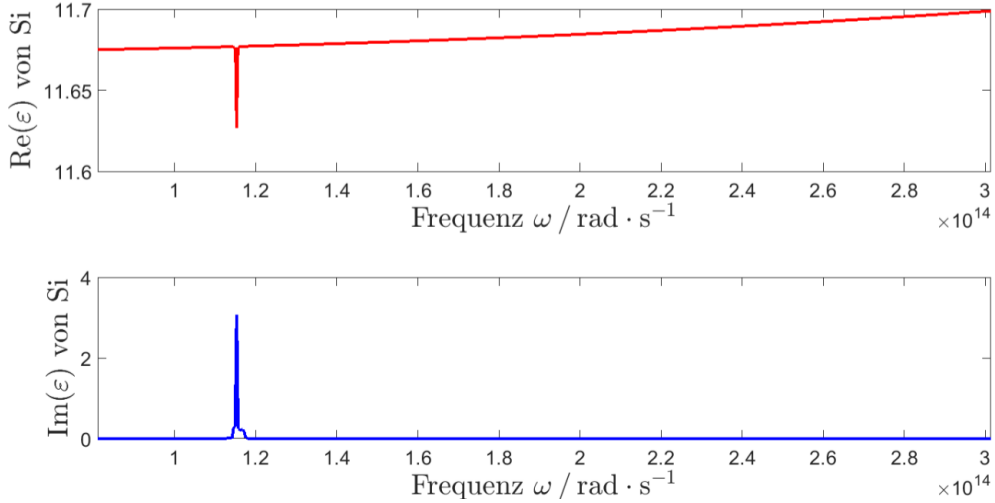


Abbildung 6: Real- und Imaginärteil der Permittivität $\varepsilon(\omega)$ von Si aufgetragen über die Frequenz ω .

Vakuum ist, was mit der Näherung aus Gleichung (2.4.14) übereinstimmt. Je geringer der Abstand wird, desto größer wird auch die Zustandsdichte, da die lokale Zustandsdichte im Nahfeld nach Näherung (2.4.17) proportional zu z^{-3} ist. Der Peak bei der Frequenz der transversal optischen Phononen wird immer geringer im Vergleich zu dem der Oberflächenphonon-Polaritonen, bis er schließlich gar nicht mehr zu sehen ist wie in der Näherung für sehr kleine Abstände z . Es ist zu erwarten, dass die spektrale Leistung des Nanoteilchens oberhalb der SiC-Oberfläche die Eigenschaften der lokalen Zustandsdichte erbt, da sie die Anzahl der Moden festlegt, in die das Nanoteilchen an der Stelle $z = z_p$ Wärme abstrahlen kann.

Das emittierende Nanoteilchen besteht aus Si. Die Permittivität von Si wird in Abbildung 6 dargestellt [27, 28, 29]. Dabei wurden die Daten aus den angegebenen Quellen linear interpoliert. Sie beeinflusst die spektrale Leistung durch den Imaginärteil der Polarisierbarkeit. Charakteristisch ist dabei der Einbruch im Realteil bzw. der Peak im Imaginärteil bei $\omega = 1,153 \cdot 10^{14} \frac{\text{rad}}{\text{s}}$ bzw. $\nu = 612 \text{ cm}^{-1}$, der aus einer Zwei-Phononen-Absorption resultiert. Dadurch wird in der spektralen Leistung bei dieser Frequenz ebenfalls ein Peak auftreten, da diese auch die Eigenschaften von Si transportiert.

3.2 Untersuchung der spektralen Leistung für feste Abstände zur Oberfläche und verschiedene Teilchenradien

Mit Hilfe der Permittivität von SiC und Si aus den Abbildungen 4 und 6 lässt sich die spektrale Leistung $P(\omega, z_p)$ nach Gleichung (2.3.26) bestimmen. Als Parameter wurden die Folgenden verwendet: der Radius betrage $R = 20 \text{ nm}$ und die Temperatur $T = 700 \text{ K}$.

Die Abbildung 7 zeigt für unterschiedliche Abstände z_p die numerisch berechnete Leistung. Im Inset wird dabei der Bereich der Oberflächenphonon-Polaritonen-Resonanz dargestellt. Wie erwartet, sieht man bei $\nu = 612 \text{ cm}^{-1}$ den durch die Zwei-Phononen-Absorption des Si's verursachten Peak. Die Leistung nimmt mit zunehmendem Abstand z_p nahezu überall ab. Zudem tritt im Bereich der Wellenzahl $939 \text{ cm}^{-1} \leq \nu \leq 949 \text{ cm}^{-1}$ ein weiterer Peak bei der Oberflächenphonon-Polaritonen-Resonanz auf. Zusätzlich erkennt man im Inset eine Verschiebung dieses Peaks hin zu größeren Wellenzahlen ν bei größer werdendem Abstand z_p . Bei einem Abstand $z_p = 100 \text{ nm}$ ist die Auswirkung der Oberflächenphonon-Polaritonen-Resonanz auf die gemessene spektrale Leistung bereits verschwunden.

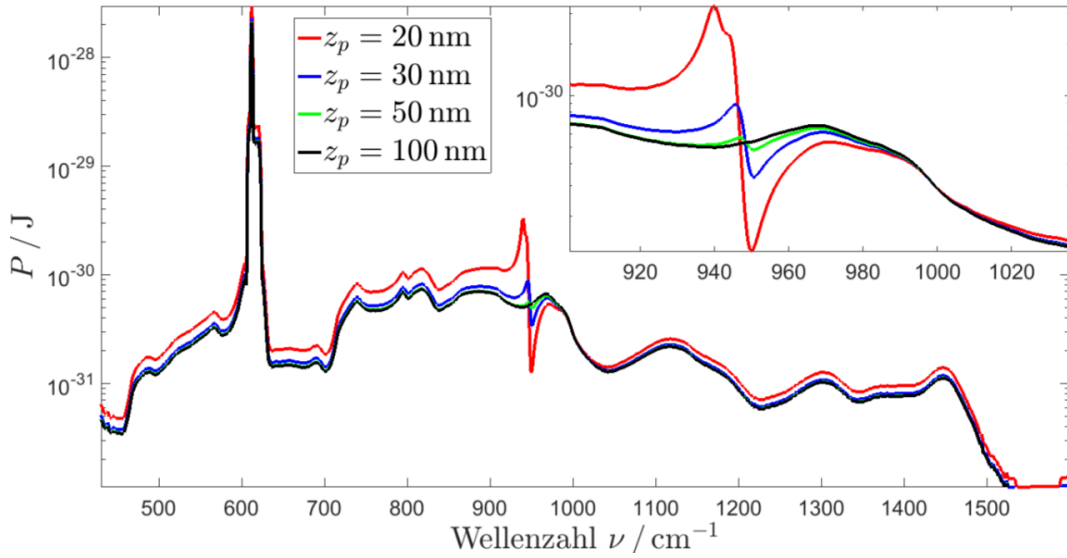


Abbildung 7: Spektrale Leistung $P(\nu)$ halblogarithmisch aufgetragen über die Wellenzahl ν für verschiedene Abstände z_p . Im Inset wird der Ausschnitt um die Oberflächenphonon-Polaritonen-Resonanz dargestellt. Dabei wurden die Parameter $R = 20 \text{ nm}$ und $T = 700 \text{ K}$ gewählt.

