

مدل سازی پاسخ اپتیکی نانوذرات پلاسمونی

یگانه رنجوری و حمید نجاری*

گروه فیزیک دانشگاه زنجان، زنجان

* پست الکترونیکی: nadjari@znu.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۲/۱۱/۰۱؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۲/۱۱/۱۵)

چکیده

پاسخ اپتیکی نانوذرات پلاسمونی طلا و نقره به موج تخت فرودی با شدت $\frac{W}{cm^2}$ ۱۳/۳ برای دو ساختار هندسی کره کامل و یک چهارم کره در گستره ۱ تا ۵۰۰ نانومتر مدل سازی شده است. معادله هلمهولتز با روش FEM و با اعمال شرایط مرزی PEC و PMC با انتخاب مش بندی مناسب، برای هر یک از ساختارهای هندسی به طور مستقل حل شده و طیف های جذبی و پراکندگی به دست آمده اند. الگوی پراکندگی برای نانوذرات طلا در شعاع های انتخابی ۲۰، ۵۰، ۸۰، ۱۰۰ و ۵۰۰ nm نشان می دهد کمینه شدت پراکندگی برای سه شعاع اول به ترتیب در زاویه های ۹۰، ۸۵ و ۶۵ درجه اتفاق می افتد و با افزایش شعاع کمینه های مربوطه از زاویه ۹۰ درجه فاصله گرفته تعداد آنها نیز افزایش می یابد. مدل سازی در شعاع های بالاتر از ۱۰۰ نانومتر نانو جت های پلاسمونی تولید می کند و در شعاع های کمتر از ۳۰ نانومتر رفتار دوقطبی بروز می کند. محدوده شعاعی بیشترین تقویت سطحی میدان الکتریکی برای نانوذرات نقره را تعیین کرده ایم. کوک پذیری مکان SPR با ثابت دی الکتریک محیط و شعاع نانوذرات را بررسی و نشان داده ایم جابه جایی قرمز برای نانوذرات ۵، ۱۰، ۱۵، ۲۰، ۲۵ و ۳۰ نانومتری به ترتیب برابر ۵۶، ۷۲، ۲۰۶، ۲۳۲، ۲۵۲ و ۲۶۲ نانومتر است.

واژه های کلیدی: نانوذرات پلاسمونی، طیف جذبی، تابع دی الکتریک، تقویت میدان نزدیک، الگوی میدان دور

۱. مقدمه

سال ۱۹۵۶ توسط دیوید پاینز^۱ برای توصیف کوانتوم برانگیزش به تراز بالا مطرح شد [۹]. این برانگیختگی ها مرتبط با حرکت جمعی الکترون ها با بسامد بالا هستند. بعدها این اصطلاح برای تشدید پلاسمون های سطحی SPR^۲ مورد استفاده قرار گرفت. اصطلاحات اضافی «محلی» و «پلاریتون» مربوط به پلاسمون های غیرقابل انتشار در نانوذره ای است که با ابزارهای نوری برانگیخته می شود. این توضیحات برای جلوگیری از سردرگمی مفهومی با انتشار پلاسمون های سطحی در لایه های نازک و همچنین پلاسمون های تحریک شده توسط الکترون های سریع ضروری هستند. SPR اساس خواص نوری منحصر به فرد نانوذرات فلزی

امروزه شبیه سازی های پراکندگی نور به عنوان بخش جدایی ناپذیری از روش های مشخصه یابی و شناسایی نانوذرات جدید در آمده است. نظریه مای و روش های کامپیوتری وابسته به آن برای بررسی مسئله پراکندگی از سطح نانوذرات کروی و غیر کروی که ابعاد آنها در حدود طول موج نور فرودی است در دهه اخیر پیشرفت چشم گیری داشته است. این پیشرفت مدیون توسعه و پیشرفت الگوریتم های کامپیوتری و همچنین سخت افزارهای وابسته به آن است [۱-۸]. اصطلاح پلاسمون در

۱. David Pines

۲. Surface plasmon Resonance

یکدیگر وابسته‌اند. بررسی نمودار تغییرات ϵ_1 و ϵ_2 برای فلزات پلاسمونی برحسب طول موج در بازه ۲۰۰ تا ۱۰۰۰ نانومتر که طی آن طیف طول موجی، محدوده فرابنفش، مرئی و فرو قرمز را پوشش می‌دهد از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. از طرف دیگر بخش حقیقی n و بخش موهومی k ضریب شکست مختلط N برای فلزات پلاسمونی توسط محققین بسیاری به طور تجربی به دست آمده است [۱۴].

موج الکترومغناطیسی پس از ورود به محیط فلزی به سرعت میرا می‌شود و در فاصله کوتاهی به نام عمق پوسته از بین می‌رود. بزرگی عمق پوسته توسط معادله $\delta = Re(-k_z^* \epsilon_m)^{-1/2}$ به تابع دی‌الکتریک مختلط فلز ϵ_m مربوط می‌شود. نظریه‌ی مای برای توضیح طیف جذبی نانوذرات فلزی به طور کیفی و کمی، به صورت گسترده مورد استفاده قرار گرفته است. ظاهراً اولین محاسبات در زمینه نظریه لورنتز-مای برای کره‌ای که در یک محیط جاذب غوطه‌ور است برای توسط ماندی و دیگران [۱۵] ارائه شده است. آنها نشان داده‌اند که جذب محیط دربرگیرنده می‌تواند الگوی پراکندگی کره را تغییر دهد. برای ذرات بزرگ‌تر که تقریب دوقطبی کفایت نمی‌کند تشدید دوقطبی به اندازه ذره بستگی دارد. نظریه مای برای محیط‌های مغناطیسی که شامل پذیرفتاری مغناطیسی غیرصفر ($\mu \neq 0$) هستند توسط کرکر و دیگران [۱۶] ارائه شده است. یک کد مفید دیگر برای پراکندگی توسط کره‌ای که پذیرفتاری آن با پذیرفتاری محیط اطراف متفاوت است به زبان متلب توسط کریستین متزلر^۲ نوشته برای شده است [۳ و ۱۷].

روش‌های عددی برای حل معادلات ماکسول حاکم بر این مسئله از تنوع زیادی برخوردار هستند. تقریب دوقطبی گسسته ^۳DDA اولین بار توسط پورسل و پنی‌پاکر برای مطالعه دانه‌های گردوغبار بین‌ستاره‌ای مطرح شد. متعاقباً در این و فلاتو از این روش برای مطالعه پلاسمون‌های سطحی جایگزیده و اندازه‌گیری ضریب جذب و پراکندگی نور توسط هدفی با شکل دلخواه استفاده کردند [۱۸]. روش DDA یک تکنیک عددی است که امکان محاسبه جذب و پراکندگی

است. نانوذرات طلا که SPR آنها در انرژی فوتون $hv = \frac{2}{4} ev$ ، معادل با طول موج $\lambda = 517 nm$ قرار دارند نورهای سبز را جذب می‌کنند و در نتیجه، نانوذرات به رنگ مکمل آن یعنی قرمز ظاهر می‌شوند [۱ و ۱۰].

برانگیخته کردن یک SPR با تقویت میدان موضعی همراه است که کاربردهای وسیعی در طیف‌سنجی رامان تقویت شده سطحی (SERS)، فلورسانس تقویت شده سطحی (SEF)، سطوح ساختاری و میکروسکوپ‌های هم‌کانون دارند. از این تکنیک برای افزایش کارایی سلول‌های خورشیدی و همچنین برای بررسی ساختار سطوح نیز بهره‌برداری می‌شود [۱۱]. بنا بر مزایای مذکور نانوذرات طلا و نقره در دو دهه گذشته به شدت مورد بررسی و مطالعه قرار گرفته‌اند [۱۲ و ۱۳]. هر دو فلز SPRهای شاخصی را در ناحیه مرئی نشان می‌دهند و در شرایط محیطی پایدار هستند. علاوه بر این، نانوذرات طلا با شعاع بالای $R \geq 5 nm$ بسیار بی اثر هستند. برای اکثر فلزات دیگر، مانند آلومینیوم، مس، یا پلاتین، SPRها در ناحیه فرابنفش قرار دارند و یا به شدت توسط گذارهای میان‌نواری که انرژی فوتون مشابه یا کمتری دارند تضعیف می‌شوند. در برخی از این مواد مشروط بر آن که نانوذرات بسیار بزرگ یا غیر کروی باشند، یا نانوذراتی در محیط‌هایی با ضریب شکست بالا قرار داشته باشند SPRها قابل مشاهده هستند [۲]. نانوذرات طلا و نقره مواد اصلی هستند که به دلیل پایداری و SPR برجسته آنها در ناحیه مرئی، برای کاربردهای مذکور بسیار مناسب هستند. به همین دلیل، ما در این تحقیق بر روی نانوذرات طلا و نقره با اندازه‌های بین ۱ تا چند صد نانومتر تمرکز می‌کنیم. برای اندازه‌های کوچک‌تر، ماهیت گسسته حالت‌های اتمی بروز می‌کند.

خواص اپتیکی مواد پلاسمونی اغلب توسط دو کمیت بیان می‌شود، ضریب شکست مختلط N و تابع دی‌الکتریک مختلط ϵ_m . بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک $Re(\epsilon_m)$ منفی است و بخش موهومی آن $Im(\epsilon_m)$ مثبت بوده بزرگی آن بین ۰ تا ۶ تغییر می‌کند [۱]. این کمیت‌ها علاوه بر این که به بسامد و اندازه ذرات بستگی دارند خود نیز توسط معادله $\epsilon_m = N^2$ به

1. Mundy et al
2. Christain Mätzler
3. Discrete Dipole Approximation

۲. بهره‌مندی از کامسول

کامسول در اصل یک مجموعه کامل شبیه‌سازی است که می‌تواند در یک محیط شبیه‌سازی معادلات دیفرانسیل را به روش اجزای محدود FEM حل کند. زمینه‌های استفاده این نرم افزار بسیار گسترده بوده و مسائل مختلف از جمله اپتیک، حرارت و ترمودینامیک، پلاسما، الکترومغناطیس و آکوستیک را در بر می‌گیرد. در این نرم‌افزار امکان اصلاحات مربوط به تأثیر اندازه نانوذرات در توابع دی‌الکتریک توده‌ای وجود دارد. همچنین می‌توان از مدل‌های پراکندگی پیش فرض، نظیر مدل پراکندگی درود-لورنتس و یا نظریه دبی استفاده [۲۴-۲۵] کرد.

