ڗۅٙۿۺ؋ۑڔڹۣڮ

مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۱۹، شمارهٔ ۴، زمستان ۱۳۹۸

بررسی اثر ضخامت نانوپوستههای طلا و نقره با قطر خارجی مشخص در تشديد پلاسمون سطحي جايگزيده توسط روش FDTD

حمزه ظفری، پیمان صاحبسرا، مهدی ترابی و مهدی رنجبر

دانشکدهٔ فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

پست الکترونیکی: sahebsara@cc.iut.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۷/۱۲/۲۲ ؛ دریافت نسخهٔ نهایی: ۱۰/۰۵/۱۳۹۱)

### چکیدہ

در این پژوهش، طیف تشدید پلاسمون سطحی جایگزیده برای نانوذرات کروی منفرد طلا با شعاع ۲۰ تا ۵۵ نانومتر، در محیطهای با ضریب شکست متفاوت (۱ تا ۱۸/۸) با استفاده از روش تفاضل محدود در حوزهٔ زمان شبیهسازی شده است. بسامد تشدید پلاسمونی با در نظر گرفتن مشربندی مناسب با بیشترین تطبیق بر نظریهٔ مای برای هر ذره مشخص شده است و با استفاده از نتایج این شبیهسازیها، خواص پلاسمونی نانوپوستههای طلا (نقره) با ضخامتهای متفاوت در محیط با ضریب شکست هوا (۱) و آب (۱٫۳۳) بررسی شده است. سپس بسامد تشدید پلاسمون برای نانوپوستهها محاسبه شد و نتیجه گرفتیم در محیطهای مختلف، نانوپوستهٔ طلا (نقره) با شعاع خارجی ۲۰ نانومتر و ضخامت ۱ (۱۷) نانومتر دارای طیف پلاسمونی منطبق بر نانوکرهٔ طلا (نقره) با همان شعاع خارجی این تسخی بلاسمون سطحی جایگزیده برای هر نانوذره نسبت به تغییر ضریب شکست محیط رسم شده است. در پایان حساس ترین و غیرحساس ترین نانوذره نسبت به تغییرات ضریب شکست برای محیطهای مختلف تعیین شده است

واژههای کلیدی: پلاسمون سطحی، نانوذرات طلا، نانوحسگر، تفاضل محدود در حوزهٔ زمان

#### ۱. مقدمه

سطح مشترک یک رسانا و دیالکتریک و محدود شدن در مختصات وابسته را انتشار پلاسمون پلاریتون سطحی (SPP) گویند. به عبارت دیگر جفت شدن میدان الکترومغناطیس با نوسانات پلاسمای الکترونی یک رسانا موجب برانگیختن میشود. پلاسمون طبق تعریف یک شبهذرهٔ بوزونی برانگیخته نشأت گرفته از نوسان پلاسمونی کوانتومی است. تشدید پلاسمون سطحی جایگزیده (LSPR) که ناشی از نوسانات

خاصیت پلاسمونی مواد نشأت گرفته از بررسی میدانهای اپتیکی در اندازهٔ نانو (نانواپتیک) است. نانواپتیک علت محدود شدن یک میدان الکترومغناطیس در محیطی با ابعاد هم مرتبه با طول موج و یا کوچکتر را توضیح میدهد. برای بررسی رفتار فلزات در حضور میدان الکترومغناطیس میتوان از مدل پلاسما استفاده کرد [1]. انتشار برانگیختگیهای الکترومغناطیسی در



**شکل ۱**. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) فضای مسئله به N<sub>x</sub> ، N<sub>x</sub> و N<sub>z</sub> ملول واحد تقسیم بندی شده است (شکل (الف)). موقعیت مؤلفههای میدان الکتریکی و مغناطیسی با مبدأ مختصات O<sub>1</sub> (ijk)، هر سلول دارای یک مبدأ مشخص و سه مؤلفهٔ میـدان الکتریکـی و سـه مؤلفـهٔ میـدان مغناطیسی است (شکل (ب)) [۷].

( Δn) نانوذرهای که جابهجایی طول موج تشدید بیشتری داشته باشد به تبع دارای RIS بیشتر نیز خواهد بود.

روش تفاضل محدود در حوزهٔ زمان (FDTD) روشی محاسباتی و قدرتمند جدید برای حل عددی معادلات دیفرانسیل ماکسول از طریق مدلسازی الکترومغناطیسی است. این روش در ابتدا توسط یی معرفی شد. از این روش برای محاسبهٔ مؤلفه های میدان الکترومغناطیسی استفاده می شود که قادر به حل بسیاری از مسائل، به خصوص هندسه های غیر کروی در این حوزه است.

ایسن روش در بررسی خسواص الکتریکی و مغناطیسی حجمهای هندسی دارای تقارن کم یا نامتقارن و مواد با ساختار ناهمگن بسیار کارآمد است. در ایس روش جسزء اساسی سلول «یی» است. آن گونه که در شکل ۱ مشاهده می شود بر روی یالهای سلول یی سه مؤلفهٔ میدان الکتریکی، و عمود بر وجوه آن سه مؤلفه میدان مغناطیسی قرار دارد. در FDTD فضای مسئله به موقعیت هر سلول با سه مختصهٔ *i j k* مشخص می شود [۷ و ۸]. مؤلفهٔ x میدان مغناطیسی در روش TDTD با استفاده از

معادلات ماکسول وابسته به زمان، وابستهٔ به دیگر مؤلفههای میدان الکتریکی بستگی دارد و به صورت رابطهٔ زیر نوشته میشود:

جمعي الكترون هاي نيمه آزاد است، در نانوذرات فلزاتي همچون طلا و نقره دارای خواصی جالب برای استفاده در کاربردهای حسگری است [۲]. بسامد تشدید پلاسمون برای یک نمونهٔ تحت تأثیر میدان الکترومغناطیسی، وابسـتگی زیـادی به جنس ماده، اندازه، شكل، فاصلهٔ بين نانوذرات و نحوهٔ تركيب آنها دارد [۳]. بسامد تشدید پلاسمون علاوه بر تأثیریذیری بسیار از خواص نانوذره، وابستگی بسیاری به تابع دیالکتریک محیط اطراف ذره نیز دارد، چنان که تغییر کوچک در ضریب شکست محيط، باعث جابهجايي در بسامد تشديد پلاسمون مي شود. اين خاصیت اساس کار LSPR است [۴]. از کاربردهای حسگر پلاسمونی میتوان استفادهٔ آنها را در شناسایی گازهایی چـون اکسیژن، گازهای سمی، گازهای گلخانهای و هیدروژن، نام بـرد [6]. نانوحسگرهای پلاسمونی پردازندهٔ اپتیکی، دقیق و ابزاری قدرتمند برای شناسایی گازها هستند. نسبت جابهجایی طول موج تشدید به تغییر ضریب شکست (RI) محیط را، حساسیت ضریب شکست (RIS) می نامند که مطابق رابطهٔ (۱) معرفی مي شود [6].

$$RIS = \frac{\Delta \lambda_{\max}}{\Delta n} , \qquad (1)$$

RIS ملاکی برای سنجش حساسیت حسگر نسبت به تغییرات محیط اطراف است. در بازههای برابر، تغییر ضریب شکست

$$H_{x(ijk)}^{n+\frac{\lambda}{\gamma}} = H_{x(ijk)}^{n-\frac{\lambda}{\gamma}} + \frac{\Delta t}{\mu\Delta z} \left( E_{y(ijk)}^{n} - E_{y(ijk-\lambda)}^{n} \right)$$

$$- \frac{\Delta t}{\mu\Delta y} \left( E_{z(ijk)}^{n} - E_{x(ij-\lambda)}^{n} \right) ,$$

$$(\Upsilon)$$

طبق معادلهٔ بالا مقدار میدان مغناطیسی مجهول فعلی  $\begin{pmatrix} n+\frac{1}{7}\\ r\\ (H_{x(ijk)}^{n+\frac{1}{7}}) \end{pmatrix}$ به مقدار میدان مغناطیسی در زمان گذشته  $(E^n)$ ،  $\begin{pmatrix} n-\frac{1}{7}\\ r\\ x(ijk) \end{pmatrix}$ 

مربوط است. *A* بازهٔ زمانی و *X*، *W*، *Z* فاصلهٔ نقاط مبدأ را مشخص می کند. *H* نیز تراوایی مغناطیسی است. به طریق مشابه معادلات وابسته به زمان برای دیگر مؤلفه های میدان مغناطیسی و نیز میدان الکتریکی برای هر سلول واحد نوشته می شود. اطلاعات بیشتر در مرجع [۸] آمده است.

برای بررسی تحلیلی رفتار نانوذرات در حضور میدان الکترومغناطیس از نظریهٔ مای و یا بسط شبه کروی استفاده میشود. نظریهٔ مای یک روش تفکیک متغییرها برای تعیین ضرایب مای است. تعمیمهای متنوعی از نظریهٔ مای وجود دارند که مسائل مختلفی را تحت پوشش قرار می دهند. بسط چند قطبی میدانهای الکترومغناطیسی مبنای محاسبات مای را تشکیل میدهد. مای با مرتبط ساختن مختصات دکارتی و قطبی کروی به واسطهٔ مقادیر استوکس، رفتار امواج کروی پراکنده را بر حسب امواج تخت ورودی مورد بررسی قرار داد. از نتایج این بررسیها میتوان محاسبهٔ ضریب سطح مقطع جذب و پراکندگی در روابط (۳) و (۴) را نام برد که ما آ شدت ورودی و *P* نشان دهندهٔ توان جذب شده و پراکنده از سطح ذره است (به پیوست الف مراجعه شود) [۹ – ۱۱].

$$Q_{abs} = \frac{P_{abs}}{P_{abs}}, \qquad (\Upsilon)$$

$$Q_{\text{sca}} = \frac{P_{\text{sca}}}{I_{\text{inc}}} \quad . \tag{(4)}$$

۲۹) فلز نجیب گفته می شود. فلزات نجیب در ساختار الکتریکی خود در لایهٔ آخر الکترونی دارای نوار b پرشده هستند [۱۲]. در چند دههٔ اخیر نانوذرات طلا (Au) عنوان تحقیقات بسیار و به سرعت در حال رشد بوده است. برای مثال نانوذرات طلا با اندازهٔ کوچک در کاربردهای زیست پزشکی همچون حسگری [۱۳]، تصویربرداری از بافت سلولی [۱۴]، تزریق دارو [۱۵] و درمان سرطان [۱۶] خواص جالب و بسیار مورد علاقه دارد. با این وجود حجم بیشتر تلاش های تحقیقاتی متوجه خواص شیمیایی و کاتالیستی [۱۷]، الکتریکی [۱۸] و فرآیندهای اپتیکی غیر خطی است [۱۹]. وجود سه دلیل عمده سبب ترجیح نانوذرات طلا در زمینههای تحقیقاتی نسبت به دیگر نانوذرات شده است [۲۰].