Denselben Effekt sieht man, wenn zusätzlich noch der Radius R variiert wird wie in Abbildung 8. Hier wurden die Parameter $z_p = 20 \text{ nm}$ und $T = 700 \text{ K}$ fest gewählt. Der Peak wandert zu einer höheren Wellenzahl ν , wenn hier der Radius des Dipols verringert wird. Da dadurch der Abstand zur Oberfläche vergrößert wird bei konstantem Abstand z_p , entspricht dies demselben Effekt wie bei Variation des Abstands z_p zur Oberfläche bei konstantem Radius R . Für $R = z_p$ berührt das Nanoteilchen die Oberfläche. Der Grund für die Verschiebung könnte in einer Veränderung der Kopplung zwischen Nanoteilchen und Oberfläche liegen, wie man es z.B. von zwei voneinander getrennten Potentialtöpfen kennt [30]. Verringert man dort den Abstand und verstärkt damit die Kopplung zwischen den Potentialtöpfen, spalten sich die Energieniveaus auf und werden zusätzlich abgesenkt. Die Absenkung nimmt dabei für kleinere Abstände immer weiter zu. Eine Absenkung

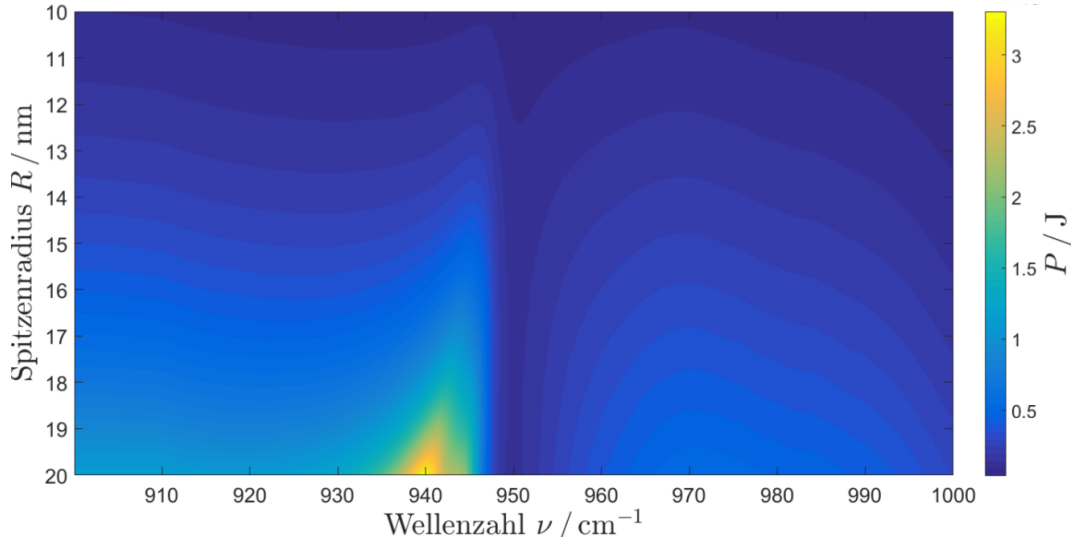


Abbildung 8: Darstellung der spektralen Leistung $P(\nu, R)$ in Abhängigkeit von der Wellenzahl ν und vom Radius des Dipols für einen Abstand $z_p = 20$ nm zur Oberfläche sowie eine Temperatur $T = 700$ K des Nanoteilchens.

der Energieniveaus entspricht einer Abnahme der Wellenzahl, was auch hier im Inset aus Abbildung 7 und in Abbildung 8 zu sehen ist.

3.3 Untersuchung der Abstandsabhängigkeit der spektralen Leistung für feste Wellenzahlen

In Abbildung 9 ist die Abstandsabhängigkeit der Leistung für drei spezielle Wellenzahlen und die Parameter $R = 20$ nm und $T = 700$ K angegeben. Dabei handelt es sich um die beiden Wellenzahlen, bei denen Resonanzen auftreten – bei $\nu = 612$ cm^{-1} und $\nu = 939$ cm^{-1} und eine weitere Wellenzahl $\nu = 1300$ cm^{-1} weitab der Resonanzen. Zusätzlich wird dort der Grenzwert für große Abstände z_p mit einer gestrichelten Linie nach Gleichung (2.3.35) angegeben. Im Inset sind dieselben Graphen für eine komplette Reflexion bei allen Wellenzahlen ν dargestellt, indem die Fresnel'schen Amplitudenreflexionskoeffizienten auf $r_s = -1$ und $r_p = 1$ gesetzt wurden, um den Verlauf ohne Dissipation im Oberflächenmaterial zu erhalten. Der Wert $r_s = -1$ ergibt sich aus dem Phasensprung um π , der bei der Reflexion der senkrecht polarisierten Strahlung am optisch dichteren SiC stattfindet.

Der Unterschied in der spektralen Leistung bei den einzelnen Wellenzahlen folgt dem Trend, der schon in Abbildung 7 zu sehen war, sodass für die Leistungen stets $P(612 \text{ cm}^{-1}) > P(939 \text{ cm}^{-1}) > P(1300 \text{ cm}^{-1})$ gilt. Auffällig ist ein starker Anstieg beim roten Graphen für $z_p \rightarrow R$, was auf die Streuung der Oberflächenmoden ins Fernfeld zurückzuführen ist. Man sieht, dass für die beiden anderen Graphen die Werte für kleine Abstände weit unterhalb

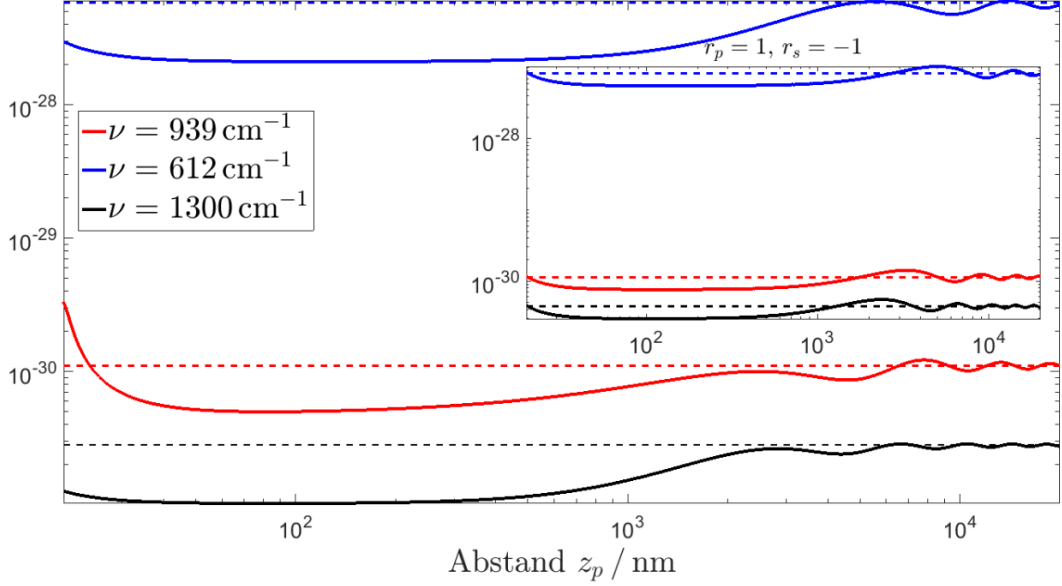


Abbildung 9: Darstellung der spektralen Leistung $P(\nu)$ als Funktion des Abstands für verschiedene Wellenzahlen. Im Bereich um $\nu = 939 \text{ cm}^{-1}$ liegt die Oberflächenphonon-Polariton-Resonanz in SiC und bei $\nu = 612 \text{ cm}^{-1}$ die Zwei-Phononen-Absorption im Si. Die letzte Wellenzahl wurde fernab der Resonanzen gewählt. Im Inset werden dieselben Graphen im Fall einer vollständigen Reflexion durch $r_s = -1$ und $r_p = 1$ dargestellt. Die gestrichelten Linien kennzeichnen den Grenzwert für einen unendlich großen Abstand $z_p \rightarrow \infty$ nach Gleichung (2.3.35). Es wurden die Parameter $R = 20 \text{ nm}$ und $T = 700 \text{ K}$ verwendet.