برای استفاده از نرم افزار کامسول، ابتدا باید مشخصات مسئله مورد نظر را توسط "افزودن فیزیک" تعریف کنیم. سپس برای حل معادلات ماکسول ماژول امواج الکترومغناطیسی در دامنه بسامد (ewfd) را اضافه کرده و درگام بعدی باید ابعاد مسئله را مشخص کنیم. تقارن مسئله ممکن است یک بعد، دو بعد و یا سه بعد را در بر گیرد. در این مدل‌سازی، نانوذرات سه بعدی هستند. از آنجایی که مدل‌سازی برای نانوذرات انجام می‌شود بهتر است یکای انتخابی برای شعاع و ابعاد هندسی از ابتدا روی nm تنظیم شود. پس از ایجاد یک فضای مطالعه مناسب در محیط مقدماتی کامسول باید مسئله خود را به صورت گرافیکی در محیط اصلی کامسول شبیه‌سازی کنیم. برای این منظور، باید ۴ گام اساسی برداشت.

گام اول: شامل تعریف پارامترها و متغیرهای ضروری و وارد کردن مقادیر آنها.

گام دوم: شامل تعریف اشکال هندسی مورد استفاده است، در اینجا با توجه به شکل نانو ساختار، هندسه لازم ایجاد می‌شود. گام سوم: شامل انتخاب جنس اشکال تعریف شده است که می‌توان از کتابخانه کامسول استخراج کرد و یا آن را با شرایط مورد نیاز مسئله توسط کامسول تولید کرد.

گام چهارم: با مشخص کردن فضای هندسی گام چهارم برداشته می‌شود. مشخص کردن باید به گونه‌ای باشد که در قسمت‌های مختلف ساختار هندسی محاسبات با دقت لازم انجام شود و در

اپتیکی از نانوذراتی با شکل هندسی دلخواه و جهت‌گیری خاص را فراهم می‌سازد. روش $FDTD$ به‌طور مستقیم معادلات ماکسول را حل می‌کند و نیازی به تعریف پتانسیل‌ها ندارد. در این روش، نمونه‌برداری از فضای مورد بررسی برای محاسبه E و H در یک پریود زمانی صورت می‌گیرد. نمونه‌برداری در تفکیک زیر طول موج است که بسته به محدوده بسامدی مورد نظر تعیین می‌شود. به‌طور معمول ۱۰ تا ۲۰ نمونه برای هر طول موج لازم است. گام زمانی طوری انتخاب می‌شود تا پایداری عددی الگوریتم ارضا شود [۱۹]. روش اجزاء محدود، موسوم به روش FEM ^۲، برای اولین بار در دهه ۱۹۴۰ [۲۰] معرفی شد. اجزاء محدود روشی است عددی برای حل تقریبی معادلات دیفرانسیل جزئی و نیز حل معادله‌های انتگرالی. در اواخر دهه ۱۹۶۰ با مقالات سیلوستر [۲۱]، آرتل و همکاران [۲۲] روش اجزای محدود برای پرداختن به کاربردهای مربوط به موجبر و تحلیل حفره در شاخه‌ای از مهندسی برق معرفی شد. این روش یک تکنیک عددی است که معادلات دیفرانسیل جزئی را با گسسته‌سازی آن به عناصر مثلثی محدودتر برای تولید یک سامانه معادلات دیفرانسیل معمولی حل می‌کند. در دهه‌های اخیر، FEM به‌طور گسترده در مسائل الکترومغناطیسی عمدتاً برای حل مجموعه‌ای از معادلات ماکسول با شرایط مرزی مناسب استفاده شده است [۲۳].

در این مدل‌سازی، پراکندگی یک موج تخت از سطح نانوذرات پلاسمونی محاسبه می‌شود. این پراکندگی برای بسامدهایی محاسبه می‌شود که در آن ناحیه، نانوذره گذردهی مختلط منفی دارد. نانوذراتی به شعاع $R = 100\text{nm}$ با یک موج تخت روشن می‌شود. محدوده بسامد اپتیکی منطبق با طول موج‌های ۴۰۰ الی ۷۵۰ nm است. در این محدوده نانوذرات گذردهی الکتریکی مختلط با مؤلفه‌های حقیقی و موهومی هستند ولی محیط اطراف فاقد ثابت دی‌الکتریک موهومی است. در ناحیه طول موجی مذکور عمق پوسته بین ۲۷ تا ۴۴ nm تغییر می‌کند که طی اجرای برنامه، مقادیر تولید شده کنترل و بازبینی می‌شوند.

مربوطه نشان می‌دهند در اغلب موارد مقادیر توده‌ای با مقادیر متناظر برای نانوذرات تفاوت فاحشی ندارند. نتایج مدل‌سازی نانوذرات پلاسمونی شامل محاسبه سطح مقطع‌های جذب، پراکندگی و خاموشی و همچنین تقویت میدان الکترومغناطیسی در محیط اطراف آنها، با حل معادله هلمولتز و اعمال شرایط مرزی مناسب به دست می‌آید.

همانگونه که ذکر شد دو ساختار هندسی برای حل وجود دارد، که در هر دو هندسه لایه‌ای برای تعریف محیط اطراف لایه‌ای برای PML در نظر گرفته می‌شود. در مورد اخیر ضخامت نصف طول موج در فضای آزاد است. این لایه کاملاً سازگار در محیط اطراف کره به عنوان جاذب میدان پراکنده عمل می‌کند، بنابراین نباید در محدوده فعالیت پراکنده کننده میدان‌های الکتریکی قرار داشته باشد و معمولاً اگر به اندازه نصف طول موج دورتر باشد کفایت می‌کند. هندسه یک چهارم شامل ۵ ناحیه حجمی و ۲۰ سطح مرزی و هندسه کامل شامل ۱۰ ناحیه حجمی و ۳۶ سطح مرزی است. از هر دو ساختار هندسی برای تولید نمودارهای خروجی استفاده می‌شود. نمودارها باید همخوانی داشته باشند، اگرچه زمان اجرای برنامه در هندسه کامل بیشتر است ولی نتایج یکسان هستند.

در این تحقیق، الگوی پراکندگی میدان‌های دور و نزدیک عمدتاً در محیط‌های هوا و آب محاسبه و مقایسه می‌شوند. سطح مقطع‌های جذب، پراکندگی و خاموشی به دست آمده و نمودارهای لازم ترسیم می‌شوند و نقش ثابت دی‌الکتریک محیط در جابه‌جایی قرمز مورد مطالعه قرار می‌گیرد.

۱.۳ حل معادلات هلمولتز

نانو ذره در یک محیط غیر جاذب با تابع دی‌الکتریک نسبی ϵ_1 محصور شده است و توسط یک میدان فرودی $E_b(t)$ برانگیخته می‌شود. اگر موج تخت فرودی در راستای z منتشر شود و قطبش آن در راستای محور z باشد، دامنه موج فرودی E_0 و طول موج آن λ و بردار موج آن $k_1 = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\epsilon_1}$ ، آنگاه می‌توان نوشت:

$$E_b = E_0 e^{(-ik_1 y)} \hat{k} (V/m) \quad (1)$$

که \hat{k} بردار یکانی در امتداد محور Z است. موج پراکنده که با $E_{scd}(r)$ نمایش داده می‌شود در معادله هلمولتز صدق می‌کند

عین حال سرعت محاسبات کاهش چشم‌گیری نیابد. هندسه مسئله شامل یک نانوذره در مرکز و دو لایه هم‌مرکز است که بخش مرکزی برای تعریف خواص اپتیکی نانوذره مورد نیاز است و لایه‌ها برای تعریف PML (لایه کاملاً منطبق) و محیط اطراف نانو ذره مورد نیاز هستند. دو روش حل برای بررسی نانوذرات وجود دارد که تولید هندسه به آن بستگی دارد. روش‌ها عبارتند از انتخاب یک چهارم کره و انتخاب کره کامل. در شکل ۱ هندسه یک چهارم نمایش داده شده است. راستای نور فرودی در انتخاب برش نهایی اثرگذار است.

پس از طی چهار گام ضروری می‌توان نمودارها و خروجی‌های ضروری مسئله را تعریف و برنامه را اجرا کرد. همانگونه که ذکر شد ثابت‌های دی‌الکتریک و عمق پوسته محاسبات سرراستی هستند که بازبینی آنها ما را از مسیر طی شده توسط نرم افزار با خبر می‌کند؛ اگرچه نمودارهای مربوطه مستقیماً در اینجا مورد بحث قرار نمی‌گیرند.

در شکل ۲ هندسه کامل همراه با مش‌بندی آن نمایش داده شده است. باریکه لیزری در امتداد محور x انتشار می‌یابد. این هندسه شامل ۳۶ سطح برای محاسبه انتگرال‌های سطحی و ۱۰ ناحیه برای محاسبه انتگرال‌های حجمی است.

۳. اصول نظری مدل‌سازی خواص اپتیکی نانوذرات

پلاسمونی

در این مدل، مسئله استاندارد پراکندگی الکترومغناطیسی توسط یک ذره را در نظر خواهیم گرفت. معادله دیفرانسیل میدان الکتریکی در حوزه بسامد نوشته شده و با استفاده از روش المان‌های محدود حل می‌شود. این پراکندگی برای بسامدهایی محاسبه می‌شود که در آن ناحیه نانوذره گذردهی مختلط منفی دارد. محدوده بسامدهای اپتیکی منطبق با طول موج‌های ۴۰۰ تا ۷۵۰ nm است.

چنانچه ذکر شد در ناحیه طول موجی مذکور عمق پوسته بین ۲۷ تا ۴۴ nm تغییر می‌کند و با این فرض محاسبه می‌شود که موج تخت فرودی روی سطح تخت تابانده می‌شود لذا مستقیماً برای نانوذرات کروی قابل کاربرد نیستند. این بحث در مورد توابع دی‌الکتریک مختلط آنها نیز صادق است. البته چنانچه نمودارهای

[۲۶-۲۷]. معادله هلمهولتز صدق می کند [۲۶-۲۷].

$$\nabla \times (\mu_r^{-1} \nabla \times \vec{E}_{sca}) - k_o^2 (\epsilon_r - j \frac{\sigma}{\omega}) \vec{E}_{sca} = 0 \quad (2)$$

میدان کل از برهم‌نهی میدان پراکنده و میدان فرودی حاصل می‌شود:

$$\vec{E} = \vec{E}_b + \vec{E}_{sc} \quad (3)$$

برای بحث در نتایج، ویژگی‌های میدان دور و میدان نزدیک را در محاسبات اعمال می‌کنیم.