 بایداری شیمیایی و فیزیکی: نجیب بودن طلا باعث میشود واکنش های فیزیکی و شیمایی ذرات طلا همچون اکسیداسیون نسبت به سایر فلزات به خصوص در اندازهٔ نانو به شدت کم باشد.

۲. سازگاری زیستی: نانوذرات طلا علاوه بر ایـن کـه خـود خاصیت سمی ندارند، اکسیدها و ترکیبات ایبجاد شدهٔ احتمـالی از آن نیز در بیشتر موارد بی خطر است. در نتیجـه وجـود و یـا تزریق آن در بافتهای سلولی و زنده ایجاد خطر نمیکند.

۳. خواص اپتیکی وابسته به پلاسمونهای سطحی: تعداد بالای الکترونهای رسانش موجب قطبش پذیری آسان آنها و اندرکنش با میدان الکترومغناطیسی خارجی با سطح نانوذرات میشود، به گونهای که نانوذرات طلا دارای قطر کمتر از ۲ نانومتر نزدیک به صد در صد نور فرودی را توسط جذب پلاسمونی به گرما تبدیل میکند.

### ۲. شبیهسازی نانوساختارها

اثر برهمکنش های الکتریکی در رساناها به دلیل وجود چگالی بالای حاملان آزاد بار در مقایسه با برهمکنش های گرمایی در سطوح انرژی، بیشتر است. به همین دلیل مرتبهٔ ساختارهای نانو فلزی تا زمانی که کمتر از ۱ نانومتر نباشند، می توانند بدون نیاز به کوانتوم شرح داده شوند. در این پژوهش برای حل معادلات



**شکل ۲**. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) این شکل، Q را بر حسب طولموج، برای نانوذرات کروی طـلا در محیطـی بـا ضـریب شکسـت ۱ نشـان میدهد (ترتیب نانوذرات برای این نمودار و تمامی نمودارهای ۱ تا ۷ از پایین به بالا ۱۱۰، ۱۰۵، ۱۰۰،...، ۴۵، ۴۰ نانومتر است).

دیفرانسیل ماکسول از روش FDTD استفاده شده است. نرمافزارهای مورد استفاده جهت شبیهسازی، متلب و لومریکال هستند (جهت اطلاعات بیشتر به پیوست (ب) مراجعه شود)، در بررسی خواص پلاسمونی نانوذرات طلا (نقره) ارائه شده در این پژوهش از تابع دیالکتریک جانسون-کریستی استفاده شده است [۲۱].

# ۱.۲. شبیهسازی برای ذرات کروی طلا

پانزده نانوذرهٔ طلا با قطر ۴۰ تا ۱۱۰ نانومتر، جداگانه در محیطهایی با ضریب شکست ۱ تا ۱۸ تحت تابش موج پیشرونده در راستای محور لاها قرارگرفتند. چون پوششهای دیالکتریک پرکاربرد در نانوحسگرها، اغلب ضریب شکستی بین ۱ تا ۲، دارند، در این پژوهش ضریب شکست محیط برای نانوذرات کروی طلا در این بازه انتخاب شدند. چون تشدید پلاسمونی نانوذرات طلا در طول موجهای ۵۰۰ تا ۵۰۰ نانومتر است، طول موج پرتو ورودی از ۵۰۰ تا ۵۰۰ نانومتر در نظر گرفته شد، تا شبیه سازی ها شامل قلهٔ تشدید پلاسمون در بازه پلاسمون سطحی جایگزیده برای هر نانوذره در محیطهایی با ضریب شکست ۱، ۲/۱، ۲/۱، ۱/۶، ۱/۶ به دست آمد. مشربندی به گونهای بوده، که علاوه بر انطباق هر چه بیشتر نتایج

حداقل برسد. حداكثر اختلاف طول موج قلة تشديد مدل شبیهسازی با مدل تحلیلی ۵ نانومتر است. مرزهای محیط شبیهسازی تا آنجا که اثرات بازتابی را به حداقل برساند بزرگ انتخاب شدند. طول ابعاد مرزها از مرتبه ۱۰ برابر قطر نانوذرات است. حاصل جمع قدرمطلق سطح مقطع جـذب و پراکنـدگی بهنجار شده، برای هر نانوذره را ضریب Q کلی مینامیم، که بـه اختصار Q مینویسیم. نمودار Q بر حسب طول موج برای نانوذرات ۴۰ تا ۱۱۰ نانومتر کروی طلا در محیطهای با ضریب شکست متفاوت مطابق شکل ۲ تـ ۶ رسم شدند و الگوی افزایش طول موج تشدید برای نانوذرات مورد بررسی قرار گرفت. Q استفاده شده در این پژوهش همان مفهوم Q خاموشی است. با توجه به شکل های ۲ تا ۶، روند تغییر ضریب شکست محیط در چهار بازه (۱ تا ۱٫۲، ۱٫۲ تـا ۱٫۴، ۱٫۴ تا ۱/۶ و ۱/۶ تا ۱/۸) بررسی شد. سپس مقدار جابهجایی طول موج تشدید، نسبت به تغییرات ۲٫۰ ضریب شکست، و در نهایت RIS، که از تقسیم تغییرات طول موج تشدید بر تغییرات RI به دست میآید، برای بعضی نانوذرات محاسبه شده است.

