

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

دانشکده علوم پایه
گروه فیزیک
(گرایش حالت جامد)

بررسی خواص اپتیکی آرایه‌های متشکل از نانوذرات فلزی با استفاده از روش تقریب دوقطبی مجزا

از:

سمیرا رادفر

اساتید راهنما:

دکتر صابر فرجامی شایسته

دکتر فرهاد اسمعیلی قدسی

تقدیم به

پدر و مادر عزیزم

تقدیر و تشکر

پس از شکر و سپاس پروردگار که بزرگترین امید و یاور در تمام لحظات زندگی است، بر خود واجب می‌دانم از همه عزیزانی که مرا در انجام این پژوهش با همدلی و همکاری خویش یاری نمودند قدردانی نمایم.

سپاس فراوان و سرشار از عشق خود را نثار دو گوهر ارزشمند، پدر و مادر عزیزم که همیشه در کنارم بودند و مرا حمایت کردند، می‌نمایم.

از اساتید راهنمای ارجمند، جناب آقای دکتر فرجامی و جناب آقای دکتر قدسی که صمیمانه و متعهدانه در راهنمایی اینجانب از هیچ کوششی دریغ ننمودند و همواره مشوق و الگوی نیکو در ایفای وظایف بودند، از صمیم قلب تشکر می‌کنم.

همچنین از جناب آقای دکتر رجایی و جناب آقای دکتر محمودی که داوری این پایان‌نامه را بر عهده داشتند و از نماینده محترم تحصیلات تکمیلی، جناب آقای دکتر صفاری نهایت تشکر را دارم.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
ذ	چکیده فارسی
ر	چکیده انگلیسی
۱	فصل اول: مقدمه
۶	فصل دوم: پلاسمون سطحی
۷	(۱-۲) مقدمه
۷	(۲-۲) معادلات ماکسول و رابطه پاشیدگی برای امواج طولی و عرضی
۹	(۳-۲) تابع دی‌الکتریک
۹	(۴-۲) مدل درود
۱۱	(۵-۲) پلاسمون‌های سطحی
۱۶	(۶-۲) تابع دی‌الکتریک نانوذرات
۱۹	فصل سوم: بررسی خواص اپتیکی نانوذرات با روش‌های مختلف
۲۰	(۱-۳) مقدمه
۲۰	(۲-۳) تئوری Mie
۲۱	(۱-۲-۳) پاسخ شبه‌استاتیک نانوذره فلزی کروی به میدان الکتريکی
۲۲	(۲-۲-۳) اثر اندازه نانوذرات فلزی روی خواص اپتیکی
۲۶	(۳-۲-۳) خاموشی برای کره‌های نقره
۲۷	(۴-۲-۳) میدان الکتريکی برای ذرات کروی
۲۹	(۵-۲-۳) طیف خاموشی برای شبه‌کره
۳۱	(۶-۲-۳) تشدیدهای وابسته به مورفولوژی
۳۲	(۷-۲-۳) فاز ترمودینامیک
۳۳	(۸-۲-۳) نانوذرات فلزات نجیب در محیط‌های مختلف
۳۴	(۹-۲-۳) نانوذرات طلا و نقره در شیشه
۳۵	(۱۰-۲-۳) پوسته‌های فلزی روی هسته‌های شفاف
۳۶	(۱۱-۲-۳) مقایسه روش تقریب دوقطبی مجزا با تئوری Mie و تقریب شبه‌استاتیک
۳۹	(۳-۳) روش تفاضل محدود در حوزه زمان (FDTD)
۴۰	(۱-۳-۳) مدل کردن کره نقره با روش FDTD و مقایسه با تئوری Mie
۴۱	(۲-۳-۳) نانوذره کروی طلا
۴۳	(۳-۳-۳) زنجیره‌های نانوذرات

۴۵	آرایه میله‌های طلای مستطیلی (۴-۳-۳)
۴۶	فصل چهارم: روش تقریب دوقطبی مجزا
۴۷	(۱-۴) مقدمه
۴۷	(۲-۴) روش تقریب دوقطبی مجزا
۴۹	(۳-۴) کمیت‌های اپتیکی در روش تقریب دوقطبی مجزا
۴۹	(۱-۳-۴) قطبش
۵۱	(۲-۳-۴) قطبش‌پذیری
۵۲	(۳-۳-۴) سطح مقطع‌های اپتیکی
۵۳	(۴-۴) دقت روش تقریب دوقطبی مجزا
۵۵	(۵-۴) بررسی عوامل موثر در تشدید پلاسمون سطحی نانوذرات با استفاده از نرم‌افزار DDSCAT
۵۵	(۱-۵-۴) تاثیر اندازه یک نانوذره کروی
۶۰	(۲-۵-۴) تاثیر محیط اطراف نانوذره
۶۳	(۳-۵-۴) نانوذره به شکل استوانه
۶۶	(۴-۵-۴) نانوذره به شکل دیسک
۶۹	(۵-۵-۴) مقایسه بیضیگون، استوانه و مکعب مستطیل باطول و پهناى برابر
۷۲	(۶-۵-۴) مقایسه سه شکل کره، هگزاگونال و مکعب با حجم برابر
۷۵	(۷-۵-۴) مقایسه کره و استوانه هم‌حجم از دو جنس طلا و نقره
۷۶	فصل پنجم: بررسی خواص اپتیکی آرایه‌های یک‌بعدی و دوبعدی نانوذرات با روش تقریب دوقطبی مجزا
۷۷	(۱-۵) مقدمه
۷۸	(۲-۵) آرایه‌های یک‌بعدی
۷۸	(۱-۲-۵) مد طولی
۷۸	(۱-۱-۲-۵) بررسی اثر اندازه نانوذرات
۸۰	(۲-۱-۲-۵) بررسی اثر فاصله بین نانوذرات
۸۳	(۳-۱-۲-۵) بررسی اثر تعداد نانوذرات
۸۶	(۴-۱-۲-۵) بررسی اثر محیط اطراف
۸۸	(۵-۱-۲-۵) بررسی اثر جنس نانوذرات
۹۱	(۲-۲-۵) مد عرضی
۹۱	(۱-۲-۲-۵) بررسی اثر اندازه نانوذرات
۹۳	(۲-۲-۲-۵) بررسی اثر فاصله بین نانوذرات
۹۴	(۳-۲-۲-۵) بررسی اثر تعداد نانوذرات
۹۶	(۴-۲-۲-۵) بررسی اثر محیط اطراف
۹۷	(۳-۵) آرایه‌های دوبعدی
۹۷	(۱-۳-۵) آرایه شامل شش نانوذره کروی به شکل L