۳.۲. بردار پوینتینگ و پاسخ نوری یک نانوذره منفرد

هنگامی که نور در یک محیط منتشر می‌شود، انرژی خود را با برهمکنش با ذرات باردار و یا شبکه از دست می‌دهد که به آن اتلاف اهمی گفته می‌شود. سطح مقطع‌های جذب و پراکندگی در واقع پاسخ نانوذرات و محیط در برگیرنده به نور فرودی است که بیانگر اتلاف اهمی و پراکندگی در محیط است.

سطح مقطع جذب عبارت است از انرژی تلف شده در تمام حجم نانوذره تقسیم بر واحد توان فرودی:

$$\sigma_{abs} = \frac{1}{I_{inc}} Q_{abs} = \frac{1}{I_{inc}} \iiint Q_{loss} dV \quad (4)$$

که در آن I_{inc} شدت باریکه فرودی یا همان باریکه تخت زمینه است. σ_{abs} سطح مقطع جذب، Q_{loss} چگالی اتلاف اهمی و Q_{abs} مجموع تلفات اهمی در حجم نانو ذره است. یکای این سه کمیت به ترتیب عبارتند از m^2 ، W/m^3 و W . در صورتی که در مدلسازی از تقارن یک چهارم حجم کره استفاده شود آنگاه داریم:

$$\sigma_{abs} = 4 Q_{abs} / I_{inc} \quad (5)$$

توجه داریم که شدت باریکه فرودی توسط معادله زیر به دامنه آن مربوط می‌شود:

$$I_{in} = (1/2) \epsilon_o n_o C_o E_o^2 = \frac{\sqrt{\epsilon_1}}{2 Z_o} E_o^2 \quad (6)$$

در این معادله

$$Z_o = \sqrt{\mu_o / \epsilon_o} = 376 / \nu$$

مقاومت ظاهری مشخصه^۱ محیط است. از طرف دیگر توان

جذب شده نور فرودی عبارت است از:

$$Q_{loss} = 1/2 \operatorname{Re}[(\sigma E + j\omega D) \cdot E^* + j\omega B \cdot H^*], \quad (7)$$

در این معادله σ و D به ترتیب بردارهای جابه‌جایی، رسانایی الکتریکی و چگالی شار مغناطیسی هستند.

بردار پوینتینگ S نشان دهنده مقدار توانی است که یک موج در جهت انتشار خود حمل می‌کند. میانگین زمانی بردار پوینتینگ به صورت زیر به دست می‌آید:

$$S_{av} = \frac{1}{T} \operatorname{Re}(E \times H^*) \quad (8)$$

بنابراین توان پراکنده شده در یکای سطح برابر است با:

$$S_{sca} = \frac{1}{T} \operatorname{Re}(E_{sca} \times H_{sca}^*) \quad (9)$$

و توان کلی پراکنده شده در سطح S برابر است با:

$$Q_{sca} = \iint S_{sca} \cdot \hat{n} ds = \frac{1}{T} \operatorname{Re} \left[\iint (E_{sca} \times H_{sca}^*) \cdot \hat{n} ds \right] \quad (10)$$

از طرف دیگر، سطح مقطع پراکندگی σ_{sca} عبارت است از نسبت توان کلی پراکنده شده به شدت باریکه فرودی. برای تقارن یک چهارم داریم:

$$\sigma_{sca} = 4 \times Q_{sca} / I_{in} \quad (11)$$

یکای Q_{sca} ، W و یکای σ_{sca} ، m^2 است.

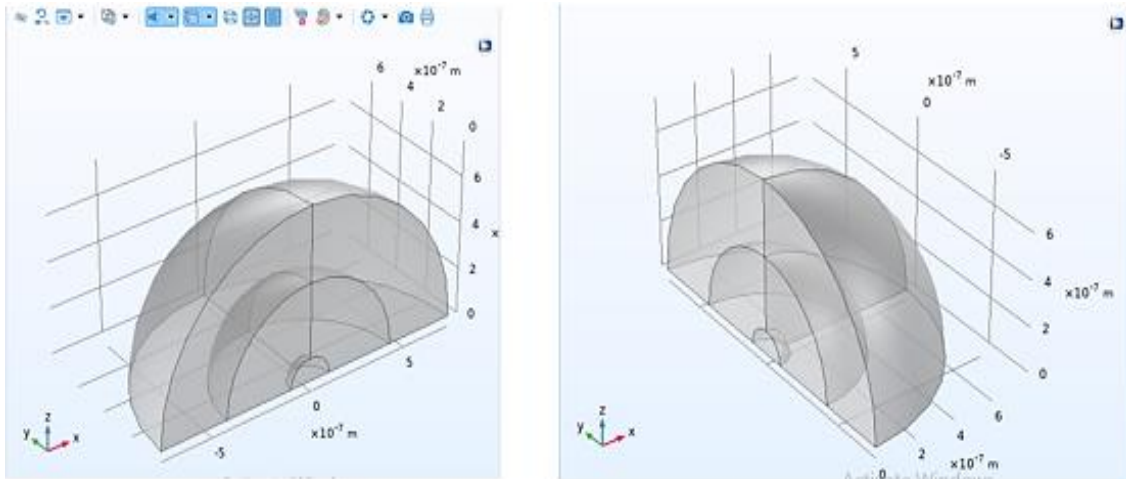
در اینجا تابع دی‌الکتریک محیط برای محاسبه توزیع میدان الکتریکی در نانو ذره، وابسته به بسامد در نظر گرفته شده است، که در محدوده ۴۰۰ تا ۱۲۰۰ نانومتر بر اساس مدل پراکندگی جانسون و کریستی از معادله [۱۴ و ۲۶]:

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_\infty + \sum_{j=1}^M \frac{f_j \omega_p^2}{\omega_{o,j}^2 - \omega^2 + i\Gamma_j \omega} \quad (12)$$

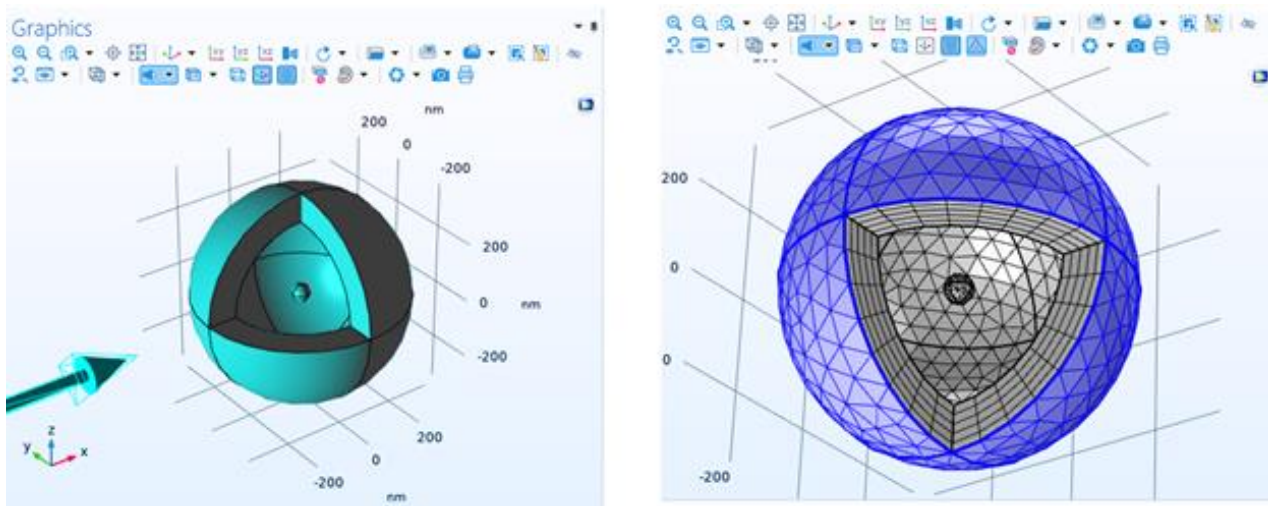
به دست می‌آید که در آن ϵ_r گذردهی نسبی است و ω_p بسامد پلاسمای نانوذره پلاسمونی، ϵ_∞ گذردهی توده‌ای، $\omega_{o,j}$ بسامد تشدید، f_j قدرت نوسانگر و Γ_j ضریب میرایی است.

۳.۳. انتخاب شرایط مرزی PEC و PMC

وقتی معادلات ماکسول را حل می‌کنیم برای برآورده شدن کامل شرایط مرزی در سطح جدایی فلز-دی‌الکتریک باید مجموعه‌ای از شرایط مرزی برای محاسبه ناپیوستگی میدان‌های الکتریکی و



شکل ۱. هندسه ایجاد شده هنگامی که برش در امتداد صفحه yz (راست) و xz (چپ) ایجاد می‌شود. شعاع نانو ذره 100 nm شعاع محیط و لایه PML هر کدام 200 nm است. این هندسه شامل ۵ ناحیه حجمی و ۲۰ سطح مرزی است.



شکل ۲. تولید هندسه دو کره‌ای به شعاع تقریبی 50 nm که در آن جهت انتشار باریکه در راستای محور x است. مش‌بندی این هندسه برای نقاط داخلی (نانوذره، مش بسیار ریز)، همراه با مش‌بندی محیط در برگرفته و لایه PML.