**۱.۲ نتایج شبیهسازی** طبق نتایج به دست آمده در شکل ۲، وقتی نانوذرات طلا تحت تابش الکترومغناطیسی قرار گیرند، به دلیل نوسانات پلاسما در

1. Q extinction



**شکل ۳**. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) این شکل، Q را بر حسب طول موج، برای نانوذرات کروی طلا در محیطی با ضریب شکست ۱٫۲ نشان میدهد.



**شکل ۴**. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) این شکل، Q را بر حسب طول موج، برای نانوذرات کروی طلا در محیطی با ضریب شکست ۱٫۴ نشان میدهد.

نمودار Q بیشتر می شود. مطابق شکل ۴ برای نانوذرات در محیط با ضریب شکست ۱/۴ ارتفاع قلهٔ پلاسمونی تا ذرات با ابعاد ۸۵ نانومتر افزایش و برای نانوذرات با ابعاد ۹۰ نانومتر و بیشتر کاهش می یابد و الگوی افزایش پهنای قله، همچنان برای تمام نانوذرات رعایت می شود. مطابق شکل ۵ در ضریب شکست ۱۶/۶ با افزایش ابعاد نانوذره، پهنای قله برای تمام نانوذرات بیشتر می شود و ارتفاع قله برای ذرات تا ابعاد نانومتر افزایش و از ۸۰ تا ۱۱۰ نانومتر کاهش یافته است. الگوی جابه جایی سرخ برای قلهٔ پلاسمونی همچنان پا برجاست ولی در شکل ۶ برای نانوذرات در محیط با ضریب شکست ۸٫۱، افزایش ابعاد نانوذره تا ۵۵ نانومتر سبب افزایش ارتفاع قلهٔ پلاسمونی و افزایش ابعاد نانوذره از ۶۰ تا ۱۰۰ نانومتر سبب طیف خاموشی خود دارای قلهٔ تشدید می شوند. ذرهٔ ۴۰ نانومتری کمترین طول موج تشدید و مقدار Q را دارد. با بزرگتر شدن ابعاد نانوذره، طول موج تشدید پلاسمون و نیز مقدار Q افزایش می یابد (در تمامی شکلهای ۲ تا ۸ قطر نانوذرات به ترتیب از بالا به پایین ۱۱۰...، ۲۵، ۴۰ نانومتر است). با افزایش مقدار ضریب شکست محیط اطراف نانوذره، مطابق شکل ۳ روند ذکرشده ادامه می یابد و طول موجهای تشدید برای تمام ذرات، جابه جایی سرخ دارند. الگوی جابه جایی سرخ مطابق شکلهای ۴، ۵ و ۶ برای تمام نانوذرات با افزایش سهم پراکندگی با افزایش قطر نانوذرات و نیز افزایش اختلاف در طول موج تشدید جذب و پراکندگی پهنای



**شکل ۵**. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) این شکل، Q را بر حسب طول موج، برای نانوذرات کروی طلا در محیطی با ضریب شکست ۱٫۶ نشان میدهد.



**شکل** ۶. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) این شکل، Q را بر حسب طول موج، برای نانوذرات کروی طلا در محیطی با ضریب شکست ۱٫۸ نشان میدهد.

سنجش حساسیت حسگرها نسبت به تغییرات محیط است، در شکل ۸ برای نانوذرات کروی ۴۰ تا ۱۱۰ نانومتر طلا رسم شده است، و در هر بازه از تغییرات RI محیط ذرات با بیشترین و کمترین RIS مشخص شدند. در انرژیهای بیشتر و یا طول موجهای کمتر پراکندگی سهم قابل ملاحظهای دارد، همچنان که در انرژیهای کمتر یا در طول موجهای مطابق شکل ۸ در بازهٔ ۱ تا ۱٫۲، ۲٫۱ تا ۱٫۴، ۲٫۱ تا ۱٫۶ و ۱٫۶ تا ۱٫۸ برای تغییر ضریب شکست، به ترتیب بیشترین RIS متعلق به ذرات ۱۰۱، ۱۰، ۱۰۵ و ۱۰۵، ۱۰۵ نانومتر است و کمترین RIS به ترتیب متعلق به ذرات ۴۵ و ۵۵، ۴۰، ۴۰، ۱۰۰ نانومتر است. در قسمت اول شبیه سازیها (شبیهسازی طیف پلاسمونی برای نانوذرات کروی طلا)، نتایج به دست آمده از روش FDTG، تحلیلی و کاهش ارتفاع قلهٔ پلاسمونی شده است. الگوی افزایش جابه جایی سرخ برای طول موج تشدید، با افزایش ضریب شکست محیط و ابعاد نانوذرات همچنان پابر جاست. به دلیل افزایش قابل ملاحظه سهم پراکندگی برای ذرات با ابعاد ۱۰۰ تا ۱۱۰ نانومتر در محیط با ضریب شکست ۱۸۸ پهن شدگی قله تشدید پلاسمون، همراه با ایجاد قلهٔ دیگر در طول موج های کمتر نسبت به قلهٔ مطلق، خود را نمایان کرده است. در بیشتر اوقات، فارغ از این که نانوذرات طلا در چه محیطی باشند ضریب جذب سهم غالب را در طیف خاموشی دارد. مطابق شکل ۷ افزایش ابعاد نانوذره سبب افزایش طول موج تشدید میشود. در ادامه میزان تغییرات طول موج تشدید را نسبت به بازه های تغییر IR محیط مورد بررسی قرار دادیم. IR که معیار



رسم شده است.



**شکل ۸** (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) این شکل، مقدار تغییرات طول موج تشدید برای هر نانوذره را نسبت به تغییرات ضریب شکست محیط نشان میدهد.

