

1 TIDLIGERE NOTATER

To unzip a ".tgz"-file in linux:

```
tar xvfz path/file.tgz
```

For å lese linux filer:

```
less text.txt
```

(q for quit/å avslutte). For å lage en peker til en executable i en annen mappe (skapt til bruk i hvilken som helst annen mappe), skriv

```
ln -s RelativePath/yourExecutable .
```

For eksempel med GRANFILM:

```
ln -s ../Src/GranFilm .
```

For å kjøre GRANFILM:

```
./GranFilm -p inputParameters.sif -o outputFile.dat
```

A simple easy plotting program is XMGRACE. I think this assumes data with x-axis at column 1 and everything else on the other columns. Run by typing:

```
xmgrace dataFile.dat
```

or (if you want to plot all the data in the file)

```
xmgrace -nxy dataFile.dat
```

2 OPPSUMERING MØTE 30.APRIL

2.1 PLOTTING MED PYTHON

For å lese filer med python er det best å bruke `numpy.loadtxt(file.dat)`.

2.2 TRUNCATION RATIO

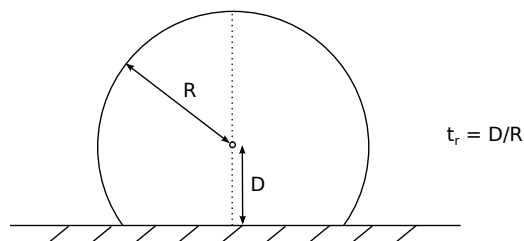


Figure 2.1: The geometrical meaning of the truncation ratio.

2.3 RUNNING GRANFILM WITH -PY OPTION

Skriv

```
./GranFilm
```

for å se hvilke parametere/flag du kan kjøre programmet med.

Ved å bruk flagget `-py`, e.g.:

```
./GranFilm -py -p parameters.sif -o output.dat
```

får man ekstra "output"-filer, blant annet `output.dat_RefTrans`, se Tabell 2.1.

Table 2.1: Eksempel på ekstra output data `output.dat_Ref`. Fresnel dataen er hva refleksjons koeffisienten er hvis substratet hadde vært bart (flatt, uten dråper)

r_p		r_p fresnel	
$\Re\{r_p\}$	$\Im\{r_p\}$	$\Re\{r_p \text{ fresnel}\}$	$\Im\{r_p \text{ fresnel}\}$
↓	↓	↓	↓

3 OPPSUMMERING MØTE 1.MAI

3.1 MÅL MED OPPGAVEN

Ha thermochromst materiale som coating, enten som granular layer eller som coating utenpå et metallisk granular layer. Dette skal kunne "smøres" på en bygning/vinduer/el. slik at f.eks varmestralingen slippes inn om vinteren når det er kalt ute og reflekteres om sommeren når det er varmt ute.

Om denne optiske endringen kan oppnås ved temperaturgradienten for sommer/vinter kan man unngå bruk av aktive løsninger (e.g. bruke spenning for å oppnå tilsvarende optiske egenskaper). Materialene burde også være billig, slik at dette er realiserbart for storskala-prosjekter som store bygninger.

Table 3.1: oppbygningen av ".nk" filene i Sopra-Databasen

unit		startverdi	sluttverdi	antall datapunkter
1	2			
energi[eV]	bølgelengde[μm]	x1[eV/ μm]	x2[eV/ μm]	N

Så ".nk-files" vil være på følgende form:

unit	x1	x2	N
n(x1)	k(x1)		
n(x2)	k(x2)		
n(x3)	k(x3)		
n(x4)	k(x4)		
n(x5)	k(x5)		
n(x6)	k(x6)		
n(x7)	k(x7)		
n(x8)	k(x8)		
n(x9)	k(x9)		
n(x10)	k(x10)		
n(x11)	k(x11)		
.	.		
.	.		
.	.		

Eksempel: "mgo.nk" i eV, startverdi: 0.65eV, sluttverdi: 10eV og består av totalt 400 datapunkter:

1	0.65	10	400
1.70969699	0.00000011		
1.71065583	0.00000011		
1.71155117	0.00000011		
1.71239613	0.00000011		
1.71313635	0.00000011		
.	.		
.	.		
.	.		

3.2 VIDERE ARBEID MED OPPGAVEN

- Jeg skal finne data på thermochrome dielectrisitetskonstanter og laga en database basert på dette. Dette skal bli matet inn i GRANFILM.
- Output burde kanskje være konturplot (for å lettere lese av verdiene, ihvertfall sammenlignet med 3D-plot)
- Les artikler og finn "teori" for å beskrive $\epsilon(\omega, T)$, men hovedsakelig for å finne data for $\epsilon(\omega, T)$.