۱۰۰	آرایه شامل نه نانوذره کروی (۲-۳-۵)
۱۰۰	بررسی اثر اندازه نانوذرات (۱-۲-۳-۵)
۱۰۳	بررسی اثر فاصله نانوذرات (۲-۲-۳-۵)
۱۰۵	بررسی اثر جنس نانوذرات (۳-۲-۳-۵)
۱۰۷	بررسی اثر نحوه چینش نانوذرات در آرایه (۴-۲-۳-۵)

۱۱۱ نتیجه‌گیری و پیشنهادات

۱۱۲ نتیجه‌گیری

۱۱۴ پیشنهادات

۱۱۵ مراجع

فهرست شکل‌ها

صفحه

عنوان

- شکل ۱-۱: نمودار تعداد مقالات منتشر شده درباره نانوذرات طلا و نقره از ۱۹۹۰. ۳
- شکل ۱-۲: نمودار تعداد مقالات علمی منتشر شده سالیانه که عبارت "پلاسمون سطحی" در عنوان یا چکیده آن‌ها وجود دارد، جهت نشان دادن رشد شاخه نانوفوتونیک فلزات. ۴
- شکل ۱-۲: تحریک یک موج پلاسمون سطحی در فصل مشترک بین یک فلز و یک جسم دی‌الکتریک یا خلأ. ۱۲
- شکل ۲-۲: تصویر شماتیک نوسان پلاسمونی برای نانوذرات کروی. ۱۶
- شکل ۱-۳: شکل ساده برهم‌کنش نور با نانوذرات فلزی، برای ذرات خیلی کوچکتر از طول موج نور دارای برانگیختگی دوقطبی با روش شبه‌استاتیک و همچنین برای ذرات قابل مقایسه با طول موج نور با برانگیختگی چندقطبی. ۲۱
- شکل ۲-۳: تصویری از تقسیم طیف خاموشی کل Mie به دوقطبی، چهارقطبی و مدهای مرتبه بالاتر. ۲۴
- شکل ۳-۳: تشدید پلاسمون سطحی نانوذرات کروی طلا با اندازه‌های ۹، ۲۲، ۴۸ و ۹۹ نانومتر. ۲۵
- شکل ۴-۳: قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک نقره به عنوان تابعی از طول موج، همچنین بازده خاموشی کره‌های نقره به شعاع‌های ۳۰ و ۶۰ نانومتر به دست آمده از تقریب شبه‌استاتیک و تئوری Mie. ۲۶
- شکل ۵-۳: میدان الکتریکی برای کره‌های نقره به شعاع‌های ۳۰ و ۶۰ نانومتر در خلأ با استفاده از تئوری Mie. ۲۸
- شکل ۶-۳: مقایسه بازده خاموشی، افزایش میدان الکتریکی میانگین سطحی، و افزایش میدان الکتریکی برای نقاط خاص کره‌های نقره به شعاع‌های ۳۰ و ۶۰ نانومتر در خلأ. ۲۹
- شکل ۷-۳: محاسبه الکترودینامیکی دقیق از طیف خاموشی شبه‌کره‌های پخیده با نسبت محورهای بزرگ به کوچک متغیر. ۳۰
- شکل ۸-۳: بازده خاموشی قطره‌های آب در هوا با تغییر اندازه، تشدیدهای وابسته به مورفولوژی را نشان می‌دهد. ۳۱
- شکل ۹-۳: طیف بازده خاموشی محاسبه شده برای نانوذرات طلا برای فاز جامد در دماهای متفاوت و فاز مایع و همچنین طیف بازده خاموشی محاسبه شده نانوذرات جامد و مایع جیوه. ۳۲
- شکل ۱۰-۳: سطح مقطع خاموشی نانوذرات طلا، نقره و مس در محیط‌های مختلف. ۳۳
- شکل ۱۱-۳: طیف خاموشی اپتیکی نانوذرات نقره و طلا در شیشه. ۳۴
- شکل ۱۲-۳: طیف بازده خاموشی محاسبه شده برای کره‌های SiO_2 پوشیده شده با نقره با تغییر اندازه هسته. ۳۵
- شکل ۱۳-۳: طیف بازده خاموشی محاسبه شده برای کره‌های SiO_2 پوشش داده شده با نقره با تغییر ضخامت پوسته. ۳۶
- شکل ۱۴-۳: خواص اپتیکی کره‌های طلا با دو شعاع مختلف، که با استفاده از تئوری Mie، تقریب شبه‌استاتیک و روش تقریب دوقطبی مجزا محاسبه شده است. ۳۷
- شکل ۱۵-۳: بازده خاموشی کره طلا به دست آمده از تئوری دقیق Mie و روش DDA با دو تعداد مختلف دوقطبی. ۳۸
- شکل ۱۶-۳: بازده خاموشی برای شبه‌کره‌های طلا با نسبت ثابت محور بزرگ به کوچک، اما با دو اندازه مختلف برای محورها با تقریب الکترواستاتیک و روش DDA. ۳۹