> تجربی (شکل ۹ مقایسهای از طیف پلاسمونی Q عددی، Q تحلیلی و Q تجربی را بر حسب طول موج، برای نانوکرهٔ طلا با قطر ۲۵ نانومتر در محیطی با ضریب شکست ۱٬۳۳ نشان میدهد) همخوانی دارد [۲۲]. با مراجعه به شکل ۲ از مرجع ۲۲ میتوان تصویر TEM و SEM نمونه نانوذرات کروی سنتز شده روی شیشه را مشاهده کرد.

> **۱.۲.۲. شبیهسازی برای پوستهٔ کروی طلا (نقره)** چون در این پژوهش هـدف بررسـی اثـر ضـخامت در تشـدید پلاسمون سطحی جایگزیده نانوپوستهٔ کروی طلا (نقره) با قطـر

خراجی ثابت است، در ادامه شبیهسازی تنها روی نانوپوستههایی از طلا (نقره) انجام می شود که شعاع خارجی ۴۰ نانومتر دارند. همچنین با توجه به اندازهٔ نانوذرات از مشبندی و شرایط بهینهٔ مورد استفاده برای نانوذرات کروی توپر طلا با قطر ۴۰ نانومتر در قسمت اول استفاده می شود.

ضرایب شکست محیط پیرامون از دو جهت این گونه انتخاب شدند، اول این که هوا و آب به عنوان محیط پیرامون نانوذره بلافاصله پس از سنتز، نقش بسزایی دارند؛ دوم به خاطر این که شبیهسازی از جهت مقایسه با نتایج سایر محققین دارای شاهد فیزیکی باشد. ضرایب شکست تا حد امکان بهتر است



**شکل ۹**. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) این شکل مقایسهٔ نتایج تحلیلی به دست آمده از نظریهٔ مای و نتایج شبیهسازی شده از روش FDTD در این پژوهش را برای نانوذرهٔ طلا با قطر ۲۵ نانومتر در محیطی با ضریب شکست ۱۸۳۳ نشان میدهد. نمودارها مقدار Q بهنجار را بر حسب طول مـوج نشان میدهد. برچسب نمودارها به ترتیب از بالا به پایین مقادیر Q به دست آمده از روش محاسباتی، تحلیلی و تجربی Q را نشان میدهد.



شکل ۱۰. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) پوستهٔ کروی طلا (نقره) با قطر خارجی و ثابت ۴۰ نانومتر. ضریب شکست درون پوستههای کروی ۱ است. محیط پیرامون پوستهها میتواند آب یا هوا باشد. قطبش میدان در راستای محور عها و جهت انتشار در راستای محور وها است.

جوری انتخاب شوند که منطبق بر ضریب شکست محیطهای واقعی باشد. ضریب شکست پیشنهادی برای ادامهٔ کار روی نانوپوستههای کروی با ضخامت متغیر و قطر خارجی ۴۰ نانومتر در این پژوهش ۱ و ۱٬۳۳ یعنی محدودهای میان ۱ تا ۱٬۸ و دارای انطباق با ضریب شکست هوا و آب است.

پس از اطمینان از روند درست شبیهسازی، در این پژوهش برای شبیهسازی ساختار نانوپوستههای طلا (نقره) با قطر

خارجی مشخص، ابتدا یک نانو کرهٔ طلا (نقره) با قطر ۴۰ نانومتر، در محیطی با ضریب شکست (RI) خلاً (ضریب شکست خلاً ۱ در نظر گرفته شد.) و سپس محیطی با ضریب شکست آب (ضریب شکست آب در بازهٔ طول موجی ۵۰۰ تا ۱۸۳۰ نانومتر ۱۸۳۳ در نظر گرفته شد.) ؛ تحت تابش یک موج الکترومغناطیسی پیشرونده در راستای مثبت محور بها و قطبش خطی در راستای محور محها در شبیه سازی قشد. موقعیت میدان نسبت به پوسته ها در شکل ۱۰ مشاهده می شود.

مرحلهٔ بعد ایجاد یک فضای تو خالی کروی دارای شعاع ۱۹ نانومتر و دارای ضریب شکست ۱ درون این کره طلا (نقره) است، این فضای تو خالی هر بار از شعاعش کم می شود به گونهای که پوستهٔ ایجاد شده از طلا (نقره) قطر خارجی ثابت ه۴ نانومتر و ضخامتهای متغییر دارد. با تفاسیری که از مسئله شد اولین شبیه سازی روی نانوپوسته با ضخامت ۱ نانومتر طلا (نقره) و قطر خارجی ۴۰ نانومتر در محیط هوا و آب انجام شد. در ادامه ضخامت پوسته با فاصلههای ۱ نانومتری افزایش یافته و در محیط آب و هوا طیف پلاسمونی مربوط به هر نانوپوسته طلا (نقره) محاسبه و رسم شد. این روند در دو محیط آب و هوا برای هر نانوپوسته تا جایی انجام می شود تا طول موج تشدید پلاسمون نانوپوسته بر طول موج تشدید پلاسمون نانوکرهٔ طلا (نقره) در آن محیط منطبق شود. دق



شکل ۱۱. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) این نمودار مقدار Q را بر حسب طول موج برای برای بعضی نانوپوستهها و نـانوکرهٔ طـلا (شـکل سـمت راست)، نانوپوستهها و نانوکره نقره (شکل سمت چپ) در محیط با ضریب شکست ۱ را نشان میدهد. (برچسب نمودارهـا بـه ترتیـب از بـالا بـه پایین، نانوکرهٔ طلا (نقره) با قطر ۴۰ نانومتر و نانوپوستهٔ طلا (نقره) با ضخامت ۳ (۸) نانومتر تا ۱۲ (۱۷) نانومتر را نشان میدهد.)