4 OPPSUMERING E-POST 11. JULI

- Anngående dielektriske data: min forståelse av dataen i .nk-fila er riktig. MEN(!), dataen må være ekvidistansert og helst som kompleks brytningsindex $\hat{n} = n + i\kappa$. HUSK OGSÅ(!), at n,k-verdier i hver linje i ".nk" filen svarer til samme x-verdi. Jeg må også være oppmerksom på at det finnes to konvensjoner for tid-savhenigheten til kompleks brytningsindex:

$$e^{-i\omega t} \quad \text{og} \quad e^{+i\omega t} \quad (4.1)$$

Vi bruker førstenevnte (ift. GRANFILM), som betyr at positiv imaginærdel til epsilon betyr absorpsjon ($\Im\{\epsilon\} > 0$). (*?er dette påkverd for at det skal være fysisk, type: ingen materialer avgir energy?*). Jeg må derfor passe på at dataen jeg konverterer har riktig fortegnskonvensjon (elektroingeniører bruker typisk motsatt av oss).

- Kompleks brytningsindeks $\hat{n} = n + i\kappa$ for et ikke magnetisk materiale er definert via

$$\hat{n} = \sqrt{\hat{\epsilon}(\omega)}, \quad \text{with } \text{Im}\{\hat{n}\} = \kappa > 0, \quad (4.2)$$

med vår fortegnskonvensjon.

- I oppgaven burde jeg klare å lese inn dielektriske data for noen termokromme materialer for ulike temperaturer, samt regne ut hvordan refleksjons egenskapene endrer seg med temperatur i det interessante området ved hjelp av GRANFILM. Jeg må også diskutere hva disse resultatene betyr.

I tillegg til de eksperimentelle dataene, kan det muligens være av interesse å bruke modeller for $\epsilon(\omega, T)$ om jeg klarer å finne en slik model.

5 OPPSUMMERING E-POST 5. AUGUST

5.1 DIVERSE

- Ift. ".nk"-filen for luft er $\varepsilon(\omega) = 1$, $\forall \omega$, og kan derfor brukes sammen med annen data uansett energi/bølglengde intervall.

SiO₂ derimot, er svakt dispersiv og kan bare brukes med annen data i det overlappende intervallet. Altså, dette er et problem for simuleringer i intervaller der data for en eller flere materialer mangler.

- For å finne hvor feilmeldinger i programmet kommer i fra, kan feilmeldingen søkes opp via:

```
~/Fortran/Projects/Scattering2D/GranFilm/HG/Src tux => grep -in "too few points to spline" *.f90
```

```
SFL_Interpolation.f90:437:      write(*,*) 'too few points to spline'
```

(I dette tilfellet var 'too few points to spline' feilmeldingen).

5.2 PLASMONER

- Peakene i "polarizability" størrelsene α_{\perp} og α_{\parallel} er resonanser, og noen av dem er "localized surface plasmons" (som er dipol resonanser); Andre resonanser er quadrupole resonanser etc...
- I tilfellet av en granulær overflate blir både bulk- og overflate-plasmoner eksitert.
- "Localized surface plasmons" ikke kan eksiteres på en plan overflate. Metallpartikler, som er så små at den aktuelle frekvensen får et felt inne i partikkelen, altså at størrelsen på partiklen ikke er større enn typisk skinndybde for frekvensen, kan derimot skape localized surface plasmons.
- "The choice of reference Fresnel surface"/"choice of separation surface" i GRANFILM-artikkelen handler bare om valg av referansesystem/coordinatsystem.

6 OPPSUMERING FRA SKYPE 13. AUGUST

- GRANFILM produserer komplekse amplituder. Igjenom hoved-outputfilen gir det ut $\Delta R/R$ osv... Denne filen inneholder størrelsene som avhenger av den valgte polarisasjonen ('s'/'p'). Den gir også ut "uoffisiell output" (eller hva nå enn Ingve sa) som inneholder data som ikke koster noe spesielt ekstra å gi ut. Dataen fås ut ved å legge til et ekstra '-py' flag når man kjører GRANFILM og lagres i en fil med samme navn som hoved-outputfilen men med en ekstra ende: '_RefTrans'. Resultatene i denne filen er uavhengig av om valget du velger 's' eller 'p' som input. Her ligger både r_p og r_s for de granulære overflatene, i tillegg til de samme størrelsene for en tilsvarende flat-overflate (altså uten sphærene) og kalles 'r_p fresnel' og 'r_s fresnel'. OBS! Hver størrelse er gitt ved realdel og kompleks del.