- شکل ۳-۱۷: تصویر شبکه استاندارد Yee که برای روش FDTD استفاده می‌شود. ۴۰
- شکل ۳-۱۸: پاسخ طیفی افزایش میدان نزدیک نرمالیزه در مرکز نانوذره با روش FDTD و تئوری Mie ، همچنین توزیع میدان تشدید برای دو اندازه متفاوت نانوذره. ۴۱
- شکل ۳-۱۹: تعیین فرکانس تشدید پلاسمون یک ذره، میرایی نوسانی میدان افزایش یافته $E(t)$ در مرکز نانوذره بعد از قطع شدن موج تخت و تبدیل فوریه $E(t)$ با پیک پلاسمون سطحی دوقطبی. ۴۲
- شکل ۳-۲۰: توزیع میدان الکتریکی در اطراف ساختار موجبر پلاسمونی شامل ۵ ذره. ۴۳
- شکل ۳-۲۱: انرژی‌های تشدید جمعی آرایه‌های نانوذرات. موقعیت تشدید دوقطبی کره‌های طلا در زنجیره نانوذرات برای قطبش در مد طولی و مد عرضی بر اساس طول زنجیره و همچنین بستگی به فاصله بین ذره‌ای برای زنجیره ۵ نانوذره. ۴۴
- شکل ۳-۲۲: طیف عبور برای آرایه یک‌بعدی میله‌های طلا با فاصله‌های متفاوت بین میله‌ها. ۴۵
- شکل ۴-۱: تقریب زدن نانوذرات توسط آرایه دوقطبی‌ها در روش تقریب دوقطبی مجزا. ۴۸
- شکل ۴-۲: بازده‌های پراکندگی و جذب برای یک کره به دست آمده از تئوری Mie و خطاهای کسری در بازده‌های پراکندگی و جذب محاسبه شده با DDSCAT. ۵۴
- شکل ۴-۳: مشابه شکل ۴-۲ است، اما ضریب شکست کره متفاوت است. ۵۴
- شکل ۴-۴: بازده خاموشی نانوذره کروی طلا با شعاع‌های متفاوت. ۵۵
- شکل ۴-۵: بازده جذب نانوذره کروی طلا با شعاع‌های متفاوت. ۵۶
- شکل ۴-۶: بازده پراکندگی نانوذره کروی طلا با شعاع‌های متفاوت. ۵۶
- شکل ۴-۷: بازده‌های جذب، پراکندگی و خاموشی نانوذرات کروی طلا با شعاع‌های متفاوت. ۵۷
- شکل ۴-۸: شدت میدان الکتریکی در صفحه YZ گذرنده از مرکز کره‌های با شعاع‌های متفاوت. ۵۸
- شکل ۴-۹: شدت میدان الکتریکی در صفحه XY گذرنده از مرکز کره‌های با شعاع‌های متفاوت. ۵۹
- شکل ۴-۱۰: نمایش سه بعدی شدت میدان الکتریکی در دو صفحه عمود بر هم XY و YZ گذرنده از مرکز نانوکره. ۶۰
- شکل ۴-۱۱: بازده خاموشی نانوذره کروی طلا در چهار محیط مختلف با ضریب شکست‌های متفاوت. ۶۱
- شکل ۴-۱۲: شدت میدان الکتریکی نانوکره طلا در صفحه YZ گذرنده از مرکز کره در چهار محیط مختلف با ضریب شکست‌های متفاوت. ۶۱
- شکل ۴-۱۳: شدت میدان الکتریکی نانوکره طلا در صفحه XY گذرنده از مرکز کره در چهار محیط مختلف با ضریب شکست‌های متفاوت. ۶۲
- شکل ۴-۱۴: بازده خاموشی نانوذرات کروی طلا با سه شعاع مختلف در دو محیط با ضریب شکست‌های متفاوت. ۶۲
- شکل ۴-۱۵: بازده خاموشی برای استوانه‌های طلا با قطر ثابت و طول‌های متفاوت در دو محیط هوا و آب. ۶۳
- شکل ۴-۱۶: شدت میدان الکتریکی برای استوانه با سه طول مختلف در صفحه XY در محیط هوا. ۶۴
- شکل ۴-۱۷: شدت میدان الکتریکی برای استوانه با سه طول مختلف در صفحه XY در محیط آب. ۶۵
- شکل ۴-۱۸: بازده خاموشی نانودیسک‌های طلا با ارتفاع ثابت و سه قطر مختلف در دو محیط هوا و آب. ۶۶
- شکل ۴-۱۹: شدت میدان الکتریکی در صفحه XY گذرنده از مرکز نانودیسک‌های طلا با ارتفاع ثابت و سه قطر مختلف در محیط هوا. ۶۷