شکل ۱۲. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) این نمودار مقدار Q را بر حسب طول موج برای برای بعضی نانوپوستهها و نـانوکرهٔ طـلا (شـکل سـمت راست)، نانوپوستهها و نانوکرهٔ نقره (شکل سمت چپ) در محیط با ضریب شکست ۱٬۳۳ را نشان میدهد. (برچسب نمودارها به ترتیب از بالا بـه پایین، نانوکرهٔ طلا (نقره) با قطر ۴۰ نانومتر و نانوپوستهٔ طلا (نقره) با ضخامت ۳ (۸) نانومتر تا ۱۲ (۱۷) نانومتر را نشان میدهد.)

شود طیفهای خاموشی رسم شده برای نانوذرات طلا (نقره) در شکلهای ۱۱ و ۱۲ نسبت به بیشترین مقدار Q خود بهنجار هستند.

در شکل ۱۱ نمودار Q بر حسب طول موج برای نانوکره و بعضی نانوپوستههای کروی طلا (نقره) با گام ضخامت ۱ nm در محیط با ضریب شکست ۱ آمده است. طول موج تشدید پلاسمون نانوپوستهٔ کروی طلا با ضخامت ۱۲ نانومتر و قطر خارجی ۴۰ نانومتر در این محیط با طول موج تشدید پلاسمون برای نانوکرهٔ طلا با قطر ۴۰ نانومتر انطباق دارد. در برچسب

نمودارهای شکل ۱۱، اعدادی که بلافاصله بعد از (Ag) Au آمدهند ضخامت نانوپوستهٔ طلا (نقره) را مشخص میکنند. به همین ترتیب برای نانوکره و نانوپوستههای درون آب نیز مقادیر Q کلی نسبت به طول موج در شکل ۱۲ رسم شده است.

نمودار Qی نانوکرهٔ طلا (نقره) در محیط با ضریب شکست ۱۸۳۳ منطبق بر نمودار Qی پوستهٔ کروی طلا (نقره) با ضخامت ۱۲ (۱۷) نانومتر است. جهت نمایان شدن بهتر خواص پلاسمونی نانوپوسته طلا (نقره) در کاربردهای حسگری، تغییر طول موج تشدید نانوپوستهها نسبت به تغییر ضریب شکست



**شکل ۱۳**. (رنگی در نسخهٔ الکترونیکی) جابهجایی طول موج تشدید پلاسمون جایگزیده در بازهٔ ۳۳، از تغییرات ضریب شکست برای نانوکره و نانوپوستههای طلا (شکل سمت راست)، نانوکره و نانوپوسته نقره (شکل سمت چپ) محاسبه و رسم شده است. برچسب نمودار به ترتیب از بالا به پایین نانوکره طلا (نقره) با قطر نانومتر ۴۰ و نانوپوستهٔ طلا (نقره) با ضخامت ۳ (۲) نانومتر تـا ۱۲ (۱۷) نانومتر را نشان میدهد.

محیط اطراف از ۱ به ۱٬۳۳ مطابق شکل ۱۳ محاسبه شده است. RIS به تنهایی میتواند ملاکی تأثیر گذار در تعیین نوع و محدودهٔ کاربرد اپتیکی برای نانوپوستههای طلا با شکل و اندازههای متفاوت باشد.

## ۲. ۲. ۲. نتایج شبیهسازی

با افزایش شعاع یک حفره با گامهای ۱ نانومتری درون نانوکرهٔ طلا (نقره) با قطر ۴۰ نانومتر و ایجاد نانوپوستهٔ طلا (نقره) در محیطی با ضریب شکست ۱ مطابق شکل ۱۱، طیف پلاسمونی برای پوستههای کروی طلا (نقره) دارای ضخامت ۱۲ (۱۷) نانومتر و بیشتر، منطبق بر طیف و طول موج تحریک نانوکرهٔ ۴۰ نانومتری است. این انطباق خاصیت سطحی تحریک پلاسمون جایگزیده را تأیید میکند. حد ضخامت مؤثر برای نانوپوستهٔ طلا (نقره) در محیط هوا ۱۲ (۱۷) نانومتر است. حد ضخامت مؤثر به ضخامتی از نانوپوسته گفته می شود که با افزایش آن طیف پلاسمونی نانوپوسته همواره دچار تغییر نشود.

کاهش ضخامت پوسته در محیط با ضریب شکست هـوا، باعث افزایش طول موج تشدید نیز می شود. با تغییر ضـریب شکست محیط اطراف از هوا (۱) به آب (۱٫۳۳) مطابق شکل