که به آن شرایط مرزی PMC گفته می‌شود. در نهایت اگر هیچ یک از دو شرط بالا به طور کامل برقرار نباشد در مرز دو محیط جذب وجود خواهد داشت. در این وضعیت شرایط مرزی عبارت است از:

$$\hat{n} \times \mathbf{H} = \quad (15)$$

$$\frac{1}{\sqrt{\epsilon_r \mu_r}} [n \times ((n \times \mathbf{E}) + \mathbf{H}_b - (n \times \mathbf{E}_b))],$$

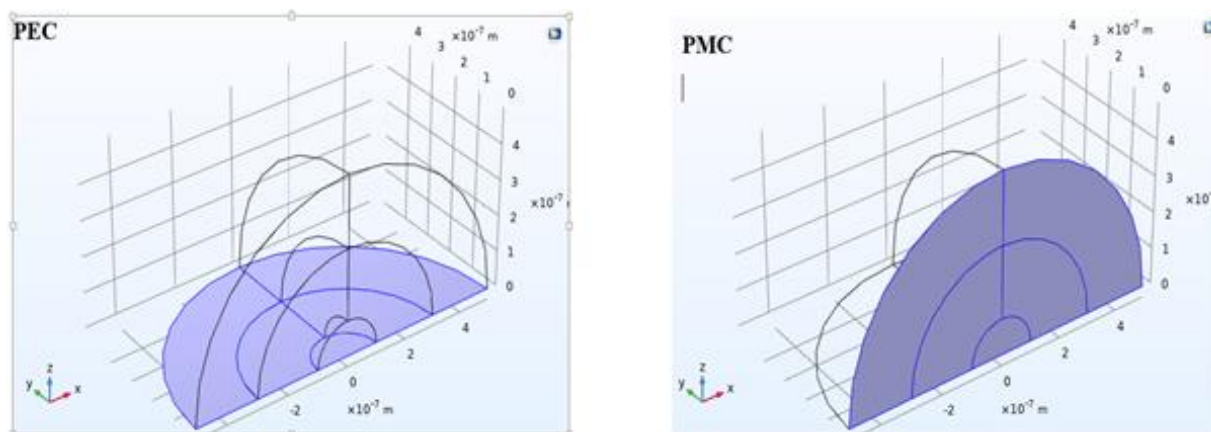
که به آن شرایط مرزی ABC^۱ گفته می‌شود. در این معادله، \mathbf{E}_b و \mathbf{H}_b به ترتیب میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی فرودی هستند. در شکل ۳ شرایط مرزی نمایش داده شده است.

مغناطیسی در مرز بین محیط ۱ و محیط ۲ اعمال شود. در شرایطی که محیط دوم رسانای الکتریکی کامل باشد شرط مرزی به صورت زیر خلاصه می‌شود:

$$\hat{n} \times \mathbf{E} = 0, \quad (13)$$

در این معادله، \hat{n} بردار یکه عمود بر سطح روی مرز است. به معادله (۱۲) شرایط مرزی PEC گفته می‌شود. چنانچه شرط رسانای مغناطیسی کامل برقرار باشد داریم:

$$\hat{n} \times \mathbf{H} = 0, \quad (14)$$



شکل ۳. شرایط مرزی PEC و PMC در نواحی مختلف ایجاد شده در محیط برنامه.

جدول ۱. بزرگی پارامترهای انتخابی در مدل‌سازی (شرایط مرزی PEC و PMC در نواحی مختلف ایجاد شده در محیط برنامه).

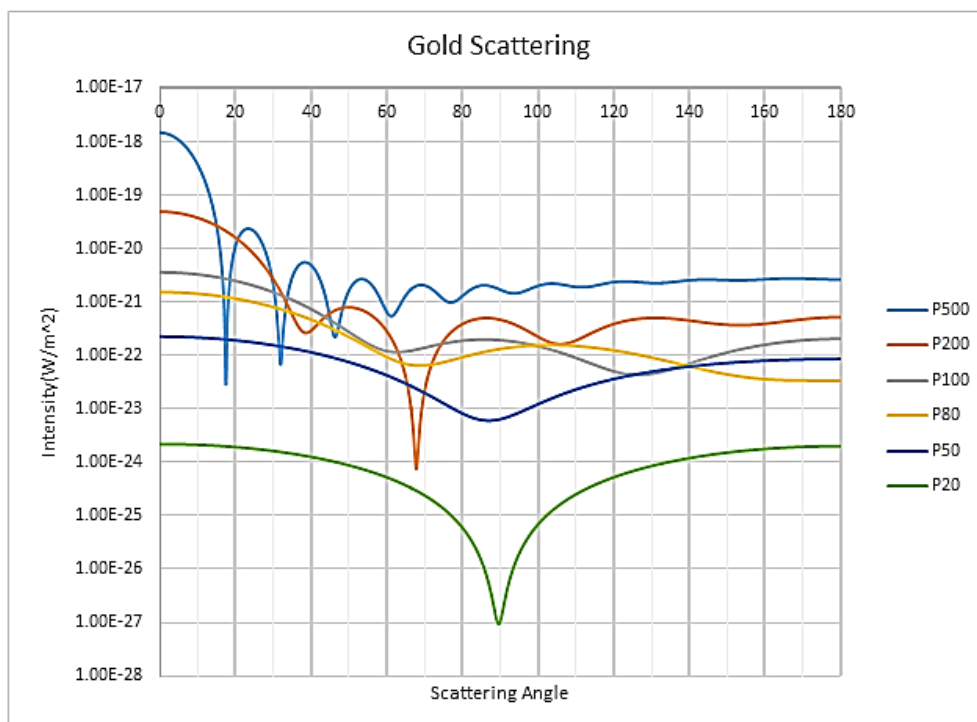
نام	عبارت	مقدار	توصیف
r0	100[nm]	1E-7m	شعاع کره
lda	400[nm]	۴E-7m	طول موج
t_air	Lda/2	۲E-7m	ضخامت هوای اطراف کره
t_pml	Lda/2	۲E-7m	ضخامت لایه PML
hmax	Lda/6	۶/۶۶۶۷ E-۷m	اندازه مش
E0	1[V/m]	۱V/m	میدان الکتریکی
I0	Epsilon0_const*c_const*E0^2	۰/۰۰۱۳۲۷۲W/m ²	شدت باریکه فرودی
n_med	1/33	۱/۳۳	ضریب شکست محیط
f0	c_const/lda	۷/۴۹۴۸ E۱۴m 1/s	پسامد
Ze0	Z0_const	۳۷۶/۷۳Ω	مقاومت ظاهری هوا
S_in	E0^2/(2*Z1)	۰/۰۰۱۷۶۵۷W/m ²	چگالی توان پویینتینگ
Z1	Ze0/sqrt(epsilon1)	۲۸۳/۱۷Ω	مقاومت ظاهری آب
epsilon1	1/77	۱/۷۷	ثابت دی الکتریک هوا

۳.۴. لایه کاملاً منطبق PML

هنگامی که ثابت دی الکتریک محیط مختلط است یک لایه کاملاً منطبق که به آن PML^۱ گفته می‌شود، در اطراف ناحیه فیزیکی مورد نظر تعریف می‌شود، به طوری که با انتخاب مناسب ضخامت لایه، تمام انرژی موج خروجی جذب می‌شود. وقتی انرژی موج برحسب پسامد سنجیده می‌شود هیچ‌گونه عدم تطابق مقاومت ظاهری که باعث بازتاب‌های کاذب در مرز می‌شود وجود نخواهد داشت. مفهوم لایه کاملاً منطبق (PML) به عنوان یک شرط مرزی

جاذب در دستگاه معادلات ماکسول توسط برنگر [۲۸] معرفی شد. PML جذب امواج منتشر شده را بدون وجود انعکاس از سطح جدایی این لایه و فضای فیزیکی مسئله فراهم می‌کند. ابتدا، مدل‌سازی برای یکی از ساده‌ترین ذرات غیرسمی مورد استفاده تجربی، نانوذرات کروی طلا، با الهام از داده‌های نرم افزار کامسول انجام می‌شود. هدف محاسبه سطح مقطع جذب و نمودار تغییرات آن در ناحیه مذکور و تعیین افزایش میدان الکتریکی در سطح نانوذرات در طیف مرئی و پسامدهای نزدیک آن است. پارامترهای انتخابی مطابق جدول ۱ است.

^۱. Perfectly MatchedLayer



شکل ۴. الگوی پراکندگی موج تخت از نانوذرات طلا در محیط آب برای مؤلفه موازی صفحه تابش، صفحه E یا xoz که در شکل از حرف P برای آن استفاده شده است، در طول موج 400 nm . شعاع‌های انتخابی نانوذرات ۲۰، ۵۰، ۸۰، ۱۰۰، ۲۰۰ و ۵۰۰ نانومتر است. مقیاس محور عمودی لگاریتمی است.

در این مرحله، قطبش میدان الکتریکی E در راستای محور z

است و راستای انتشار در جهت محور x است. در این شرایط بردار انتخابی که از معادله (۱) به دست می‌آید متنظراً تنظیم می‌شود. دامنه میدان باریکه فرودی $E_i = 1(V/m)$ انتخاب می‌شود که شدت میدان $I_i = 0.0013(W/m^2)$ را تولید می‌کند.

۴. بحث و نتایج

۴.۱. الگوی پراکندگی و مشاهده نانو فواره پلاسمونی

در شکل ۴ نمودار تغییرات دامنه میدان الکتریکی در نقاط دور برای نانوذره طلا با شعاع‌های مختلف در محیط آب و در طول موج 400 nm نمایش داده شده است. در نواحی دور که شامل محیط در برگیرنده نانوذره از حوالی سطح آن تا ابتدای ناحیه PML می‌شود یعنی حدود 200 الی 250 نانومتر دورتر از نانو ذره، بزرگی دامنه میدان الکتریکی تا $10^{-7}(V/m)$ و بزرگی شدت‌های متناظر تا $10^{(-18)}W/m^2$ کاهش می‌یابد. این مقادیر به شعاع وابسته هستند؛ به طوری که برای نانوذرات 20 نانومتری شدت از $10^{(-23)}W/m^2$ در بیشینه تا $10^{(-18)}W/m^2$ در کمینه تغییر می‌کند.

همانگونه که شکل ۴ نشان می‌دهد نمودار مربوط به نانو ذره به شعاع 500 nm شامل ۷ بیشینه نسبی واضح و ۷ کمینه مربوط به آن است که قله‌ها در زاویه‌های ۰، ۲۲، ۳۸، ۵۳، ۷۰، ۸۵ و ۱۰۵ درجه و دره‌ها به ترتیب در زاویه‌های ۱۸، ۳۲، ۴۸، ۶۰، ۷۸، ۹۵ و ۱۱۰ درجه تشکیل شده است. نمودار مربوط به نانو ذره به شعاع 200 nm شامل ۴ بیشینه نسبی و ۴ کمینه نسبی وابسته به آنها است. نمودار مربوط به نانو ذره به شعاع 100 nm شامل ۳ بیشینه نسبی در محدوده ۰ تا ۱۸۰ درجه و ۲ کمینه نسبی وابسته به آنها در همین محدوده است. در نمودار مربوط به نانو ذره به شعاع 80 nm تنها دو بیشینه و دو کمینه نسبی مشاهده می‌شود. در نمودار مربوط به نانو ذره به شعاع 50 nm تنها دو بیشینه و یک کمینه نسبی مشاهده می‌شود که بیشینه‌ها در زوایای ۰، ۱۸۰ درجه و کمینه در زاویه‌های ۸۵ درجه تشکیل شده‌اند. سرانجام در نمودار مربوط به نانو ذره به شعاع 20 nm تنها دو بیشینه و یک کمینه نسبی مشاهده می‌شود که بیشینه‌ها در زوایای ۰ و ۱۸۰ درجه و کمینه در زاویه ۹۰ درجه تشکیل شده‌اند. همچنین در شکل ۴ شدت باریکه فرودی

در شکل ۴ نمودار تغییرات دامنه میدان الکتریکی در نقاط دور برای نانوذره طلا با شعاع‌های مختلف در محیط آب و در طول موج 400 nm نمایش داده شده است. در نواحی دور که شامل محیط در برگیرنده نانوذره از حوالی سطح آن تا ابتدای ناحیه PML می‌شود یعنی حدود 200 الی 250 نانومتر دورتر از نانو ذره، بزرگی دامنه میدان الکتریکی تا $10^{-7}(V/m)$ و بزرگی شدت‌های متناظر تا $10^{(-18)}W/m^2$ کاهش می‌یابد. این مقادیر به شعاع وابسته هستند؛ به طوری که برای نانوذرات 20 نانومتری شدت از $10^{(-23)}W/m^2$ در بیشینه تا $10^{(-18)}W/m^2$ در کمینه تغییر می‌کند.