dem Grenzwert liegen, der durch die getrichtelte Linie angegeben wird. Dies hängt offenbar mit der Oberfläche zusammen, da diese Werte für kleine z_p im Inset leicht oberhalb dieses Grenzwertes liegen. Außerdem steigen die Graphen für den allgemeinen wie auch für den Fall vollständiger Reflexion für $z_p \rightarrow R$ leicht an, weshalb dies nicht durch Dissipation im SiC verursacht werden kann. Ohne Dissipation wie im Inset erhält man für $z_p = R$ ein Nanoteilchen im Vakuum an der Position der Oberfläche, sodass erneut der Grenzfall aus Gleichung (2.3.36) eintritt. Mit Dissipation liegt der Wert unter dem Grenzwert bei $z_p = R$ durch die Abführung von Wärme ins Medium. Der darauffolgende Abfall der Leistung bei $z_p > R$ hängt zum einen mit der Abschattung durch das Nanoteilchen zusammen, das bei kleinen Abständen $z_p \sim 100 \text{ nm}$ das an der Oberfläche reflektierte Licht blockiert. Zum anderen setzen Interferenzeffekte ein durch die Überlagerung der reflektierten Strahlung mit der emittierten des Nanoteilchens. Dies wird im Inset nochmal verdeutlicht. Auch dort erkennt man in demselben Bereich einen starken Abfall der Leistung, der allerdings geringer ausfällt. Im allgemeinen Fall wird durch die Abführung von Wärme innerhalb des SiC's die Leistung weiter abgesenkt. So wird durch die Wärmestrahlung das Oberflächenmaterial polarisiert oder angeregt. Die Materialantwort – z.B. eine erneute Emission nach Abre-

gung in den Grundzustand – ist allerdings nicht in der Formel (2.3.26) enthalten, weshalb die Leistung zusätzlich abfällt, da sie in das Material abfließt. Da für größere Abstände die Dissipation im SiC abnimmt, steigt die Leistung für größere z_p wieder an. Die Minima bzw. Maxima der Schwingungen liegen jeweils eine halbe Wellenlänge des Lichts auseinander ($\frac{\lambda}{2} = 8,17 \mu\text{m}$ für $\nu = 612 \text{ cm}^{-1}$, $\frac{\lambda}{2} = 5,32 \mu\text{m}$ für $\nu = 939 \text{ cm}^{-1}$ und $\frac{\lambda}{2} = 3,85 \mu\text{m}$ für $\nu = 1300 \text{ cm}^{-1}$), wie man es von stehenden Wellen kennt, die sich auch hier ausbilden. Deutlich wird die Interferenz im Bereich der thermischen Wellenlänge $z_p \sim \frac{\hbar c}{k_B T} = 3,3 \mu\text{m}$. Die Interferenz erkennt man am Schwingungsterm in Gleichung (2.3.34)

$$P(\omega) = \frac{\mu_0 \omega^4 p(\omega)}{4\pi c} \left[|\tilde{d}_{xx}|^{-2} \left(\frac{4}{3} + \frac{2}{k_0^2 z_p} \text{Re} \left(\frac{1 - \sqrt{\varepsilon(\omega)}}{1 + \sqrt{\varepsilon(\omega)}} e^{i(2k_0 z_p - \frac{\pi}{4})} \right) + \int_0^{k_0} d\kappa \frac{\kappa}{k_0 \gamma_0} \right. \right. \\ \left. \left. \left[|r_s|^2 + |r_p|^2 \left(1 - \frac{\kappa^2}{k_0^2} \right) \right] \right) + |\tilde{d}_{zz}|^{-2} \left(\frac{2}{3} + \int_0^{k_0} d\kappa \frac{\kappa^3}{k_0^3 \gamma_0} |r_p|^2 \right) \right]$$

an der komplexen Exponentialfunktion. Durch die Proportionalität zu $\frac{1}{z_p}$ wird die Schwingungsamplitude mit zunehmendem Abstand immer geringer. Die spektrale Leistung konvergiert schließlich gegen den Wert der gestrichelten Linie aus (2.3.35)

$$P(\omega) \xrightarrow{z_p \rightarrow \infty} \frac{\mu_0 \omega^4 p(\omega)}{4\pi c |1 - i \frac{k_0^3}{6\pi} \alpha|^2} \left[2 + \int_0^{k_0} d\kappa \frac{\kappa}{k_0 \gamma_0} (|r_s|^2 + |r_p|^2) \right].$$

Im Reststrahlenband, in das auch die Wellenzahl $\nu = 939 \text{ cm}^{-1}$ fällt, stimmt der Wert der gestrichelten Linie mit der Leistung im Vakuum aus Gleichung (2.3.36) überein.

3.4 Untersuchung der spektralen Leistung in Abhängigkeit vom Winkel zur Oberfläche

Nun soll die Winkelabhängigkeit der spektralen Leistung untersucht werden. Dazu wird der Winkel ϑ eingeführt, der zwischen der Flächennormalen und der Fläche liegt. Dafür werden κ und γ_0 folgendermaßen definiert:

$$\kappa = k_0 \sin(\vartheta), \quad (3.4.1)$$

$$\gamma_0 = k_0 \cos(\vartheta). \quad (3.4.2)$$

So lassen sich die Integrale in den Gleichungen (2.3.16) und (2.3.17) zu

$$2\text{Re}(I_1) = \frac{\pi}{2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\vartheta \sin(\vartheta) \left[1 + \cos^2(\vartheta) + |r_s|^2 + |r_p|^2 \cos^2(\vartheta) \right. \\ \left. + 2\text{Re} \left(e^{2ik_0 \cos(\vartheta) z_p} (r_s - r_p \cos^2(\vartheta)) \right) \right] \quad (3.4.3)$$

und

$$2\text{Re}(I_2) = \frac{\pi}{2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\vartheta \sin^3(\vartheta) \left[1 + |r_p|^2 + 2\text{Re}(r_p e^{2ik_0 \cos(\vartheta)z_p}) \right] \quad (3.4.4)$$

umschreiben. Setzt man (3.4.3) und (3.4.4) in Gleichung (2.3.9) ein, ergibt sich

$$P(\omega) = \frac{\mu_0 \omega^4 p(\omega)}{4\pi c} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\vartheta \sin(\vartheta) \tilde{P}(\vartheta, \omega) \quad (3.4.5)$$

mit

$$\begin{aligned} \tilde{P}(\vartheta, \omega) = & \frac{1}{|\tilde{d}_{xx}|^2} \left[1 + |r_s|^2 + \cos^2(\vartheta) (1 + |r_p|^2) + 2\text{Re} \left((r_s - r_p \cos^2(\vartheta)) \right. \right. \\ & \left. \left. e^{2ik_0 \cos(\vartheta)z_p} \right) \right] + \frac{\sin^2(\vartheta)}{|\tilde{d}_{zz}|^2} \left[1 + |r_p|^2 + 2\text{Re} \left(r_p e^{2ik_0 \cos(\vartheta)z_p} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.4.6)$$

In Abbildung 10 wird $\tilde{P}(\nu, \vartheta)$ über die Wellenzahl und den Winkel für die Parameter $R = 20$ nm und $T = 700$ K aufgetragen. Man erkennt dort drei Maxima, deren Intensitäten für größere Abstände z_p zwischen Oberfläche und Nanoteilchen abnehmen, was man auch in Abbildung 9 für $z_p \leq 50$ nm sehen konnte. Für einen Winkel von $\vartheta = 90^\circ$ verschwindet die Leistung für alle Frequenzen, da nach der Definition aus (3.4.1) und (3.4.2) dann nur die Komponente parallel zur Oberfläche gemessen wird, die allerdings nichts beiträgt, da sie den Detektor nie erreicht.