- شکل ۴-۲۰: شدت میدان الکتریکی در صفحه XY گذرنده از مرکز نانودیسک‌های طلا با ارتفاع ثابت و سه قطر مختلف در محیط آب. ۶۸
- شکل ۴-۲۱: شدت میدان الکتریکی برای نانودیسک طلا در صفحات XY و YZ و نیز به صورت سه‌بعدی در هر دو صفحه. ۶۹
- شکل ۴-۲۲: بازده خاموشی برای سه شکل مختلف استوانه، مکعب مستطیل و بیضیگون با طول و پهنای برابر. ۷۰
- شکل ۴-۲۳: شدت میدان الکتریکی مکعب مستطیل در صفحات XY و XZ . ۷۰
- شکل ۴-۲۴: شدت میدان الکتریکی استوانه در صفحات XY و XZ . ۷۱
- شکل ۴-۲۵: شدت میدان الکتریکی بیضیگون در صفحات XY و XZ . ۷۱
- شکل ۴-۲۶: بازده خاموشی سه نانوذره به شکل‌های کره، مکعب و هگزاگونال با حجم برابر از جنس طلا. ۷۲
- شکل ۴-۲۷: بازده خاموشی سه نانوذره به شکل‌های کره، مکعب و هگزاگونال با حجم برابر از جنس نقره. ۷۳
- شکل ۴-۲۸: شدت میدان الکتریکی برای هگزاگونال از جنس طلا. ۷۳
- شکل ۴-۲۹: شدت میدان الکتریکی برای هگزاگونال از جنس نقره. ۷۴
- شکل ۴-۳۰: بازده خاموشی استوانه و کره هم حجم از دو جنس طلا و نقره. ۷۵
- شکل ۵-۱: مدهای عرضی و طولی پلاسمون سطحی در آرایه شامل دو نانوذره کروی. ۷۷
- شکل ۵-۲: بازده خاموشی آرایه سه نانوذره کروی طلا با شعاع‌های متفاوت در مد طولی. ۷۹
- شکل ۵-۳: بازده جذب آرایه سه نانوذره کروی طلا با شعاع‌های متفاوت در مد طولی. ۷۹
- شکل ۵-۴: بازده پراکندگی آرایه سه نانوذره کروی طلا با شعاع‌های متفاوت در مد طولی. ۸۰
- شکل ۵-۵: شدت میدان الکتریکی برای آرایه سه نانوذره کروی طلا با شعاع‌های متفاوت در صفحه XY گذرنده از مرکز نانوذرات در مد طولی. ۸۰
- شکل ۵-۶: بازده خاموشی آرایه سه نانوکره طلا با فاصله‌های متفاوت در مد طولی و تک نانوذره کروی هم‌اندازه. ۸۱
- شکل ۵-۷: بازده جذب آرایه سه نانوکره طلا با فاصله‌های متفاوت در مد طولی و تک نانوذره کروی هم‌اندازه. ۸۲
- شکل ۵-۸: بازده پراکندگی آرایه سه نانوکره طلا با فاصله‌های متفاوت در مد طولی و تک نانوذره کروی هم‌اندازه. ۸۲
- شکل ۵-۹: شدت میدان الکتریکی برای آرایه سه نانوذره کروی طلا با فاصله‌های متفاوت در صفحه XY گذرنده از مرکز نانوذرات در مد طولی. ۸۳
- شکل ۵-۱۰: بازده خاموشی آرایه با تعداد مختلف نانوذرات کروی طلا در مد طولی و یک کره هم‌اندازه. ۸۳
- شکل ۵-۱۱: بازده جذب آرایه با تعداد مختلف نانوذرات کروی طلا در مد طولی و یک کره هم‌اندازه. ۸۴
- شکل ۵-۱۲: بازده پراکندگی آرایه با تعداد مختلف نانوذرات کروی طلا در مد طولی و یک کره هم‌اندازه. ۸۴
- شکل ۵-۱۳: شدت میدان الکتریکی برای آرایه شامل سه تعداد مختلف نانوذرات کروی طلا در مد طولی. ۸۵
- شکل ۵-۱۴: بازده خاموشی آرایه سه نانوکره طلا در چهار محیط مختلف در مد طولی. ۸۶
- شکل ۵-۱۵: بازده جذب آرایه سه نانوکره طلا در چهار محیط مختلف در مد طولی. ۸۷
- شکل ۵-۱۶: بازده پراکندگی آرایه سه نانوکره طلا در چهار محیط مختلف در مد طولی. ۸۷
- شکل ۵-۱۷: شدت میدان الکتریکی برای آرایه سه نانوذره کروی طلا در چهار محیط مختلف در صفحه XY گذرنده از مرکز نانوذرات در مد طولی. ۸۸
- شکل ۵-۱۸: مقایسه بازده خاموشی آرایه سه نانوذره کروی طلا و نقره در مد طولی. ۸۹
- شکل ۵-۱۹: بازده‌های خاموشی، جذب و پراکندگی برای آرایه سه نانوذره کروی از جنس طلا در مد طولی. ۸۹