۱۲، جابهجایی قرمز در طیف پلاسمونی همه نانوذرات مشاهده می شود. مطابق شکل ۱۲ الگوی افزایش طول موج تشديد همچنان با كاهش ضخامت نانوپوسته رعايت مي شود. در محیط با ضریب شکست ۱٬۳۳ همچون محیط با ضریب شکست ۱ نانویوستهٔ طلا (نقره) با ضخامت بیشتر از ۱۲ (۱۷) نانومتر همان خواص پلاسمونی نانوکره ۴۰ نانومتری را دارد. از بررسی و مقایسه شکلهای ۱۱، ۱۲ و ۱۳ می توان چنین نتیجه گرفت که فارغ از ضریب شکست محیط اطراف که عاملی تأثیر گذار در مشخصه یابی خواص پلاسمونی است، عامل ضخامت برای نانوپوستههای کروی طلا (نقره) با قطر خارجی ۴۰ نانومتر، تا زمانی در طیف جذبی و خواص یلاسمونی تأثیر گذار است که ضخامت نانویوسته کمتر از ۱۲ (۱۷) نانومتر باشد. جهت بررسی خواص حسگری نانوپوسته های طلا (نقره)، جابه جایی طول موج تشدید برای نانوکره و نانوپوسته های طلا (نقره) با قطر خارجی ۴۰ نانومتر در بازهٔ ۱ تـا ۱٬۳۳ ضریب شکست مطابق شـکل ۱۳ آمده است. برای نانوکره و نانوپوسته های طلا (نقره) با ضخامت ۳ (۲) تا ۱۲ (۱۷) نانومتر، مطابق شکل ۱۳ بیشترین RIS در بازه ۱ تا ۱٬۳۳ تغییر RI متعلق به نانویوستهٔ طلا

جلد ١٩، شمارة ۴

$$\begin{split} \mathcal{Q}_{\text{sca}} &= \frac{\mathsf{r}}{x^{\mathsf{r}}} \sum_{L=\mathsf{i}}^{\infty} (\mathsf{r}L+\mathsf{i}) \Big( \Big| a_L \, \big|^{\mathsf{r}} + \Big| b_L \, \big|^{\mathsf{r}} \Big) \,, \\ \mathcal{Q}_{\text{ex}} &= \frac{\mathsf{r}}{x^{\mathsf{r}}} \sum_{L=\mathsf{i}}^{\infty} (\mathsf{r}L+\mathsf{i}) \, Re \Big( \Big| a_L \, \big|^{\mathsf{r}} + \Big| b_L \, \big|^{\mathsf{r}} \Big) \,. \\ \text{cc} &= \mathsf{c} \, \mathsf{cl} \, \mathsf{c} \, \mathsf$$

z در اینجا می تواند x و یا mx باشد.

پیوست (ب) نرمافزار لومریکال یک برنامهٔ محاسباتی تخصصی جهت شبیهسازی برهمکنش میدان الکترومغناطیسی با اجسام دوبعدی و سه بعدی بر مبنای روش FDTD است. لومریکال شامل چهار زیر برنامهٔ زیر است: ۱) دیوایس جهت طراحی اجسام اپتیکی خاص دوبعدی و سهبعدی همچون سلولهای خورشیدی، ۲) سولوژن روش تفاضل محدود در حوزهٔ زمان جهت طراحی اجسام اپتیکی دارای تقارن و یا ساختارهای غیر پیچیده و شبیهسازی برهمکنش میدان الکترومغناطیسی با اجسام

۱. DVICE

(نقره) با ضخامت ۳ (۲) نانومتر و کمترین RIS متعلق به نانوپوسته با ضخامت ۱۲ (۱۷) نانومتر و نانوکرهٔ طلا (نقره) با قطر خارجی ۴۰ نانومتر است.

### ۳. جمع بندی

در این پژوهش، بسامد تشدید پلاسمون برای نانوذرات کروی طلا مشخص شد و نتیجه گرفتیم که نانوکرات طلا به دلیل دقت، حساسیت و الگودهی مناسب نسبت به تغییرات دیالکتریک محیط، میتوانند حسگرهای مطلوبی باشند. برای قطرهای مختلف نانوذرات طلا، بیشترین و کمترین RIS در محدودهٔ ضریب شکست ۱ تا ۱/۸ مشخص شد. همچنین بررسی شد که افزایش قطر نانوذرات، سبب افزایش RIS، پهن شدن طیف، تقلیل، افزایش سهم پراکندگی و اختلاف در همپوشانی مکان قلهٔ جذب و پراکندگی میشود.

همچنین خواص پلاسمونی نانوپوستهٔ کروی طلا (نقره) با قطر خارجی ۴۰ نانومتر و ضخامت متفاوت در محیط با ضریب شکست ۱ و ۱٬۳۳ بررسی و بسامد تشدید پلاسمون برای هر ذره مشخص شد و استنباط شد با کاهش ضخامت و یا افزایش RI محیط، طیف جذبی برای نانوپوسههای کروی دارای جابهجایی سرخ خواهد شد. سپس حد ضخامت مؤثر برای نانوپوستهٔ طلا (نقره) در دو محیط آب و هوا بررسی و از آن، بی تأثیر بودن RI محیط اطراف در تعیین حد این ضخامت نتیجه شد. در پایان RIS در بازهٔ ۱ تا ۱٬۳۳ برای نانوپوستههای طلا (نقره) با قطر خارجی ۴۰ نانومتر محاسبه و حساس ترین و غیر حساس ترین نانوپوسته نسبت به تغییر RI محیط مشخص شد.