Der linke Peak bei der Wellenzahl $\nu \approx 800$ cm⁻¹ gehört zur Frequenz der transversal optischen Phononen – also der Resonanzfrequenz des Lorentz-Oszillators. Dieser verschiebt sich nicht unter Variation des Winkels zu anderen Wellenzahlen. Für kleine Winkel $\vartheta \leq 30^\circ$ verschwindet er jedoch. Der mittlere Peak liegt im Bereich der Oberflächenphonon-Polariton-Resonanz bei $\nu \approx 945$ cm⁻¹. Dieser verschiebt sich für größer werdende Abstände z_p immer weiter hin zu höheren Frequenzen, wie man es bereits in den Abbildungen 7 und 8 feststellen konnte. Es fällt auf, dass sich für kleine Abstände $z_p \approx R$ im Bereich des Radius' ein zweiter, schmalerer Peak für kleinere Winkel $\vartheta \leq 25^\circ$ bei einer größeren Wellenzahl von ungefähr $\nu \approx 944$ cm⁻¹ bildet. Der andere liegt bei $\nu = 939$ cm⁻¹. Bei größeren Abständen sieht man nur einen Peak, der sich aber immer im Bereich des zuvor angesprochenen zweiten Peaks befindet und immer breiter wird. Zudem verschiebt sich dieses Maximum hin zu kleineren Winkeln ϑ . Der rechte Peak liegt für kleine Winkel $\vartheta \leq 30^\circ$ bei ungefähr $\nu \approx 970$ cm⁻¹, was der Wellenzahl der longitudinal optischen Phononen entspricht. Bei größeren Winkeln $30^\circ \leq \vartheta \leq 80^\circ$ verschiebt er sich nahezu linear bis hin zu $\nu \approx 995$ cm⁻¹.

Zur Erklärung wird die spektrale Leistung für die Integrale aus (2.3.16) und (2.3.17)

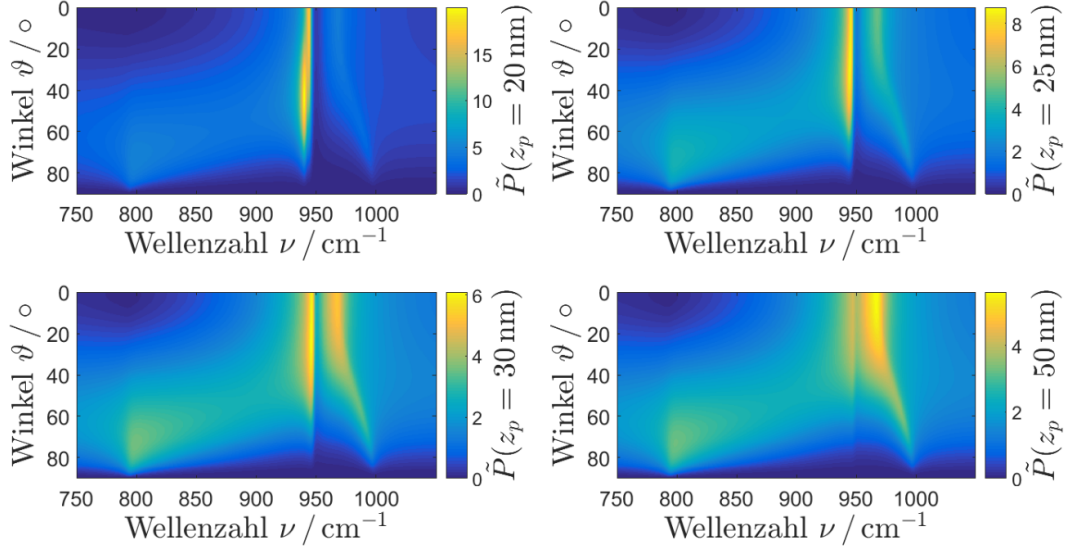


Abbildung 10: Winkelabhängige spektrale Leistung $\tilde{P}(\nu, \vartheta)$ für verschiedene Abstände z_p . Es wurden die Parameter $R = 20$ nm und $R = 700$ K verwendet.

betrachtet:

$$P(\omega) = \frac{\mu_0 \omega^4 p(\omega)}{4\pi c} \int_0^{k_0} d\kappa \tilde{P}(\omega, \kappa) \quad (3.4.7)$$

mit

$$\begin{aligned} \tilde{P}(\omega, \kappa) = & |\tilde{d}_{xx}|^{-2} \frac{\kappa}{k_0 \gamma_0} \left[2 - \frac{\kappa^2}{k_0^2} + |r_s|^2 + |r_p|^2 \left(1 - \frac{\kappa^2}{k_0^2} \right) \right. \\ & \left. + 2 \operatorname{Re} \left(e^{2i\gamma_0 z_p} \left(r_s - r_p \left(1 - \frac{\kappa^2}{k_0^2} \right) \right) \right) \right] \\ & + |\tilde{d}_{zz}|^{-2} \frac{\kappa^3}{k_0^3 \gamma_0} [1 + |r_p|^2 + 2 \operatorname{Re}(r_p e^{2i\gamma_0 z_p})]. \end{aligned} \quad (3.4.8)$$

In Abbildung 11 wird der normierte Betrag der spektralen Leistung $\frac{|\tilde{P}(\omega, \kappa)| - |\tilde{P}_{\min}(\omega, \kappa)|}{|\tilde{P}_{\max}(\omega, \kappa)| - |\tilde{P}_{\min}(\omega, \kappa)|}$ sowie im Inset der auf dieselbe Weise normierte Realteil logarithmisch aufgetragen über die Wellenzahl ν und den Betrag des Wellenvektors κ . Als Parameter wurden $R = 20$ nm, $z_p = 20$ nm und $T = 700$ K gewählt. Zusätzlich sind die Lichtlinie $\kappa = \frac{\omega}{c}$ sowie die drei zuvor angesprochenen Wellenzahlen dargestellt, bei denen Resonanzen auftreten. Außerdem sieht man den Verlauf der Wellenzahl im Medium $\kappa = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon(\omega)}$, die gleichzeitig die Lichtlinie in SiC darstellt.

Durch diese Abbildung erhält man eine Übersicht über die Dispersionsrelation der einzelnen Resonanzen. Im Inset verschwindet die spektrale Leistung rechts der Lichtlinie, da sie dort imaginär wird durch das komplex werdende γ_0 . Besitzen Wellen einen Wellenvektorbetrag rechts der Lichtlinie, haben sie einen evaneszenten Charakter. Ansonsten propagieren sie. Liegt ihr Wellenvektorbetrag genau zwischen den beiden Lichtlinien der