- شکل ۵-۲۰: بازده‌های خاموشی، جذب و پراکندگی برای آرایه سه نانوذره کروی از جنس نقره در مد طولی. ۹۰
- شکل ۵-۲۱: شدت میدان الکتریکی برای آرایه سه نانوذره کروی از جنس‌های طلا و نقره در صفحه XY گذرنده از مرکز نانوذرات در مد طولی. ۹۱
- شکل ۵-۲۲: بازده خاموشی آرایه سه نانوذره کروی طلا با شعاع‌های مختلف در مد عرضی. ۹۲
- شکل ۵-۲۳: شدت میدان الکتریکی برای آرایه سه نانوذره کروی طلا با شعاع‌های مختلف در مد عرضی. ۹۲
- شکل ۵-۲۴: بازده خاموشی سه نانوکره طلا با فاصله‌های متفاوت در مد عرضی و کره هم‌اندازه. ۹۳
- شکل ۵-۲۵: شدت میدان الکتریکی برای آرایه سه نانوذره کروی طلا با فاصله‌های متفاوت در صفحه YZ گذرنده از مرکز نانوذرات در مد عرضی. ۹۴
- شکل ۵-۲۶: بازده خاموشی آرایه نانوذرات شامل تعداد مختلف نانوکره طلا در مد عرضی. ۹۵
- شکل ۵-۲۷: شدت میدان الکتریکی برای آرایه شامل سه تعداد مختلف نانوذرات کروی طلا در مد عرضی. ۹۵
- شکل ۵-۲۸: بازده خاموشی آرایه سه نانوکره طلا در چهارمحیط مختلف در مد عرضی. ۹۶
- شکل ۵-۲۹: شدت میدان الکتریکی برای آرایه سه نانوذره کروی طلا در چهار محیط مختلف در مد عرضی. ۹۶
- شکل ۵-۳۰: شدت میدان الکتریکی برای آرایه به شکل L با چهار نانوذره در جهت میدان الکتریکی فرودی. ۹۸
- شکل ۵-۳۱: بازده‌های خاموشی، جذب و پراکندگی برای آرایه به شکل L با چهار نانوذره در جهت میدان الکتریکی فرودی. ۹۸
- شکل ۵-۳۲: شدت میدان الکتریکی برای آرایه به شکل L با سه نانوذره در جهت میدان الکتریکی فرودی. ۹۹
- شکل ۵-۳۳: بازده‌های خاموشی، جذب و پراکندگی برای آرایه به شکل L با سه نانوذره در جهت میدان الکتریکی فرودی. ۹۹
- شکل ۵-۳۴: بازده خاموشی آرایه دو بعدی ۹ نانوکره طلا با شعاع‌های مختلف. ۱۰۰
- شکل ۵-۳۵: بازده جذب آرایه دو بعدی ۹ نانوکره طلا با شعاع‌های مختلف. ۱۰۱
- شکل ۵-۳۶: بازده پراکندگی آرایه دوبعدی ۹ نانوکره طلا با شعاع‌های مختلف. ۱۰۱
- شکل ۵-۳۷: شدت میدان الکتریکی برای آرایه ۹ نانوذره کروی طلا با شعاع‌های مختلف. ۱۰۲
- شکل ۵-۳۸: بازده خاموشی آرایه دو بعدی ۹ نانوکره طلا با فاصله‌های متفاوت. ۱۰۳
- شکل ۵-۳۹: بازده جذب آرایه دوبعدی ۹ نانوکره طلا با فاصله‌های متفاوت. ۱۰۴
- شکل ۵-۴۰: بازده پراکندگی آرایه دوبعدی ۹ نانوکره طلا با فاصله‌های متفاوت. ۱۰۴
- شکل ۵-۴۱: شدت میدان الکتریکی برای آرایه ۹ نانوذره کروی طلا با فاصله‌های متفاوت. ۱۰۵
- شکل ۵-۴۲: مقایسه بازده خاموشی آرایه دوبعدی ۹ نانوکره از جنس‌های طلا و نقره. ۱۰۶
- شکل ۵-۴۳: شدت میدان الکتریکی برای آرایه ۹ نانوذره کروی از جنس‌های طلا و نقره. ۱۰۶
- شکل ۵-۴۴: چینش ۹ نانوذره کروی طلا به شکل شبکه‌های مربعی، مستطیلی و شش‌ضلعی. ۱۰۷
- شکل ۵-۴۵: بازده خاموشی برای آرایه ۹ نانوذره کروی طلا به شکل شبکه‌های مربعی، مستطیلی و شش‌ضلعی. ۱۰۸
- شکل ۵-۴۶: بازده جذب برای آرایه ۹ نانوذره کروی طلا به شکل شبکه‌های مربعی، مستطیلی و شش‌ضلعی. ۱۰۸
- شکل ۵-۴۷: بازده پراکندگی برای آرایه ۹ نانوذره کروی طلا به شکل شبکه‌های مربعی، مستطیلی و شش‌ضلعی. ۱۰۹
- شکل ۵-۴۸: شدت میدان الکتریکی برای آرایه ۹ نانوذره کروی طلا به شکل شبکه‌های مربعی، مستطیلی و شش‌ضلعی. ۱۱۰