نور بالایی را با خود حمل کند. از این رو اگر آنها را به صورت کنترل شده حرکت دهیم می توان آن را به عنوان یک سنجهٔ رامان نانو مقیاس در انبرک های نوری مورد استفاده قرار داد [۳۲-۳۰].

۴-۲ تقویت میدان در سطح و محیط اطراف نانوذرات

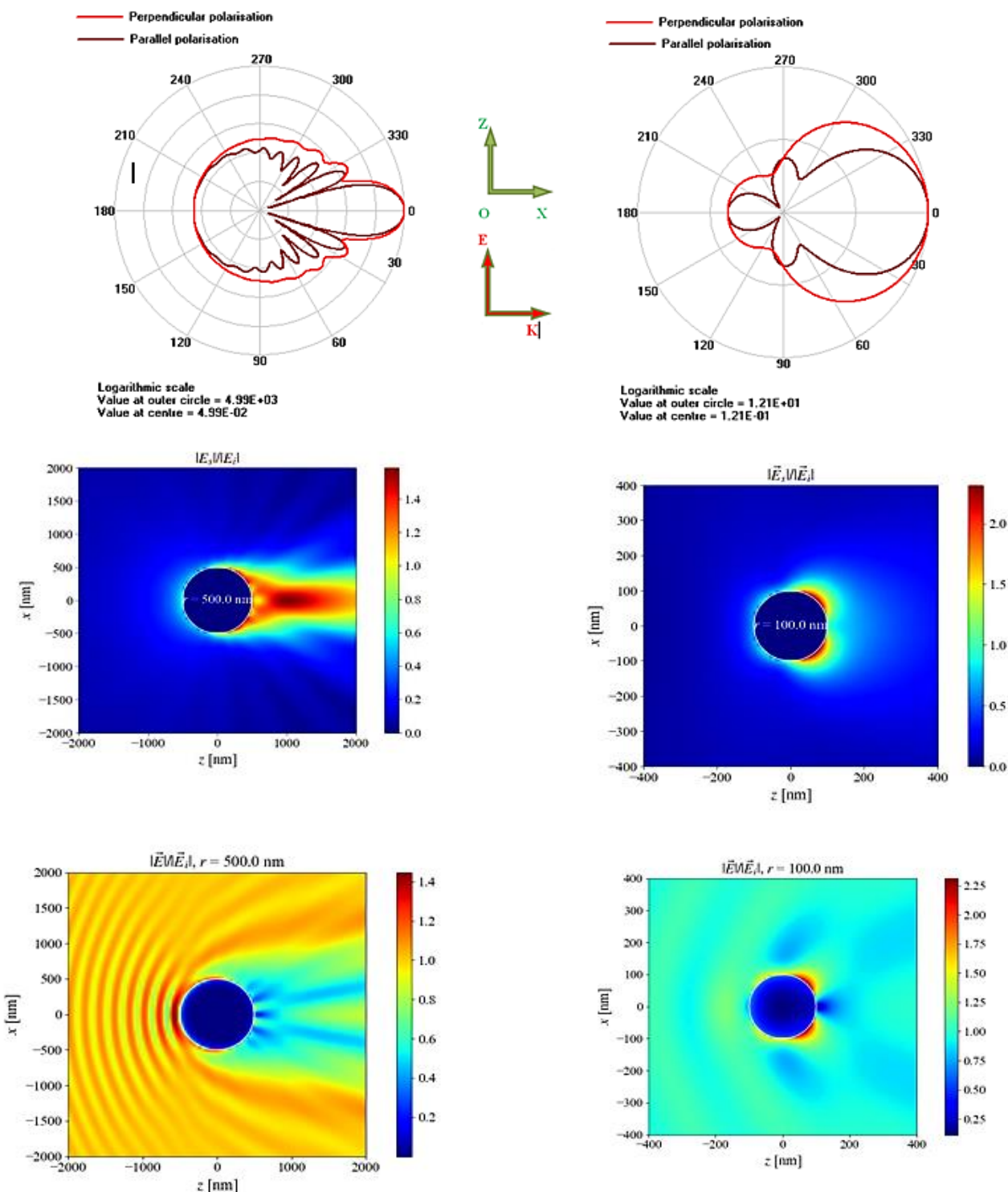
یکی از ویژگی های منحصر به فرد نانوذرات فلزی تقویت شدید میدان الکترومغناطیسی در مجاورت سطح آنها به ویژه در طول موج های نزدیک به SPR است. با انتخاب طول موج لیزری ۴۰۰ نانومتر، مربوط به هماهنگی دوم لیزر Ti-Spایر، تغییرات منحنی جذب را بر حسب شعاع نانوذرات مورد مطالعه قرار می دهیم. در شکل ۶ نمودار جذب برای نانوذرات نقره در محیط های مختلف آورده شده است. همین نمودار با محورهای نیمه لگاریتمی در بالای این شکل، کوچک تر تکرار شده تا مکان قله ها بهتر تفکیک و مشاهده شوند. محیط های انتخابی در این مدلسازی، معمولاً در تهیه نمونه های واقعی محلول کلوئیدی استفاده می شوند. در این تحقیق از هوا با $n=1.0$ ، آب در دمای ۲۰ درجه با $n=1.33$ کوارتز یا SiO_2 با $n=1.47$ ، سفایر یا Al_2O_3 با $n=1.76$ و اکسید تیتانیوم یا TiO_2 با $n=2.76$ استفاده شده است. اولین بیشینه مربوط به این طیف جذبی در شعاع ۱۷ قرار دارد. همانطوری که نمودار نشان می دهد بهرهٔ جذب در محیط های کوارتز، آب و هوا بیشترین مقدار را دارند که بزرگی آنها به ترتیب برابر ۱۶، ۹ و ۰/۰۸ است. همچنین بیشینهٔ اول آنها به ترتیب در شعاع های ۱۳، ۱۷ و ۴۳ نانومتر قرار دارند.

به منظور مشاهدهٔ رفتار میدان الکتریکی نانوذرات نقره در محیط آبی میدان الکتریکی در نزدیکی سطح آنها برای شعاع های ۲ و ۱۷ نانومتر تهیه و در شکل ۷ نمایش داده شده است. چنانچه این شکل نشان می دهد تقویت میدان در نزدیکی سطح نانوذرات نقره در شعاع ۱۷ نانومتر ۲۶ برابر و در شعاع ۲ نانومتر تا ۱۶ برابر است. معمولاً زمانی که اندازهٔ ذرات بزرگ تر از یک طول موج باشد، پراکندگی مای^۱ غالب

مطابق جدول ۱ بر مبنای $E^0 = 1(V/m)$ تنظیم شده است که اندازه گیری در فاصلهٔ ۱۰۰ nm از سطح نانو ذره مقادیر به دست آمده در محور عمودی را تعیین می کند.

برای بررسی دقیق تر مسئله، نمودار قطبی همراه با تغییرات میدان الکتریکی در مجاورت سطح نانوذرات در شکل ۵ ترسیم شده است. نمودار قطبی پراکندگی از نانوذرات طلا که در طول موج ۴۰۰ nm ترسیم شده است برای نانوذرات با شعاع ۱۰۰ nm و ۵۰۰ nm نمایش داده شده است. نمودارهای قطبی با دامنهٔ لگاریتمی ترسیم شده اند که تغییرات شدت باریکه با یکای w^2/m را بر حسب زاویه تعیین می کند. نمودار ردیف وسط پراکندگی دامنهٔ بهنجار میدان الکتریکی را در سطح نانوذرات نشان می دهد. ردیف پایین میدان الکتریکی کلی شامل جمع میدان تابشی و پراکنده را در نزدیک سطح نشان می دهد. همانگونه که نمودارها نشان می دهند تعداد بال های شکل در نیمهٔ بالایی یعنی زوایای ۱۸۰ تا ۳۶۰ درجه و نیمهٔ پایینی ۰ تا ۱۸۰ درجه به طور کاملاً متقارن تقسیم شده است. همخوانی در نقاط دور و نواحی نزدیک به وضوح مشهود است.