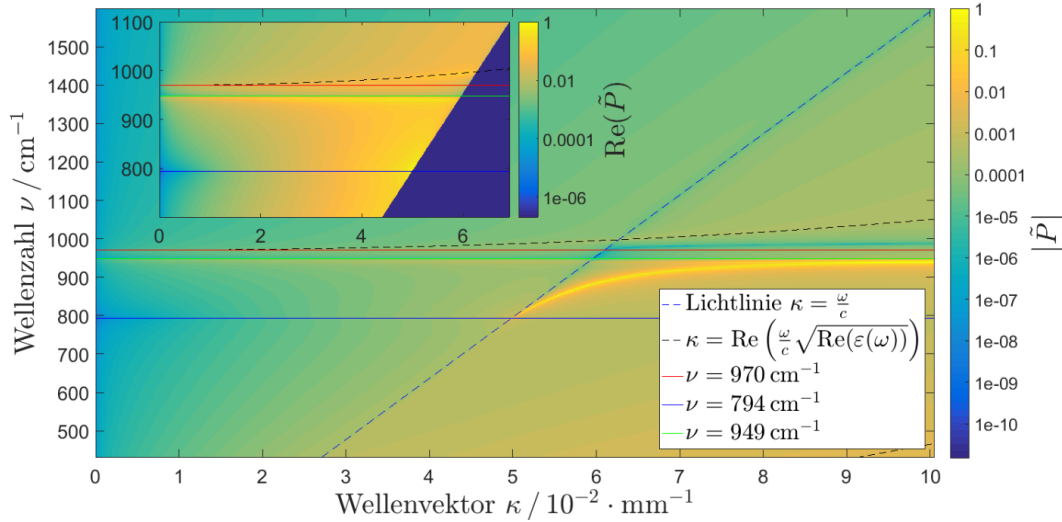


Abbildung 11: Der Betrag der normierten, spektralen Leistung $\frac{|\hat{P}(\nu, \kappa)| - |\hat{P}_{\min}(\nu, \kappa)|}{|\hat{P}_{\max}(\nu, \kappa)| - |\hat{P}_{\min}(\nu, \kappa)|}$ logarithmisch aufgetragen über die Wellenzahl ν und den Betrag des Wellenvektors κ . Im Inset sieht man den dazugehörigen Realteil aufgetragen über dieselben Größen zur besseren Kenntlichmachung der Farbverläufe. Die durchgezogenen Linien repräsentieren die bekannten Wellenzahlen der longitudinal und transversal optischen Phononen-Resonanzen sowie die der Oberflächenphononen-Polaritonen-Resonanzen. Die gestrichelten Linien stellen die Lichtlinien im Vakuum (blau) und SiC (schwarz) dar.

Medien (gestrichelte Linien), sind sie in einem Medium evaneszent und im anderen propagierend. Hier gibt es den Bereich $k_0 \leq \kappa \leq k_0 \sqrt{\varepsilon(\omega)}$, sodass sich propagierende Wellen im SiC evaneszent im Vakuum ausbreiten. Die Wellen werden also vollständig an der Oberfläche des SiC's reflektiert, was man auch als Totalreflexion bezeichnet. Auffallend ist die gut sichtbare gelbe Linie rechts der Lichtlinie des Vakuums, die gerade die Dispersionsrelation aus Gleichung (3.1.11) für den Fall negativer Permittivität beschreibt, wo r_p divergiert und die Leistung dadurch maximal wird. Sie verläuft im Reststrahlenband zwischen den Resonanzfrequenzen der transversal und longitudinal optischen Phononen rechts der Lichtlinie des Vakuums, wodurch sie evaneszente Wellen beschreibt, und konvergiert gegen die Oberflächenphononen-Polaritonen-Resonanzwellenzahl. Da bei der Berechnung der spektralen Leistung dieser Bereich allerdings nicht berücksichtigt wird, erkennt man dieses Maximum in den Abbildungen zur Analyse von $P(\omega, z_p)$ nicht. Bei der Wellenzahl $\nu = 949 \text{ cm}^{-1}$ der Oberflächenphononen-Polaritonen-Resonanz erkennt man ebenfalls ein Maximum – vor allem im Inset –, weil r_p durch $\varepsilon(\omega) \approx -1$ divergiert. Die Leistung fällt hier geringer aus als rechts der Lichtlinie durch den evaneszenten Charakter der Strahlung. Weitere Maxima erkennt man entlang der Lichtlinie im Medium. In Abbildung 11 wird sie von der Linie bei $\nu = 794 \text{ cm}^{-1}$ und teilweise von der Legende verdeckt. Mathematisch versteht man relativ schnell, warum dort ein Maximum auftritt. Für $\kappa = k_0 \sqrt{\varepsilon(\omega)}$ wer-

den die Fresnel'schen Amplitudenreflexionskoeffizienten maximal für den propagierenden Bereich:

$$r_s = \frac{\sqrt{k_0^2 - \kappa^2} - \sqrt{k_0^2 \varepsilon(\omega) - \kappa^2}}{\sqrt{k_0^2 - \kappa^2} + \sqrt{k_0^2 \varepsilon(\omega) - \kappa^2}} = \frac{\sqrt{k_0^2 - \kappa^2}}{\sqrt{k_0^2 - \kappa^2}} = 1, \quad (3.4.9)$$

$$r_s = \frac{\sqrt{k_0^2 - \kappa^2} \varepsilon(\omega) - \sqrt{k_0^2 \varepsilon(\omega) - \kappa^2}}{\sqrt{k_0^2 - \kappa^2} \varepsilon(\omega) + \sqrt{k_0^2 \varepsilon(\omega) - \kappa^2}} = \frac{\sqrt{k_0^2 - \kappa^2} \varepsilon(\omega)}{\sqrt{k_0^2 - \kappa^2} \varepsilon(\omega)} = 1. \quad (3.4.10)$$

Für die spektrale Leistung ergibt sich daraus

$$\begin{aligned} \tilde{P}(\omega, \kappa) &= |d_{xx}|^{-2} \frac{2\kappa}{k_0 \gamma_0} \left[2 + \frac{\kappa^2}{k_0^2} (\cos(2\gamma_0 z_p) - 1) \right] \\ &\quad + |d_{zz}|^{-2} \frac{2\kappa^3}{k_0^3 \gamma_0} [1 + \cos(2\gamma_0 z_p)] \\ &= \frac{4\kappa}{k_0 \gamma_0} \left(|d_{xx}|^{-2} + \frac{\kappa^2}{k_0^2} |d_{zz}|^{-2} \right), \end{aligned} \quad (3.4.11)$$

wobei eine Taylor-Entwicklung des Cosinus' um 0 durchgeführt wurde, da $z_p \rightarrow 0$ geht. Die spektrale Leistung besitzt hier ein Maximum und nimmt mit größerem κ stark zu, da der zweite Term mit κ^3 geht, was die starke Zunahme der Leistung in Abbildung 11 nahe der Lichtlinie im Vakuum erklärt.

Damit lassen sich auch die Maxima aus Abbildung 10 verstehen, die nur unter bestimmten Winkeln auftraten. Im Vergleich zu dieser Abbildung entspricht jede Auswertung unter einem Winkel in Abbildung 11 einer Auswertung entlang einer Geraden vom Ursprung aus, bis die Gerade der Lichtlinie entspricht, was sich auch aus den Definitionen (3.4.1) und (3.4.2) ergibt.

3.5 Untersuchung der gesamten Leistung

In Abbildung 12 wird die über alle Frequenzen integrierte Leistung nach Gleichung (2.3.39) dargestellt, was einer gemittelten und bzgl. der Zeit konstanten Leistung entspricht. Der Verlauf ist sehr ähnlich zu demjenigen aus Abbildung 9. Dabei wurden die Parameter $R = 14,77$ nm als Radius und $T = 700$ K als Temperatur gewählt.

Auch hier erkennt man im Fernfeld, dass sich eine Schwingung einstellt durch die auftretende Interferenz der reflektierten Anteile mit denen, die vom Nanoteilchen emittiert werden. Je weiter man sich von der Oberfläche entfernt, desto geringer fällt die Schwingung aus und man nähert sich dem Wert an, den man erhält, wenn man das Integral über die spektrale Leistung aus Gleichung (2.3.35) bildet. In Abbildung 12 wird dieser Grenzwert durch die gestrichelte Linie dargestellt. Durch die angesprochene Dissipation erhält man