بررسی خواص اپتیکی آرایه‌های متشکل از نانوذرات فلزی با استفاده از روش تقریب دوقطبی مجزا

سمیرا رادفر

در این پایان‌نامه با استفاده از روش تقریب دوقطبی مجزا و توسط نرم‌افزار DDSCAT به بررسی تشدید پلاسمون سطحی در نانوذرات تک و آرایه‌های یک‌بعدی و دوبعدی نانوذرات پرداختیم. عوامل موثر در تشدید پلاسمون سطحی مانند اندازه، شکل و جنس نانوذرات، تعداد آن‌ها در آرایه، فاصله‌شان از یکدیگر و نحوه چینش آن‌ها و همچنین محیط دی‌الکتریک اطراف را تغییر دادیم و بازده‌های جذب، پراکندگی و خاموشی را به دست آوردیم. با رسم نمودارهای بازده جذب، پراکندگی و خاموشی، اثر تغییر در عوامل ذکر شده را بررسی کردیم. همچنین برای بررسی شدت میدان الکتریکی، با استفاده از نرم‌افزار Mayavi2 پروفایل میدان را نیز رسم نمودیم. نتایج نشان می‌دهند که افزایش اندازه نانوذرات، افزایش ضریب شکست محیط اطراف، افزایش تعداد نانوذرات، کاهش فاصله بین نانوذرات و افزایش نسبت ابعاد در نانوذرات غیرکروی سبب افزایش بازده‌های جذب، پراکندگی و خاموشی و همچنین جابجایی قرمز پیک تشدید پلاسمون سطحی می‌شوند. هر چه نانوذره بزرگتر باشد، در اثر افزایش ضریب شکست محیط، جابجایی قرمز بیشتر می‌شود. در مد طولی، بیشینه شدت میدان الکتریکی در ناحیه بین نانوذرات مشاهده می‌شود که با افزایش اندازه نانوذرات و کاهش فاصله بین آن‌ها این شدت بیشتر می‌شود. در نانوذرات غیرکروی، بیشترین شدت میدان الکتریکی در رئوس نانوذره قرار دارد. در مد عرضی با اعمال تغییر در عوامل موثر در تشدید، تاثیر چندانی مشاهده نمی‌شود و می‌توان گفت که مد عرضی از برهم‌کنش‌های بین ذره‌ای تاثیر نمی‌پذیرد. در این مد، شدت میدان الکتریکی در ناحیه بین نانوذرات بیشینه نیست، بلکه بیشینه شدت میدان در دو سمت دیگر نانوذرات که در جهت میدان هستند، قرار دارد. نانوذرات نقره نسبت به نانوذرات طلا، تشدید پلاسمونی شدیدتر و تیزتر و بازده خاموشی بیشتر و همچنین بیشینه شدت میدان بیشتری دارند و تغییرات شدت میدان برای آن‌ها در محدوده بزرگ‌تری اتفاق می‌افتد. از این نتایج، ویژگی‌های مناسب نانوذرات و محیط اطراف آن‌ها که سبب افزایش بازده و بهبود روش‌ها در زمینه‌های مختلف مانند سلول‌های خورشیدی می‌شود، به دست می‌آید.

واژه‌های کلیدی: آرایه‌های نانوذرات فلزی، تشدید پلاسمون سطحی، روش تقریب دوقطبی مجزا.

Abstract

An Investigation of Optical Properties of Metal Nanoparticle Arrays by the Discrete Dipole Approximation Method

Samira Radfar

In this thesis, we studied the surface plasmon resonance in single nanoparticles and 1D and 2D nanoparticle arrays by the Discrete Dipole Approximation method by the DDSCAT software. By changing the effective factors in surface plasmon resonance such as size, shape, type of material, number of nanoparticles in arrays, their interparticle spacing, their arrangement in arrays, and the dielectric of surrounding medium, we obtained the absorption, scattering, and extinction efficiencies. By plotting the absorption, scattering and extinction efficiencies, we investigated the influence of the above factors changes. Also we plotted the profile of the electric field by Mayavi2 software. The results show that the increase in nanoparticles size, refractive index of surrounding medium, number of nanoparticles, aspect ratio of nonspherical nanoparticles, and also the decrease in interparticle spacing lead to an increase in absorption, scattering, extinction efficiencies, and red shift in surface plasmon resonance peak. Greater nanoparticles have higher red shift by increase in the medium refractive index. In longitudinal mode, the maximum of electric field intensity between nanoparticles is observed and increases when the size of nanoparticles increases or their interparticle spacing decreases. At nonspherical nanoparticles, the maximum of electric field intensity resides in the sharp edges. In transverse mode, by changing the effective factors in resonance, the main effects are not observable and it seems that the transverse mode does not favor for interparticle interactions. In this mode, the electric field intensity between nanoparticles has no maximum, but on the other two sides of the particles, which are along the electric field direction. Silver nanoparticles have more intense and sharper plasmonic resonance and more extinction efficiency than gold nanoparticles, with a wider range of field variation intensity. According to these results, suitable properties of nanoparticles and their surrounding medium that causes an increase in efficiency and improvement of methods in different areas such as solar cell applications is obtained.

Keywords: metal nanoparticle arrays, surface plasmon resonance, Discrete Dipole Approximation method.