### پيوست (الف)

Q<sub>abs</sub>، Q<sub>sca</sub> و Q<sub>ex</sub> به ترتیب ضرایب سطح مقطع پراکنـدگی، جذب و خاموشی هستند. رابطهٔ این ضرایب بـا یکـدیگر طبـق معادلهٔ زیر نوشته میشود:

$$Q_{\rm abs} = Q_{\rm ex} - Q_{\rm sca}$$
,

۲. FDTD Solution

تعریف شده در نرمافزار، ۳) اینترکانکت ٔ جهت کد نویسی و طراحی اجسام، و در نهایت ۴) مُد سولوژن ٔ جهت بررسی مدهای انتشاری همچنین حل مسئله با استفاده از سایر تقریبهاست. محیط این زیربرنامه دارای ۱۰ قسمت اصلی زیر است:

- ۱. نوار وظیفهٔ اصلی: در این نوار امکانات بارگذاری، ذخیرهسازی، انتخاب و مدیریت پوشههای شبیهسازی فراهم شده است. همچنین امکان انتخاب و تغییر نوع یکاهای اندازه گیری جهت طراحی و شبیهسازی فراهم شده است.
- ۲. کتابخانهٔ ساختاری مواد: امکان انتخاب و ایجاد توابع
   دیالکتریک برای ساختارهای مختلف از طریق مقداردهی
   دستی برای عناصر و ترکیبها وجود دارد.
- ۳. ابزار تحلیلگر: امکان ایجاد پوشههای کدنویسی جهت
   ۳. تحلیل و یا ساماندهی مقادیر در حال محاسبه وجود دارد.
- ۸. مرجع میدان: می توان میدانهای الکترومغناطیسی با قطبشها
   و دامنههای متفاوت را تعریف کرد.
- د نوار ویرایش: ویرایش و حذف ساختارهای طراحی شده در بر نامه تعبیه شده است.
- ۶. نوار اشیاء: کلیهٔ اجسام و ساختارهای تعریف شده در محیط

برنامه در دسترس است و امکان انتخاب جسم مورد نظر نیز تعبیه شده است.

- ۷. نوار نتیجه: نتایج و دادههای خام اولیه که برای هر جسم،
   میدان و یا مرز بهدست آمده است به صورت دادههای
   ماتریسی قابل نمایش است.
- ۸ مدیریت کدخط: امکان انتخاب، بارگذاری و یا ویرایش کدخطهای محاسباتی ثانویه وجود دارد. همچنین در این ابزار دادههای خام استخراج شده از متغییرهای تعریف شده در ابزار تحلیلگر مورد بررسی نهایی قرار میکیرد. دستوراهای مربوط به نمایش دادههای نهایی بر مبنای یکاهای دلخواه در این ابزار است.
- ۹. محیط ویرایش: داده های نهایی که در قسمت مدیریت
   کدخط دستور نمایش دادن آنها داده شد، در این محیط قابل
   نمایش و ویرایش نهایی است.
- ۱۰. نوار مقادیر: تمام مقادیر نهایی محاسبه شده و قابل نمایش به صورت ماترییس نمایش داده می شود. مقادیر نمایش داده شده در این نوار قابلیت انتقال به برنامه های دیگر از جمله متلب را دارند.

مراجع

Engineering and Technology (2016).

- 9. N V Voshchinnikov and V G Farafonov, *Astrophysics and Space Science* **204**,1 (1993) 19.
- 10. M I Mishchenko, L D Travis and A A Lacis. Cambridge University Press (2002).
- 11. Y T Long and C Jing, "Localized Surface Plasmon Resonance Based Nanobiosensors", Springer (2014).
- A Holleman and N Wiberg, "Lehrbuch der Anorganischen Chemie", 33rd Ed., de Gruyte (1985) 1486.
- 13. S K Agasti, S S Kim, X C Li and V M Rotello, *Chem. Rev.* **112** (2012) 2739.
- 14. C J Murphy, A M Gole, J W Stone, P N Sisco, A M Alkilany, E C Goldsmith and S C Baxter, Acc. Chem. Res. 41 (2008) 1721.
- 15. P Ghosh, G Han, M De, C K Kim, and V M Rotello *Adv. Drug Deliv. Rev.* **60** (2008) 1307.
- 16. N S Abadeer and C J Murphy, J. Phys. Chem. C 120 (2016) 469.
- 17. M Jahn, S Patze, I J Hidi, R Knipper, A I Radu, A

- 1. A M Stefan, "Plasmonics Fundamentals and Applications", Springer Science & Business Media (2007).
- 2. W A Katherine and R P Van Duyne, Annu. Rev. Phys. Chem. 58 (2007) 267.
- 3. J K Prashant *et al.*, *The Journal of Physical Chemistry* B **110**, 14 (2006) 7238.
- 4. M M Miller and A A Lazarides. *The Journal of Physical Chemistry* B 109, 46 (2005) 21556.
- 5. A Elrashidi, *The Journal of Computational and Theoretical Nanoscience* **13**,1 (2016) 280.
- 6. A Elrashidi, Journal of Computational and Theoretical Nanoscience 13, 1 (2016) 280.
- 7. K Yee, *IEEE Transactions on antennas and propagation* 14, 3 (1966) 302.
- 8. A Z Elsherbeni and D Veysel. "The Finite-Difference Time-Domain Method for Electromagnetics with MATLAB Simulations." The Institution of

1. INTERCONNECT

Y. MODE Solution

- 20. V Amendola, and M Meneghetti. J. Mater. Chem. 22 (2012) 24501.
- 21. R L Olmon *et al.*, *Physical Review* B **86**, 23 (2012) 235147.
- 22. E Martinsson et al., Plasmonics 9, 4 (2014) 773.

Muhlig, S Yuksel, V Peksa, K Weber and T Mayerhofer, *Analyst* **141** (2016) 756.

- 18. S Schlücker, Angew. Chem., Int. Ed. 53 (2014) 4756.
- 19. R J Barsotti, M D Vahey, R Wartena, Y Chiang, J Voldman and F Stellacci, *Small* **3** (2007) 488.