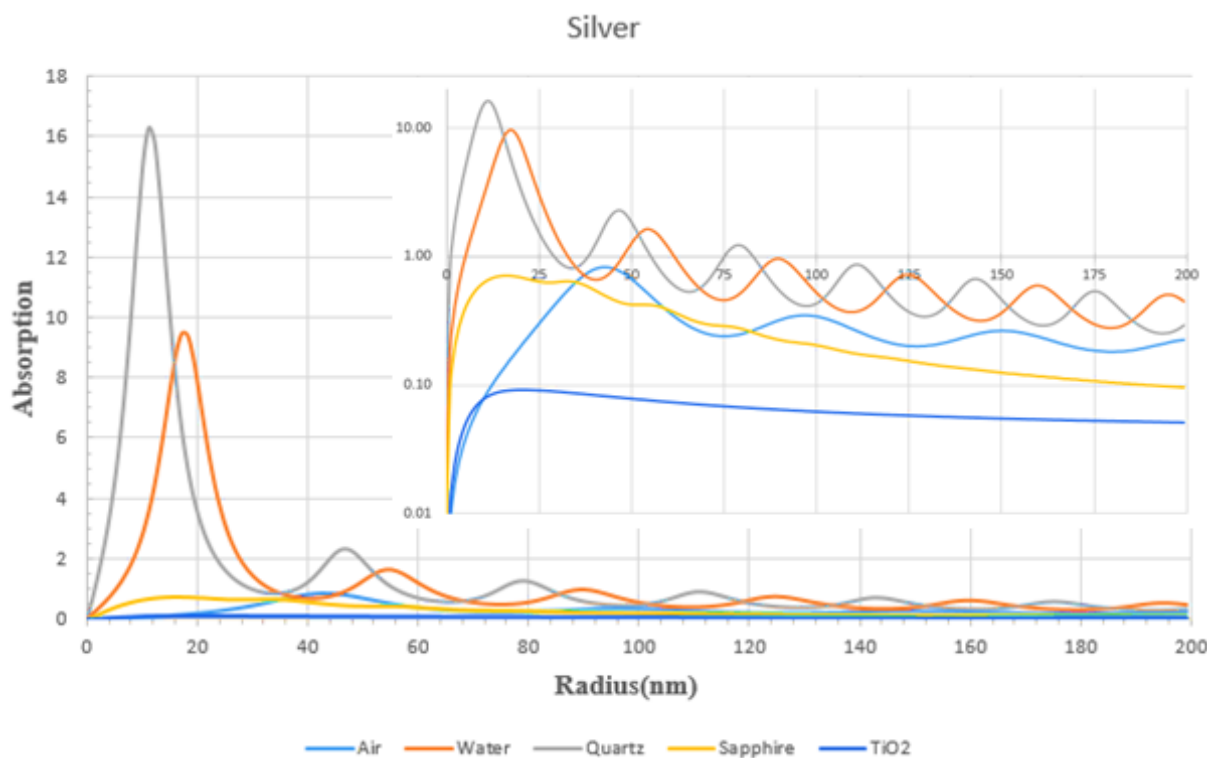
پراکندگی مای الگوهای توزیع میدان پیچیده ای را ایجاد می کند که یادآور توزیع میدان اطراف آنتن های جهت دار است. گاهی اوقات از این اثر به عنوان یک "نانو فواره پلاسمونی" یاد می شود. از نقطه نظر اپتیک هندسی، افزایش شدت میدان پراکندگی با یک لپ (Lop) رو به جلوی شدیدتر نشان دهندهٔ این واقعیت است که یک کرهٔ دی الکتریک با اندازهٔ بزرگ مانند یک عدسی محدب رفتار می کند. نواحی جایگزیده با شدت بالا، مانند نواحی نزدیک ذره، می توانند نانوذرات ریزتر را به دلیل نیروهای گرادیانی به دام ببندازند. این اثر توسط اشکین و همکاران بیش از ۳۰ سال پیش مشاهده شده است [۸ و ۲۹]. همانطور که گفته شد نانوفواره ها (تابش الکترومغناطیسی متمرکز جهت دار) می توانند در اطراف نانوذرات پلاسمونی بزرگ تشکیل شوند. این نانوفواره ها از نظر فناوری مهم هستند، زیرا می توان از آنها برای تقویت سیگنال های رامان استفاده کرد. بنابراین یک نانوذره پلاسمونی، که مشابه یک عدسی محدب در مقیاس نانو عمل می کند، می تواند شدت



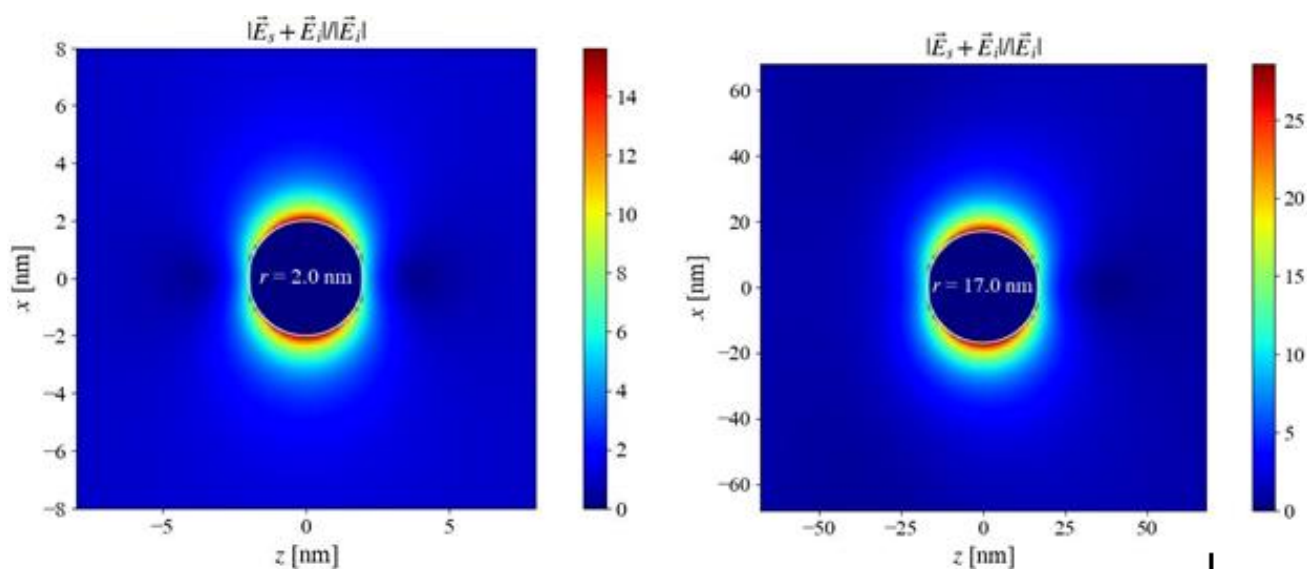
شکل ۵. نمودار قطبی پراکندگی از نانوذرات طلا در صفحه تابش kE (xoz) برای طول موج ۴۰۰ nm که شعاع نانوذرات آن ۱۰۰ nm (ستون سمت راست) و ۵۰۰ nm (ستون چپ) است. دو تصویر ردیف وسط پراکندگی در سطح نانوذرات را نشان می‌دهد و ردیف پایین میدان الکتریکی کلی را در نزدیک سطح نشان می‌دهد.

پوشش می‌دهد و با افزایش شعاع نانوذرات جملات بعدی در بسط مای اهمیت پیدا می‌کند.

می‌شود. از طرفی برای نانوذرات کوچک‌تر تقریب دوقطبی صادق است. این تقریب محدوده ۱ تا ۳۰ نانومتر را به خوبی



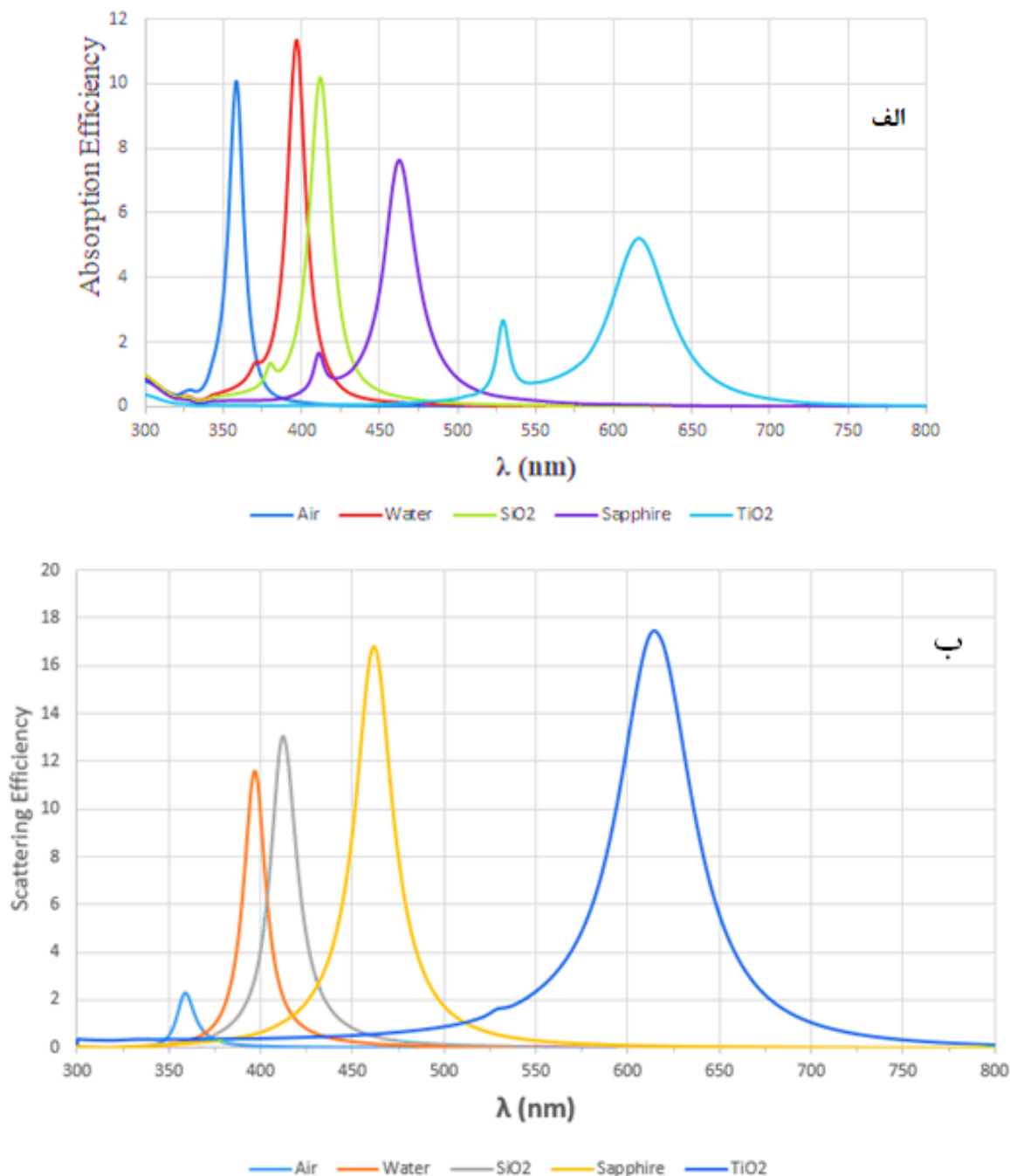
شکل ۶. منحنی تغییرات بهره جذب پراکندگی و خاموشی بر حسب شعاع نانو ذره نقره در طول موج ۴۰۰ نانو متر و در محیط‌های هوا، آب، کوارتز، سفایر و اکسید تیتانیوم. در نمودار داخلی محور عمودی لگاریتمی است.