فصل اول

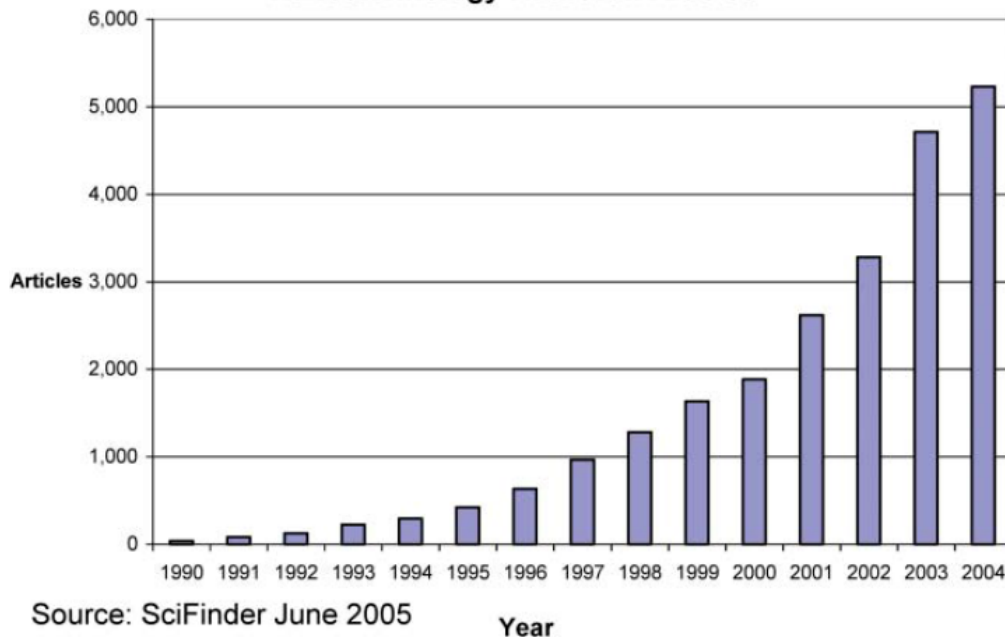
مقدمه

اندازه‌های اتم در حدود یک انگستروم یا 10^{-10} متر است. یک نانومتر یا 10^{-9} متر، یک مجموعه از چند اتم یا مولکول را شامل می‌شود. خواص ماده کپه‌ای در اندازه میکرومتر یا بزرگ‌تر، سال‌ها توسط فیزیکدانان حالت جامد و دانشمندان علم مواد مورد مطالعه قرار گرفت. اما مواد در مقیاس ۱-۱۰۰ نانومتر توسط هیچ گروهی در گذشته مطالعه نشده است. در سال‌های اخیر نشان داده شده است که در این مقیاس اندازه، خواص مواد وابسته به اندازه و شکل آن‌ها می‌شود. خواص جدیدی در مقیاس نانو ایجاد می‌شود. بنابراین مقیاس نانو (۱-۱۰۰ نانومتر) مجموعه‌هایی از اتم‌ها و مولکول‌ها را شامل می‌شوند، که خواص آن‌ها نه به تک تک اجزا و نه به ماده کپه‌ای مربوط نمی‌باشد. در این مقیاس تعداد زیادی از اتم‌ها روی سطح واقع می‌شوند. چون خواص به جای طبیعت ماده به اندازه ساختار بستگی دارد، تغییرات پایا و مکرری با استفاده از یک ماده می‌تواند به دست آید. نقاط کوانتومی CdSe با اندازه‌های متفاوت، ماکزیمم تابش‌های متفاوتی در سرتاسر ناحیه مرئی دارند و همچنین نانو ساختارهای طلا و نقره در بیشتر قسمت‌های ناحیه مرئی جذب دارند.

مقیاس نانو همچنین در سیستم‌های بیولوژیکی اهمیت دارد. خیلی از پروتئین‌ها اندازه‌ای در حدود ده‌ها نانومتر دارند. چون ساختارها می‌توانند دقیقاً در مقیاس نانو طراحی شوند، به علت تشابه در مقیاس اندازه می‌توانند در سیستم‌های بیولوژیکی وارد شوند. سیستم‌های بیولوژیکی پیچیده‌اند. قابلیت طراحی عاقلانه ساختارها در اندازه مشابه مولکول‌های بیولوژیکی قابلیت تحقیق و اصلاح سیستم‌های بیولوژیکی را ایجاد می‌کند. از نانو ساختارها به عنوان عامل‌های انتقال دارو، حسگرها، و برای افزایش میدان‌های الکترومغناطیسی استفاده می‌شود.

نانوتکنولوژی توجه زیادی را در سال‌های اخیر به خود جلب کرده است و تعداد انتشارات درباره نانوذرات طلا و نقره به صورت نمایی رشد کرده‌اند، همان‌طور که در شکل ۱-۱ نشان داده شده است. این بررسی به سال‌های ۱۹۹۰ تا ۲۰۰۴ و مقالات منتشر شده درباره نانوذرات فلزات نجیب (طلا، نقره و مس)، محدود می‌شود. رشد مشاهده شده در تعداد انتشارات، در شکل ۱-۱ به علت شناسایی خواص جدید و تغییر خواص در مقیاس نانو است. نانوذرات فلزهای نجیب و رنگ‌های تابان آن‌ها به علت جذب شدید پلاسمون سطحی تحقیقات زیادی را به خود اختصاص داده‌اند. مشخص شده است که رنگ نانوذره به شکل و اندازه نانوذره و ثابت دی‌الکتریک محیط اطراف آن بستگی دارد و این مطلب سبب مطالعات زیادی در مورد سنتز و کاربردهای آن‌ها شده است [۱].