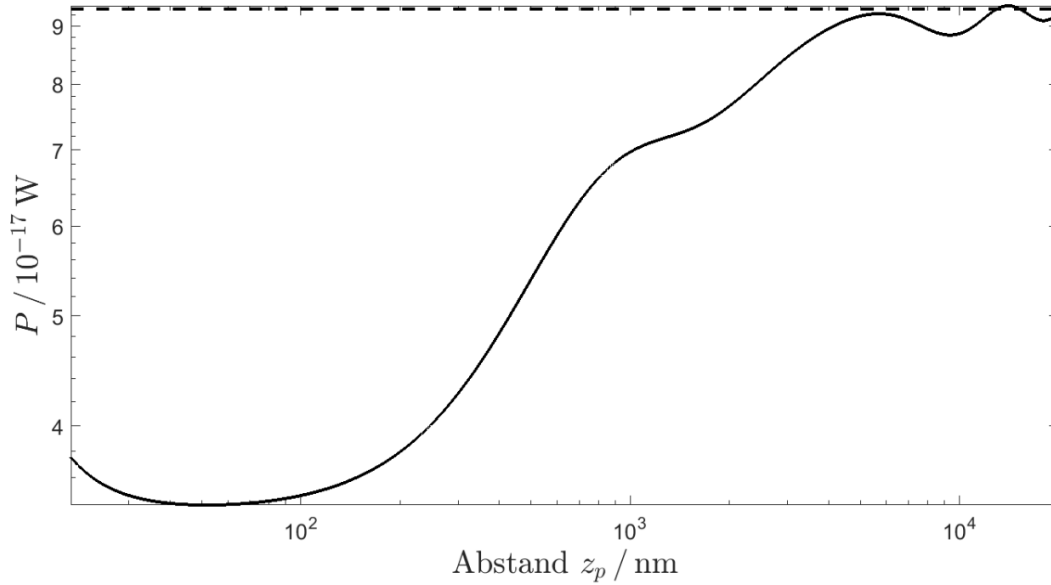


Abbildung 12: Spektrale Leistung $P(\omega)$ integriert über alle Frequenzen doppellogarithmisch aufgetragen über den Abstand z_p zur Oberfläche. Dies entspricht der vollen abgestrahlten Leistung. Die gestrichelte Linie repräsentiert den Grenzwert für $z_p \rightarrow \infty$. Als Parameter dienen $R = 14,77$ nm und $T = 700$ K.

für kurze Distanzen z_p zwischen Nanoteilchen und Oberfläche eine geringere Leistung als im Fernfeld. Durch die Oberflächenmoden steigt die Leistung für kurze Abstände z_p noch einmal an.

4 Diskussion der Ergebnisse und ihr Vergleich mit alternativen Modellen

In der Diskussion soll das hier erarbeitete Modell mit den Ergebnissen von Experimenten und den dort verwendeten Theorien verglichen werden. Dazu werden die Experimente von Jones und Raschke [5], O’Callahan et. al. [6] sowie Babuty et. al. [4] herangezogen. Zudem werden Optimierungsmöglichkeiten der entwickelten Theorie angesprochen.

4.1 Vergleich mit experimentellen Ergebnissen

In den Experimenten der ersten beiden Veröffentlichungen wurde jeweils ein Rasterkraftmikroskop mit Siliziumspitzen verwendet, die mit einem Heizwiderstand erhitzt werden konnten. Darunter befand sich die betrachtete Oberfläche aus SiC. Das emittierte und an der Spitze des Rasterkraftmikroskops gestreute Licht wurde in [5] mit einem reflektiven Cassegrain-Objektiv gesammelt, das gegenüber der Flächennormalen um 60° geneigt war, und in [6] durch Off-Axis-Parabolspiegel. Anschließend wurde das Licht durch ein Michelson-Interferometer mit Strahlteiler und Kompensationsplatte geschickt. Detektiert wurde es jeweils durch einen Quecksilber-Cadmium-Tellurid-Detektor. Mit einer Lock-In-Demodulation wurden Nah- und Fernfeld voneinander getrennt. Spektral untersucht wurde das Signal mit Fourier-Transformations-Infrarotspektroskopie. In der zuletzt erwähnten Veröffentlichung wurde dagegen die Oberfläche erhitzt und die thermisch angeregten Moden mit einer Wolframspitze gemessen.

Insbesondere interessierten sich die Experimentatoren für das Spektrum im Bereich der Oberflächenphononen-Polaritonen-Resonanz. Besonderes Interesse gilt dabei der Position des zur Resonanz gehörenden Peaks im Spektrum. Diese lässt sich im hier erarbeiteten Modell reproduzieren, wenn leichte Veränderungen in der Größe des Radius’ und des Abstands zwischen Oberfläche und Spitze vorgenommen werden, die einem Messfehler entsprechen. Im Experiment aus [5] wurden die Parameter $T = 700\text{ K}$, $z_p = 20\text{ nm}$ und $R = 20\text{ nm}$ gewählt, wobei nicht eindeutig beschrieben wurde, ob die Distanz schon den Radius beinhaltet – also hier die Spitze auf der Oberfläche aufliegt oder nicht. Unter der Annahme, dass in den Abstand z_p der Radius nicht mit einbezogen wurde, sodass die Spitze auf der Oberfläche aufliegt, erhält man mit dem hier erarbeiteten Modell den Resonanz-Peak ebenfalls bei $\nu \approx 945\text{ cm}^{-1}$ für $R \approx 18\text{ nm}$ statt 20 nm und $z_p \approx 22\text{ nm}$ statt 20 nm . Für den Fall, dass der Radius mitberücksichtigt wird, lässt sich die Position des Peaks mit den Parametern $R \approx 24\text{ nm}$ statt 20 nm und $z_p \approx 36\text{ nm}$ statt 40 nm reproduzieren. Im

Experiment aus [4] lässt sich ein Peak im angegeben Messbereich mit den dort benutzten Werten ebenfalls reproduzieren, wobei als Abstand $z_p = 50 \text{ nm}$ gewählt wurde, da man dort keinen genauen Wert angibt. Interessant ist dieses Experiment vor allem deshalb, weil durch das Aufheizen des SiC auch dessen Materialantwort gemessen wird, die in der hier berechneten Leistung nicht auftaucht.

Im Experiment aus [5] wurde die Abstandsabhängigkeit des im Bereich $925 \text{ cm}^{-1} \leq \nu \leq 975 \text{ cm}^{-1}$ spektral integrierten Signals angegeben. Sie folgt im Verlauf ungefähr dem Ergebnis aus Abbildung 9 bei $\nu = 939 \text{ cm}^{-1}$, wobei der Leistungsabfall für $z_p \leq \lambda_{th}$ geringer ausfällt, was an einer Verstärkung durch eine Materialantwort liegen könnte.

4.2 Vergleich mit der am häufigsten angewandten Theorie

Die Theorie, mit der in [5] sowie in [6] die experimentellen Resultate erklärt wurden, baut auf der lokalen Zustandsdichte auf. Für kleine Abstände $z_p \rightarrow 0$ wird dafür die Formel aus (2.4.17) verwendet. Als Produkt mit der Planck-Verteilung für die mittlere, thermische Energie eines Oszillators aus Gleichung (2.3.4) erhält man demnach die spektrale Energiedichte für den Übergang vom Fern- zum Nahfeld

$$u(z, \omega, T) = \Theta(\omega, T)D(z, \omega) \quad (4.2.1)$$

mit

$$\Theta(\omega, T) = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}$$

und

$$D(z, \omega) = \frac{1}{4\pi^2\omega z^3} \frac{\text{Im}(\varepsilon(\omega))}{|\varepsilon(\omega) + 1|^2}.$$