شکل ۷. الگوی میدان الکتریکی در نواحی نزدیک نانوذرات نقره هنگامی که در محیط آب با ضریب شکست ثابت $n = 1.33$ قرار دارند و طول موج نور پراکنده $\lambda = 400 \text{ nm}$ است. بزرگی میدان الکتریکی به ترتیب برابر ۱۵ و ۲۶ برابر دامنه تابشی در شعاع‌های $R = 17 \text{ nm}$ و $R = 2 \text{ nm}$ است. قطبش میدان E در راستای محور z و باریکه در راستای محور x منتشر می‌شود.

که نمودار ۸ الف نشان می‌دهد با افزایش ضریب شکست محل قله‌های SPR به سمت طول موج‌های بالاتر جابه‌جا می‌شوند. در شکل ۸ ب نیز که مربوط به پراکندگی است، جابه‌جایی قرمز قله‌های SPR به وضوح مشاهده می‌شود. مکان قله‌ها برای

با توجه به نتیجه به دست آمده برای تقویت میدان در شعاع ۱۷ نانومتر، اکنون تغییرات ضریب شکست محیط را مورد مطالعه قرار می‌دهیم. در شکل ۸ طیف جذب و پراکندگی نانوذرات نقره با شعاع ۱۷ نانومتر در محیط‌های انتخابی آورده شده است. همانطوری



شکل ۸ - طیف نانوذرات نقره با شعاع ۱۷ نانومتر در محیط‌های مختلف هوا، کواتز، سفایر و اکسید تیتانیوم. ضرایب شکست این محیط‌ها به ترتیب برابرند با ۱، ۱/۳۳، ۱/۴۷، ۱/۷۶ و ۲/۷۶. (الف) طیف جذبی و (ب) طیف پراکندگی.

کوارتز نمایش داده شده است. نمودارهای میله‌ای تغییرات میدان را در نقاط مختلف مشخص می‌کنند. بررسی نمودارهای میدان نزدیک برای نانوذرات ۱۷ نانومتری در محیط‌های مذکور نشان می‌دهد تقویت میدان پراکنده برای هوا، آب، کوارتز و سفایر به ترتیب ۴، ۲۵، ۲۰ و ۷ است. نمودار پراکندگی مربوط به اکسید تیتانیوم نیز تهیه شده، ولی نمایش داده

نانوذرات کروی ۱۷ نانومتری در هوا، کوارتز، به ترتیب عبارتند از ۳۵۰، ۴۰۰، ۴۲۰ و ۶۵۰ که حدود ۱۵۰ nm جابه‌جایی در مکان قله، وابستگی شدید به ثابت دی‌الکتریک محیط را نشان می‌دهد.

در شکل ۹ الگوی پراکندگی میدان الکتریکی در مجاورت نانوذرات نقره ۱۷ نانومتری در محیط‌های هوا، آب، سفایر و

نشده است.

در دو محیط آب و کوارتز سهم پراکندگی و جذب تقریباً برابر است ولی در سفایر و اکسید تیتانیوم ضریب بهره پراکندگی بالا تر از ضریب بهره جذب است. نسبت سطح مقطع پراکندگی به سطح مقطع خاموشی که شاخص شایستگی نامیده می شود و با FOM^۱ نمایش داده می شود. از شکل ۸ نتایج زیر استخراج شده است:

$$\text{هوا (FOM)} = 0/16$$

$$\text{آب (FOM)} = 0/33$$

$$\text{کوارتز (FOM)} = 0/42$$

$$\text{سفایر (FOM)} = 0/47$$

$$\text{اکسید تیتانیوم (FOM)} = 0/67$$

بنابراین در کاربردهایی که پراکندگی از اهمیت برخوردار است بهتر است ضریب شکست های بزرگ انتخاب شوند.

بیشترین تقویت میدان الکتریکی در نانوذراتی که شعاع کوچک تر از ۳۰ nm دارند در حوالی ۱۵ تا ۲۰ نانومتر مشاهده می شود و با کاهش شعاع تا زیر ۵ نیز بزرگی تقویت میدان به این ناحیه نمی رسد.

۴. ۳. وابستگی SPR به شعاع نانوذرات

در این بخش، تأثیر تغییرات شعاع نانوذرات بر جابه جایی SPR در محدوده شعاعی صفر تا اولین کمینه نسبی مطابق با شکل ۶ مورد مطالعه قرار می گیرد. در این بازه، شعاع نانوذرات بین صفر تا ۳۰ نانومتر تغییر می کند. برای این منظور از مواد تعریف شده در بخش قبل به عنوان محیط دربرگیرنده (ماتریس) استفاده می شود. نانوذرات نقره با شعاع های ۵، ۱۰، ۱۵، ۲۰، ۲۵ و ۳۰ نانومتر جداگانه در هر یک از ماتریس های مورد نظر قرار داده طیف جذبی آنها تهیه می شود.

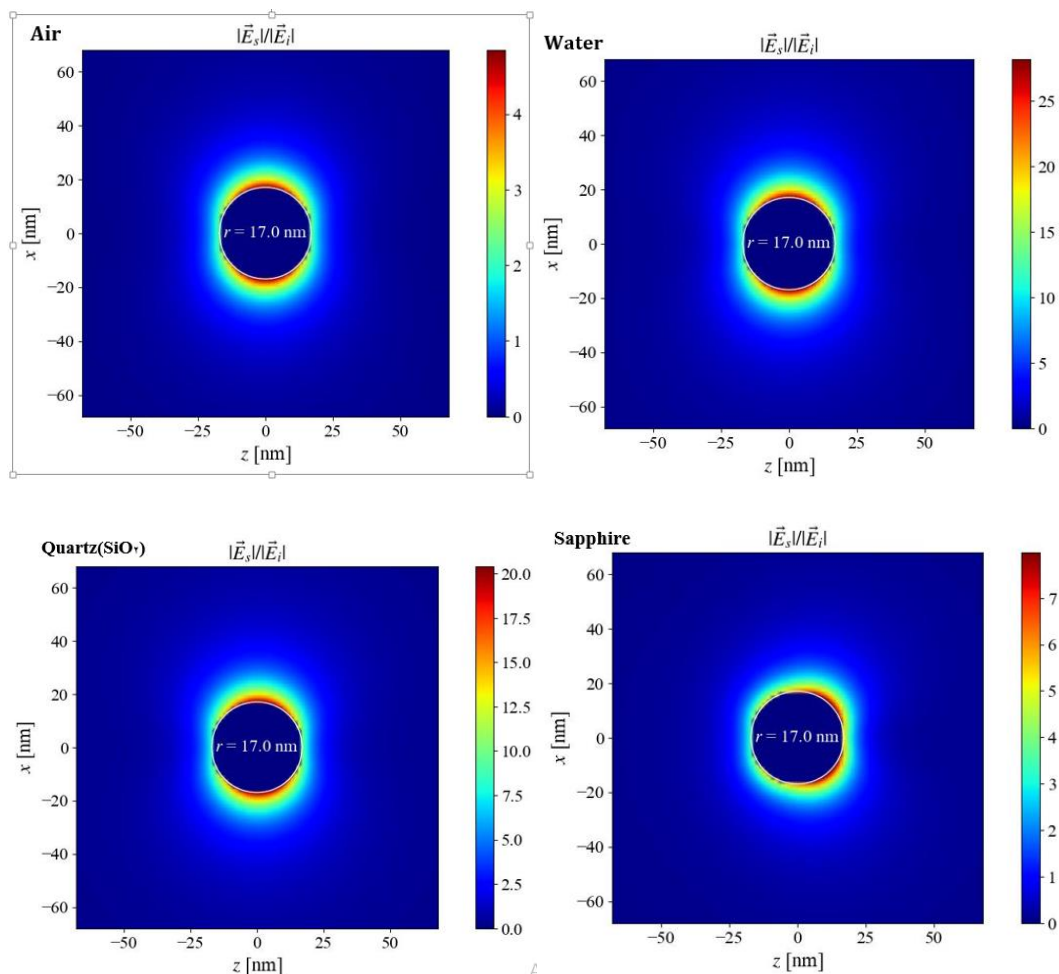
در شکل ۱۰ منحنی تغییرات سطح مقطع جذب C_{abs} بر حسب طول موج برای نانوذرات نقره در ماتریس آب نمایش داده شده است. نمودارهای مشابهی برای ماتریس های شیشه و سفایر و اکسید تیتانیوم تهیه شده اند و محل قله SPR و بزرگی سطح مقطع جذب نانوذرات استخراج شده اند. همانطوری که

شکل ۸ نشان می دهد C_{abs} برای نانوذرات نقره به شعاع ۵ nm در ماتریس آب دارای قله ای در محل ۳۸۴ nm است که با افزایش شعاع این قله به سمت طول موج های بلندتر جابه جا می شود. محل قله SPR برای شعاع های ۱۰، ۱۵، ۲۰، ۲۵ و ۳۰ nm به ترتیب به طول موج های ۳۸۸، ۳۹۲، ۴۰۰، ۴۰۸ و ۴۱۶ nm انتقال می یابد. بیشینه جابه جایی قرمز در حدود ۳۲ nm است.