Om jeg forstod Ingve riktig, er disse størrelsene er amplitude-størrelser: Anta p-polarisert bølge med amplitude E_i , da er reflektert amplitude

$$E_r = r_p E_i$$

og

$$E_r E_r^* = r_p r_p^* E_i E_i^*$$

$$|E_r|^2 = |r_p|^2 |E_i|^2$$

$$I_r = R_p I_i$$

En annen viktig ting: Anngående plotting og til plott til rapporten: **bruk større font! dette burde fikses med en gang.**

- **Oppgaver:** Ta for deg et glass substrat (SiO_2), MgO eller alumina Al_2O_3 (et rent dielektrikum substrat som er temperatur uavhengig), vakuum rundt og termokromme sphærer (Se Figur 6.1). Bruk dataen i området $\sim 1\text{eV}$ - 4eV (den fra Kang 2012) som ditt termokromme materiale.

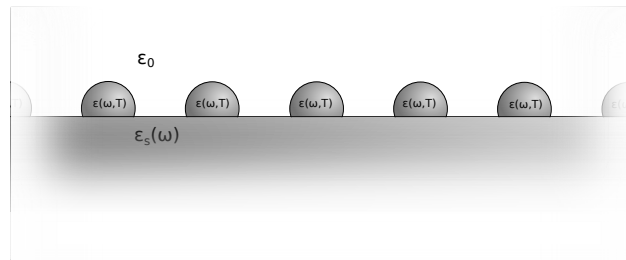


Figure 6.1

1. **Sjekk at resultatene dine er fornuftige igjenom teorien for en flat overflate.** Altså, bruk de teoretiske fresnel koeffisientene for en flat overflate med dielektrisitet dataene dine og sammenlign dette med dataen du har fått ut fra GRANFILM.

2. **Plot $\Delta R/R$ for alle temperaturer gitt i Kang.**

Her er litt informasjon om $\Delta R/R$:

- $\Delta R/R$ gir den relative endringen i R i forhold til en flat overflate.
- Om den tynne filmen ikke oppfører seg annerledes enn en flat overflate vil $\Delta R/R$ være lik 0.
- Med andre ord, $\Delta R/R$ gir bidraget fra de sphæriske kulene. ?Hvordan de kollektivt endrer refleksjonen.

- Om $\Delta R/R > 0$ (positiv) bidrar den granulære filmen til større refleksjon.

Om $\Delta R/R < 0$ (negativ) bidrar den granulære filmen en reduksjon av refleksjonen.

$\Delta R/R = 1 \rightarrow$ dobbelt refleksjon sammenlignet med flat overflate.

$\Delta R/R = 0 \rightarrow$ ingen forskjell fra flat overflate.

- resonanser \rightarrow hvilken avhenger av ε
 - Hvis det er mye "dynamikk" i denne dataen \rightarrow da blir ε viktigere (og motiverer neste oppgave?).
3. For en gitt energi (f.eks $E = 3.5$ eV) vil du ha data for permittivitet ε for flere temperaturer. **Plot** $\varepsilon(\omega, T)|_{\omega=\omega(3.5\text{eV})}$ **og sjekk om denne er forholdsvis glatt.** (altså plott permittivitet for gitt energi som funksjon av temperatur) Hvis ja kan denne dataen interpoleres med temperatur og gjøres for alle energier.
 4. **Interpoler den dielektriske dataen i energi og temperatur og prøv å lag et 2D konturplot: et plott for $\text{Re}[\varepsilon]$ og et for $\text{Im}[\varepsilon]$.**

7 FRA SAMTALER ~ 20. AUGUST

- Lyset burde ligge i området 150nm - 200nm i følge Ingve.
Dataen min fra Kang et al. 2012 ligger i området 0,761-3,987 eV, tilsvarende 311.0-1629.2nm.
- Med den gitte bølgelengden burde radiusen kanskje ligge på omtrent ~ 10 -15nm. (Pga. quasi-static approximation: $\lambda \gg r$)
Basert på det jeg ved selv:
Basert på det over virker det som om partikkel radiusen ikke burde overgå ca. 10% av størrelsen til bølgelengden. Siden dataen min ligger i området 311.0-1629.2nm vil dette kunne tillate meg partikkelstørrelser opp til 30nm. Å ligge godt innenfor området vil trolig være lurt uansett, siden 1%-5% av bølgelengden vil være intervallet rundt 3-15nm. Dette samsvarer også med intervallet han har gitt meg.
- avstanden mellom sentrum til sentrum (lattice constant a) burde være større en cirka 2,5-3 ganger radiusen til partiklene, i.e.

$$a > 3R, \quad (\text{tommelfingerregel}) \quad (7.1)$$

for å unngå for kraftig interaksjon mellom partiklene (?og det er kunn blitt tatt hensyn til dipol interaksjon mellom partiklene, type pertubasjon, så størrelsen/pertubasjonen pga de andre partiklene burde ikke være for stor?).

- $\Delta R/R$ gir den totale refleksjonen fra alle effekter. Å se på polarisibiliteten kan hjelpe å se hvordan resonansene kommer fra effekter som er forholdsvis vinkelrett eller parallel med overflaten (vektorstørrelse) og gir mer detaljert informasjon enn refleksjonen alene.