Die Energie jeder Mode wird also durch die mittlere, thermische Energie der Photonen gegeben und die Anzahl der Moden pro Energie durch die Zustandsdichte. Die lokale Zustandsdichte enthält die Informationen über das Oberflächenmaterial, die man in der hier erarbeiteten Theorie in den Green'schen Funktionen zur Berechnung der spektralen Leistung findet. Um die gestreute Leistung zu erhalten, wird die spektrale Energiedichte mit einem effektiven Streuquerschnitt und der Lichtgeschwindigkeit multipliziert. Für den effektiven Streuquerschnitt wurden in den beiden Experimenten die Spitzen der Rasterkraftmikroskope als Rayleigh-Streuer modelliert, sodass

$$C_{\text{eff}} = \frac{k_0^4 |\alpha_{\text{eff}}|^2}{6\pi} \quad (4.2.2)$$

mit der effektiven Polarisierbarkeit der Spitze

$$\alpha_{\text{eff}} = \alpha \left(1 - \frac{\alpha\beta}{16\pi(R+z)^3} \right)^{-1} \quad (4.2.3)$$

gilt, wobei α die Polarisierbarkeit eines Punktdipols nach Clausius-Mosotti aus Gleichung (2.1.10) und

$$\beta = \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 1} \quad (4.2.4)$$

die Stärke des Bildipols auf der Oberfläche darstellen. Zusammengefasst ergibt sich daraus die gestreute Leistung

$$P_{\text{scat}} = C_{\text{eff}} c u(z, \omega, T). \quad (4.2.5)$$

Ein fundamentaler Unterschied zwischen dieser und der in dieser Arbeit entwickelten Theorie ergibt sich aus der Verwendung der lokalen Zustandsdichte. Durch den evaneszenten Anteil, der bei der Näherung für $z_p \rightarrow 0$ überwiegt, spielen auch Wellenvektorbeträge $\kappa > k_0$ eine Rolle und tauchen im Integral zur Berechnung der lokalen Zustandsdichte und spektralen Leistung P_{scat} auf. Durch das Bilden des Realteils von γ_0 floss dieser Bereich gerade nicht in die Berechnung der spektralen Leistung für der hier erarbeiteten Theorie aus Gleichung (2.3.26) mit ein. Weil die Zustandsdichte eine z^{-3} -Abhängigkeit besitzt, divergiert auch die Leistung P_{scat} für kleine Abstände, wobei der Teilchenradius R eine natürliche Grenze bildet. Nach der Theorie aus Gleichung (4.2.5) müssten Teilchen mit besonders kleinem Radius bei Kontakt zur Oberfläche also Strahlung sehr großer Leistung emittieren. Da die Integrale aus Gleichung (2.3.26) durch die Vernachlässigung der Endlichkeit der Lichtgeschwindigkeit c für kleine Abstände zwischen Oberfläche und Nanoteilchen durch $k_0 \rightarrow 0$ verschwinden und c zusätzlich im Nenner des Vorfaktors auftaucht, verschwindet in der hier erarbeiteten Theorie stattdessen die Leistung.

Ein weiteres Problem der Theorie nach (4.2.5) liegt in der spektralen Verschiebung der Peaks unter Variation vom Abstand zwischen Nanoteilchen und Oberfläche bzw. Radius der Nanoteilchen, die sich mit dieser Theorie nicht erklären lässt, da der Peak der Oberflächenphononen-Polaritonen-Resonanz immer an derselben Stelle auftritt, wie in Abbildung 5 zu sehen ist. Dort wurde die lokale Zustandsdichte wellenzahl- und abstandsabhängig dargestellt. Diese Verschiebung fehlt in dieser Theorie, da die Kopplung zwischen Oberfläche und Nanoteilchen wie durch die Dyade \mathbb{D} in Gleichung (2.3.26) weder in der Zustandsdichte noch im effektiven Streuquerschnitt auftaucht. Dadurch erhält man durch die Berechnung der Leistung nach Gleichung (4.2.5) einen nur unzureichenden Eindruck über das elektromagnetische Feld, da die Wechselwirkung zwischen Oberfläche und Nano-

teilchen nicht erfasst wird. In Abbildung 13 sieht man beide Theorien über die Wellenzahl ν aufgetragen für die Parameter $R = 20$ nm, $z_p = 20$ nm und $T = 700$ K. Durch die unterschiedlich hohen Leistungen wurde für die beiden Kurven jeweils eine andere Skalierung gewählt.

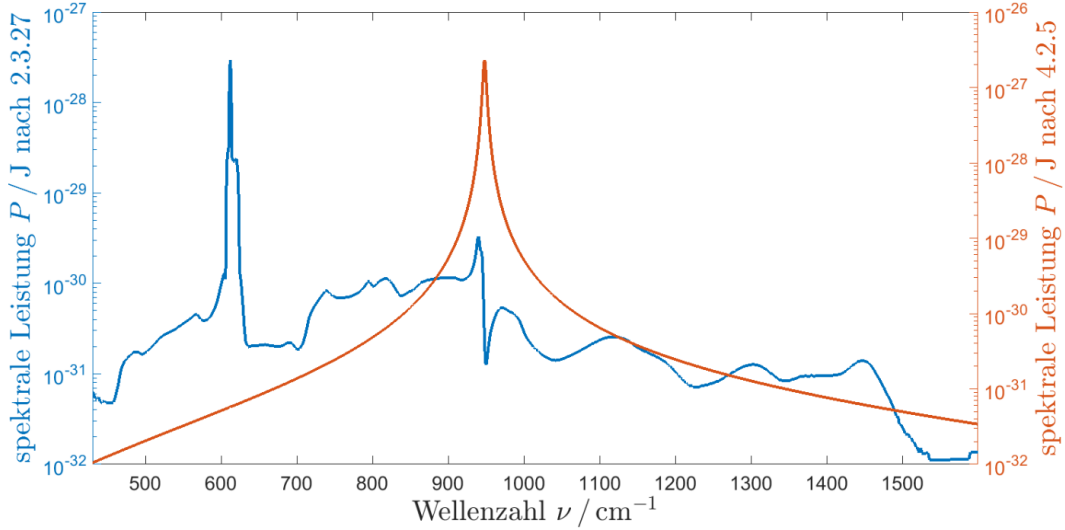


Abbildung 13: Spektrale Leistung $P(\nu)$ halblogarithmisch aufgetragen über die Wellenzahl ν nach der hier erarbeiteten Theorie aus Gleichung (2.3.26) (links, blau) und nach der Theorie aus Gleichung (4.2.5) (rechts, rot). Als Parameter dienen $R = 20$ nm, $z_p = 20$ nm und $T = 700$ K.

4.3 Optimierungsmöglichkeiten der hier erarbeiteten Theorie

Die einfachste Optimierungsmöglichkeit besteht in der Berücksichtigung des intermittierenden Modus' (tapping mode) des Rasterkraftmikroskops. Dazu müsste der Abstand z_p durch eine Funktion der Form $z_p(t) = \Delta z_p \sin(\Omega t) + z_{p,0}$ ersetzt werden, wo $z_{p,0}$ den Abstand zu Beginn, Ω die Frequenz, mit der die Spitze schwingt, und Δz_p die Oszillationsamplitude der Spitze angibt. Da das erhaltene Signal eine Mittelung der Messsignale liefert, müsste man in Gleichung (2.3.26) neben der Abstandsfunktion noch ein zusätzliches Integral über eine Schwingungsperiode einfügen, das durch die dabei vergangene Zeit geteilt wird.

Außerdem könnte man die Form des Nanoteilchens modifizieren bzw. dieses durch eine Anordnung aus mehreren ersetzen. So wären ein elliptisches Nanoteilchen oder zur Modellierung des Rasterkraftmikroskops eine kegelförmige Anordnung von Nanoteilchen denkbar [31]. Dadurch würde man vor allem den rückwirkenden Anteil der Green'schen Funktion $\mathbb{G}^{\text{EE},0}$ verändern und dadurch die Dyade \mathbb{D} ; der Verlauf der Leistung bliebe jedoch im Wesentlichen gleich. Um dem realen Bedingungen in den Experimenten gerecht

zu werden, müsste zudem ein Temperaturverlauf am Nanoteilchen bzw. der Anordnung der Nanoteilchen angenommen werden. Hier wurde lediglich eine konstante Temperatur angenommen.