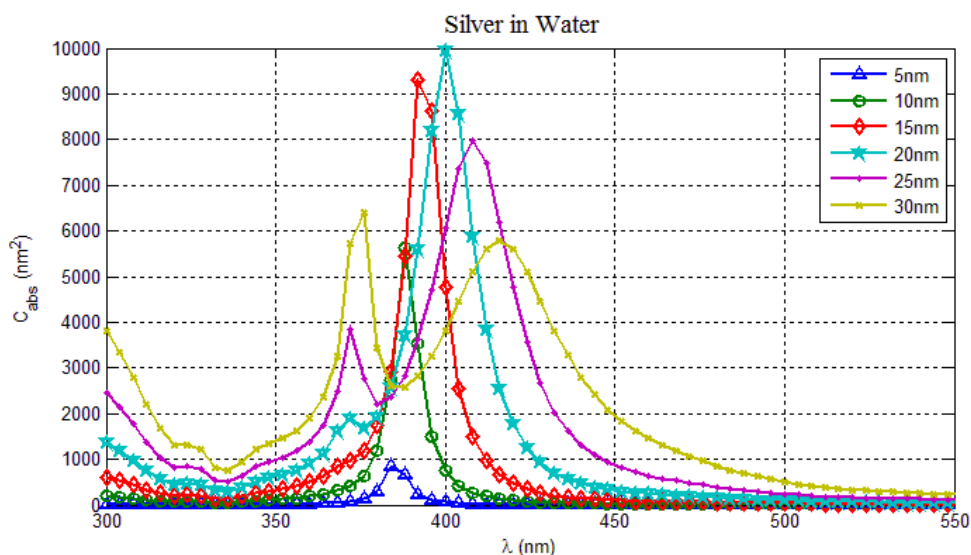
در جدول ۲ محل قله ها و میزان جابه جایی قرمز برای هر محیط درج شده است. هنگامی که اعداد به صورت افقی بازخوانی شوند جابه جایی قرمز در یک ماتریس خاص مثلاً آب قابل مشاهده است. بیشترین مقدار جابه جایی قرمز مربوط به دی اکسید تیتانیوم است. از طرف دیگر وقتی جدول به صورت بالا به پایین بازخوانی شود تأثیر تغییر ضریب شکست بر محل SPR برای هر شعاع به دست می آید: کمترین مقدار جابه جایی قرمز برای شعاع ۵ nm برابر ۹۲/۱۳ nm بوده و بیشترین مقدار آن برای نانوذرات با شعاع ۳۰ nm است $\Delta\lambda_{max} = 155$. در شکل ۱۱ منحنی تغییرات محل SPR نانوذرات نقره بر حسب ضریب شکست آب و کوارتز، سفایر و اکسید تیتانیوم آورده شده است. جابه جایی قرمز با شیب تقریباً خطی برای تمام گستره شعاعی وجود دارد.

۵. نتیجه گیری

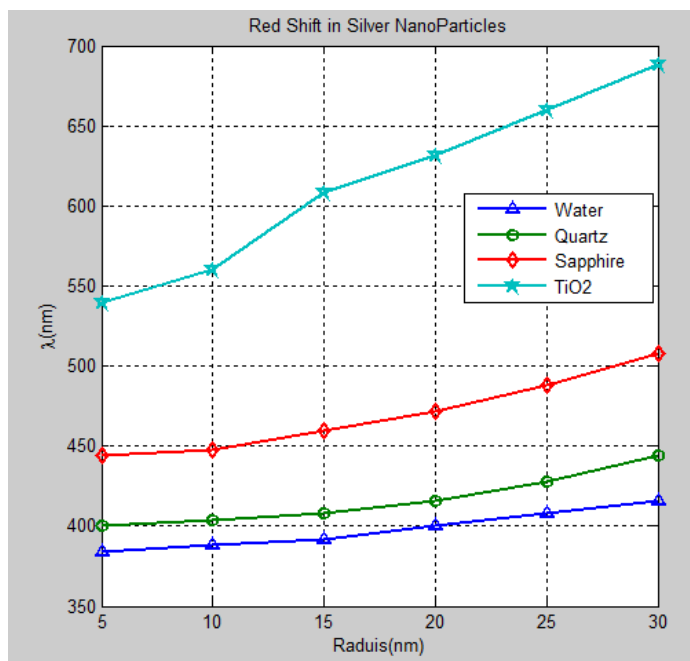
در این پژوهش، خواص اپتیکی خطی نانوذرات پلاسمونی طلا و نقره در محیط های هوا، آب، کوارتز، سفایر و اکسید تیتانیوم مدل سازی شده است. از ۵ ناحیه حجمی در هندسه یک چهارم و ۱۰ ناحیه حجمی در هندسه کامل استفاده و با انتگرال گیری حجمی در برخی از نواحی سطح مقطع های جذب به دست آمده است. از طرفی به کار بستن ۱۸ ناحیه سطحی در هندسه یک چهارم و ۳۶ ناحیه سطحی در هندسه کامل و محاسبه انتگرال سطحی در سطوح مجاز، سطح مقطع های پراکندگی محاسبه شده اند. انتگرال های سطحی در برخی از سطوح منجر به محاسبه میدان در نقاط دور می شوند. نتایج مدل سازی



شکل ۹. الگوی پراکندگی میدان الکتریکی در مجاورت نانوذرات نقره در طول موج ۴۰۰ نانومتر و در محیط‌های هوا، آب، سفایر و کوارتز. قطبش میدان E در راستای محور z و باریکه در راستای محور x منتشر می‌شود.



شکل ۱۰. منحنی تغییرات C_{abs} بر حسب طول موج برای نانوذرات نقره با شعاع‌های ۵، ۱۰، ۱۵، ۲۰، ۲۵ و ۳۰ نانومتر در ماتریس آب.



شکل ۱۱. منحنی تغییرات محل SPR نانوذرات نقره بر حسب ضریب شکست محیط.

جدول ۲. جابه‌جایی قرمز نانوذرات نقره در ماتریس‌های مختلف.

	۵	۱۰	۱۵	۲۰	۲۵	۳۰	$\Delta\lambda$
آب	۳۸۴	۳۸۸	۳۹۲	۴۰۰	۴۰۸	۴۱۶	۳۲
شیشه	۴۰۰	۴۰۴	۴۰۸	۴۱۶	۴۲۸	۴۴۴	۴۴
سفایر	۴۴۴	۴۴۸	۴۶۰	۴۷۲	۴۸۸	۵۰۸	۶۴
اکسید تیتانیوم	۵۴۰	۵۶۰	۶۰۸	۶۳۲	۶۶۰	۶۸۸	۱۴۸
$\Delta\lambda$	۱۵۶	۱۷۲	۲۱۶	۲۳۲	۲۵۲	۲۷۲	

تقویت میدان در نزدیکی سطح نانوذرات ریز چندین برابر بزرگ‌تر از نانوذرات درشت است. در نانوذرات بزرگ اگرچه تقویت میدان نزدیک سطح کمتر است ولی پراکندگی در مناطق بیشتری از سطح به وقوع می‌پیوندد و نانوفواره‌های پلاسمونی شکل می‌گیرند. بررسی نمودارهای جذب و پراکندگی برای نانوذرات نقره در طول موج ۴۰۰ nm و شعاع ۱۷ nm در محیط‌های هوا، آب، کوارتز، سفایر و اکسید تیتانیوم نشان می‌دهد که عدد شایستگی اکسید تیتانیوم بیشترین مقدار را دارد و برای کاربردهایی که پراکندگی اهمیت دارد ارجح است.

نانوذرات پلاسمونی شامل محاسبه سطح مقطع‌های جذب و پراکندگی و همچنین تقویت میدان الکترومغناطیسی در محیط اطراف آنها، با حل معادله هلمولتز و اعمال شرایط مرزی PEC و PMC به دست آمده‌اند. برای تأیید روند مدل‌سازی از طرفی از دو ساختار هندسی جواب یکسان به دست آمده است و از طرف دیگر داده‌های بخش موهومی و حقیقی تابع دی‌الکتریک طلا و نقره بر حسب انرژی موج فرودی همراه با بسامد پلاسمونی و ضریب میرایی آنها از مراجع پراستناد استخراج و مستقلاً توسط اکسل ترسیم و با نتایج حاصل از این تحقیق مقایسه شده است.

مراجع

1. V Amendola , R Pilot , M Frascioni ,O M Maragò, and M A Iatì, *J. Phys.: Condens. Matter* **29** (2017) 203002.
2. M B Cortie and A M McDonagh , *Chem. Rev.* **111** (2011) 3713.
3. G Baffou and H Rigneault, *Phys. Rev. B* **84**, 3 (2011) 035415.
4. G Baffou and H Rigneault, *Laser Photonics Rev.* **7**, 2 (2013) 171.
5. Frank-Hubenthal , *Comprehensive Nanoscience and Nanotechnology* **1** (2019)61.
6. R Borah and S W Verbruggen, *J. Phys. Chem. C* **124**, 22 (2020) 12081.
7. J M Terrés-Haro, F J Ibáñez-Civera, J Monreal-Trigo, A Hernández-Montoto, R Masot-Peris, and R Martínez-Máñez, *Bioengineering* **10** (2023)232.
8. E Mencarelli, L Fano, L Tarpani, and L Latterini, *Materials Today Proceedings* **2** (2015) 161.
9. D Pines, *Reviews of Modern Physics* **28** (1956) 184 .
10. C F Bohren and D R Huffman, “*Absorption and Scattering of Light by Small Particles*” New York, Wiley (1983).
11. F Tian, F Bonnier, A Casey, and H J Byrne, *Analytical Methods* **6** (2014) 22.
12. X Fan , W Zheng and D J Singh, *Light: Sci. & App.* **3** (2014) e179.
13. R Gan, H Fan, Z Wei, H Liu, Sh Lan and Q Dai , *Nanomaterials* **9** (2019) 711.
14. P B Johnson and R W Christy, *Phys. Rev. B* **6** (1972) 4370.
15. W C Mundy, J A Roux and A M Smith, *JOSA* **64**, 12 (1974)1593.
16. M Kerker, D-S Wang, and C L Giles, *JOSA* **73**, 6 (1983) 765.
17. C Mätzler , “*MATLAB Functions for Mie Scattering and Absorption*” , Institut für Angewandte Physik, University of Bern-CH (2002).
18. B T Draine and P J Flatau, *JOSA A: Optics and Image Science, and Vision* **11**, 4 (1994) 1491.
19. M K Oh, S Park, S K Kim, and S -H Lim , *J. Comp. & Theo. Nanoscience* **7**, 6 (2010) 1085.
20. Jianming Jin, “*The Finite Element Method in Electromagnetics*”, 2nd Edition. Wiley, IEEE Press (2002).
21. P Silvester , *Alta Frequenza* **38** (1969).
22. P L Arlett, A K Bahrani, and O C Zienkiewicz, *Proc. IEE* **115**, 12(1968) 1762.
23. P Monk, “*Finite element methods for Maxwell's equations*”, Oxford University Press (2003).
24. Y R Davletshin , *COMSOL Practice: Finite element calculation of the optical properties of plasmonic nanoparticles.*
25. Y R Davletshin, et al., *ACS Nano* **6**, 9 (2012) 8183.
26. V R Kumar and S Soni, *Plasmonics* **17** (2022)107.
27. J Grand and E Le Ru, *Plasmonics* **15** (2020) 109.
28. J P Berenger, *J. Comp. Phys.* **114** (1994) 185.
29. A Ashkin, J M Dziedzic, J E Bjorkholm, and S Chu , *Optics letters* **11**, 5 (1986) 288.
30. A Ashkin, *Phys. Rev. Lett.* **24** (1970)156.
31. P Zijlstra, J W M Chong and M Gu , *Nature* **459** (2009) 410.
32. A Bek, et al., *Nano Letters* **8** (2008) 485.