Wie schon mehrfach erwähnt beinhaltet Gleichung (2.3.26) keine Materialantwort des SiC's, sodass Leistungsabfälle in der Abstandsabhängigkeit zu beobachten sind. Die Materialantwort müssten separat zur Leistung hinzuaddiert werden, wodurch sich die Leistung erhöhen wird. Diese wurde im Experiment aus der Veröffentlichung [4] gemessen. Zur genaueren Modellierung der Oberfläche könnte man weitere Veränderungen abseits der Temperatur vornehmen, die hier auf dem absoluten Nullpunkt läge. Dazu könnte man eine Struktur der Oberfläche erlauben, die z.B. die Rauigkeit dieser darstellt, was durch Störungsrechnung mitberücksichtigt werden kann. Zudem könnte man die Theorie auf Materialien mit magnetischen Eigenschaften, die hier nicht berücksichtigt wurde, erweitern, wodurch die Green'schen Funktionen \mathbb{G}^{EH} und \mathbb{G}^{HH} hinzukämen.

5 Zusammenfassung

Die hier erarbeitete Theorie soll zum Verständnis der Strahlungsvorgänge im Nahfeld beitragen. Sie ist zwar zur Beschreibung komplexer Situationen noch zu stark vereinfacht, sodass einige Optimierungen vorgenommen werden müssten, die in 4.3 angeführt wurden, kann aber die wesentlichen Vorgänge erklären, die auch in Experimenten zu beobachten sind. Zudem wurde ihre Plausibilität neben dem Vergleich mit Experimenten durch einen Abgleich mit bereits bekannten Formeln wie der Leistung eines Nanoteilchens im Vakuum oder der Zustandsdichte bekräftigt. Eine Schwäche, die vermutlich mit der Materialantwort zusammenhängt, die in Gleichung (2.3.26) nicht vorhanden ist, liegt im starken Abfall der abstandsabhängigen, spektralen Leistung für kleine Abstände $z_p \sim 100$ nm. Damit kann sie dennoch als Alternative zur häufig angewandten und in 4.2 vorgestellten Theorie nach (4.2.5) dienen. Anwendung könnte die hier erarbeitete Theorie in modernen Themengebieten wie bei der Kontrolle resonanter, optischer Antennen, in der Thermophotovoltaik oder bei der Verbesserung von Infrarot- bzw. Temperatursensoren finden. Zugleich erlangt man ein besseres Verständnis über die optischen Eigenschaften von Materialien sowie über ihre Kopplung mit Nanoobjekten.

Literatur


- [1] M. Planck. *The Theory of Heat Radiation*. Dover Books on Physics Series. Dover Publications, 1959.
- [2] D. Polder and M. Van Hove. Theory of radiative heat transfer between closely spaced bodies. *Phys. Rev. B*, 4:3303–3314, 1971.
- [3] S. M. Rytov, Y. A. Kravtsov, and V. I. Tatarskii. *Principles of Statistical Radiophysics 3*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1989.
- [4] A. Babuty, K. Joulain, P.-O. Chapuis, J.-J. Greffet, and Y. De Wilde. Blackbody spectrum revisited in the near field. *Phys. Rev. Lett.*, 110:146103, 2013.
- [5] A. C. Jones and M. B. Raschke. Thermal infrared near-field spectroscopy. *Nano Letters*, 12(3):1475–1481, 2012.
- [6] B. T. O’Callahan, W. E. Lewis, A. C. Jones, and M. B. Raschke. Spectral frustration and spatial coherence in thermal near-field spectroscopy. *Phys. Rev. B*, 89:245446, 2014.

- [7] R. Langkau, W. Scobel, and G. Lindström. *Physik kompakt 2*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2002.
- [8] H. Daniel. *Physik 2*. de Gruyter, 1 edition, 1997.
- [9] S. O. Kasap. *Principles of electronic materials and devices*, volume 2. McGraw-Hill New York, 2006.
- [10] J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics, 2nd Ed.* Wiley, 1975.
- [11] L. W. Li, M. S. Leong, T. S. Yeo, and Kooi. P. S. Electromagnetic dyadic green's functions in spectral domain for multilayered cylinders. *Journal of Electromagnetic Waves and Applications*, 14(7):961–985, 2000.
- [12] L. Novotny and B. Hecht. *Principles of Nano-Optics*. Cambridge University Press, 2006.
- [13] J. E. Sipe. New green-function formalism for surface optics. *J. Opt. Soc. Am. B*, 4(4):481–489, 1987.
- [14] J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics Third Edition*. Wiley, third edition, 1998.
- [15] W. Eckhardt. Macroscopic theory of electromagnetic fluctuations and stationary radiative heat transfer. *Phys. Rev. A*, 29:1991–2003, 1984.
- [16] R. Messina, M. Tschikin, S.-A. Biehs, and P. Ben-Abdallah. Fluctuation-electrodynamic theory and dynamics of heat transfer in systems of multiple dipoles. *Phys. Rev. B*, 88:104307.
- [17] S. Albaladejo, R. Gómez-Medina, L. S. Froufe-Pérez, H. Marinchio, R. Carminati, J. F. Torrado, G. Armelles, A. García-Martín, and J. J. Sáenz. Radiative corrections to the polarizability tensor of an electrically small anisotropic dielectric particle. *Opt. Express*, 18(4):3556 – 3567, 2010.
- [18] A. Manjavacas and F. J. García de Abajo. Radiative heat transfer between neighboring particles. *Phys. Rev. B*, 86:075466, 2012.
- [19] J. P. McClure and R. Wong. Multidimensional stationary phase approximation: boundary stationary point. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 30(2):213 – 225, 1990.
- [20] C. F. Bohren and D. R. Huffman. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim, Germany, 1998.

- [21] K. Joulain, P. Ben-Abdallah, Chapis. P.-O., A. Babuty, and C. Henkel. Strong tip-sample coupling in thermal radiation scanning tunneling microscopy. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 136:1 – 15, 2014.
- [22] K. Joulain, R. Carminati, J.-P. Mulet, and J.-J. Greffet. Definition and measurement of the local density of electromagnetic states close to an interface. *Phys. Rev. B*, 68:245405, 2003.
- [23] J. Le Gall, M. Olivier, and J.-J. Greffet. Experimental and theoretical study of reflection and coherent thermal emission by a sic grating supporting a surface-phonon polariton. *Phys. Rev. B*, 55:10105–10114, 1997.
- [24] H. G. Tompkins and E. A. Irene. *Handbook of Ellipsometry*. Springer Berlin Heidelberg, 2005.
- [25] N.W. Ashcroft and D.N. Mermin. *Festkörperphysik*. Oldenbourg Wissenschaftsverlag, 2012.
- [26] J.-P. Mulet, K. Joulain, R. Carminati, and J.-J. Greffet. Nanoscale radiative heat transfer between a small particle and a plane surface. *Applied Physics Letters*, 78(19):2931–2933, 2001.
- [27] F. A. Johnson. Lattice absorption bands in silicon. *Proceedings of the Physical Society*, 73(2):265, 1959.
- [28] D. Chandler-Horowitz and P. M. Amirtharaj. High-accuracy, midinfrared refractive index values of silicon. *Journal of Applied Physics*, 97(12):123526, 2005.
- [29] M. A. Green. Self-consistent optical parameters of intrinsic silicon at 300k including temperature coefficients. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 92(11):1305 – 1310, 2008.
- [30] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and Laloë. *Quantenmechanik Band 1*. Walter de Gruyter, fourth edition, 2009.
- [31] A. Jarzembski and K. Park. Finite dipole model for extreme near-field thermal radiation between a tip and planar sic substrate. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 191:67 – 74, 2017.

Hiermit versichere ich, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe. Außerdem versichere ich, dass ich die allgemeinen Prinzipien wissenschaftlicher Arbeit und Veröffentlichung, wie sie in den Leitlinien guter wissenschaftlicher Praxis der Carl von Ossietzky Universität Oldenburg festgelegt sind, befolgt habe.

Unterschrift

A handwritten signature in cursive script, reading "Florian Kell". The signature is written in dark ink on a white background.