The Exponential Growth of Nanotechnology Research Articles

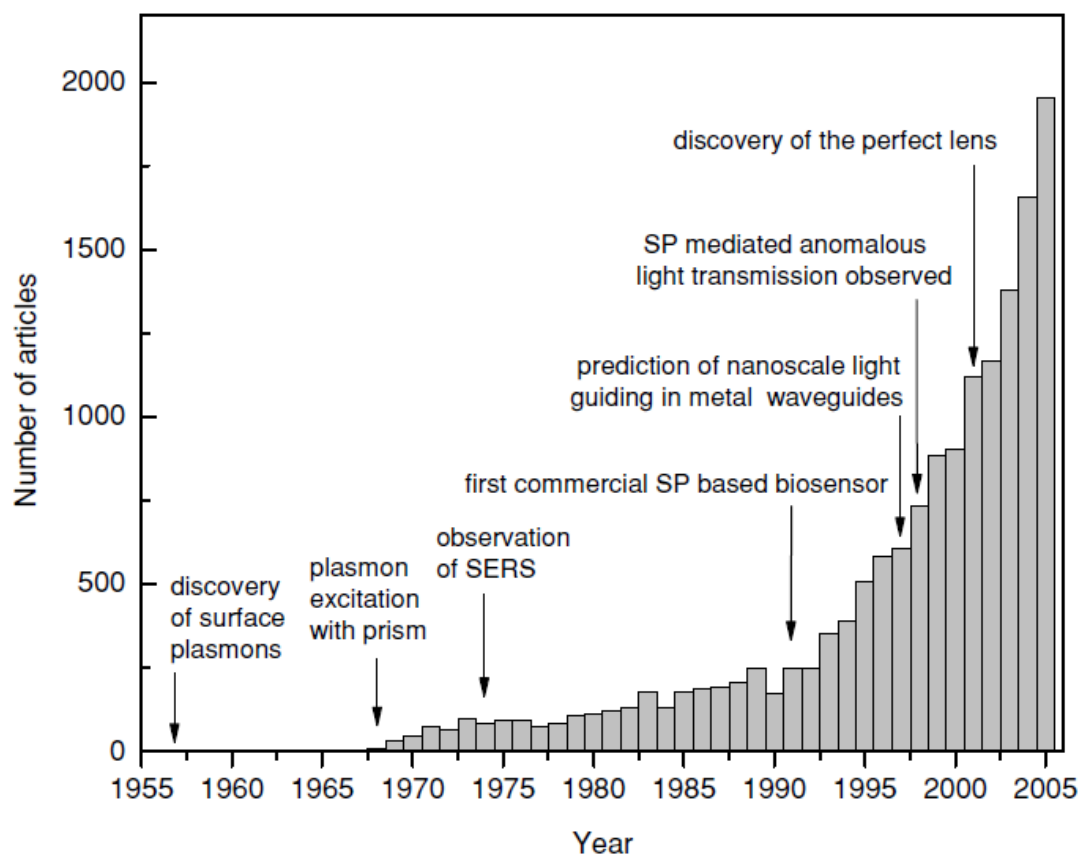


شکل ۱-۱: نمودار تعداد مقالات منتشر شده درباره نانوذرات طلا و نقره از ۱۹۹۰ [۱].

پلاسمون سطحی^۱ برانگیختگی نوسانات تجمعی بار در فصل مشترک فلز و دی‌الکتریک است. امواج پلاسمون سطحی در فصل مشترک دو ناحیه منتشر شده و عمود بر فصل مشترک به صورت نمایی میرا می‌شوند. در نانوذرات، امواج پلاسمون سطحی در سطح نانوذره جایگزیده شده و منتشر نمی‌شود و در نتیجه پلاسمون سطحی جایگزیده^۲ نامیده می‌شود. هنگامی که فرکانس نور فرودی با فرکانس پلاسمون سطحی برابر باشد، تشدید پلاسمون سطحی رخ می‌دهد. فرکانس تشدید پلاسمون سطحی به شکل، اندازه و محیطی که نانوذرات در آن قرار دارند، بستگی دارد. در نانوذرات فلزات نجیب فرکانس تشدید در ناحیه مرئی قرار دارد. با استفاده از خواص منحصر به فرد پلاسمون‌های سطحی، می‌توان بر بسیاری از چالش‌های تکنولوژیکی موجود غلبه کرد. در نتیجه مطالعات اخیر محدوده وسیعی از تکنیک‌ها و عناصر اپتیکی بر پایه پلاسمون توسعه پیدا کرده‌اند. این توسعه‌ها منجر به اندیشه پلاسمونیک، علم و تکنولوژی اپتیک و فوتونیک بر پایه فلزات شد. پلاسمونیک علمی است که امکان استفاده از ویژگی‌های فلزات در مقیاس نانو را فراهم می‌کند.

^۱ surface plasmon

^۲ localized surface plasmon



شکل ۱-۲: رشد شاخه نانوفوتونیک فلزات با تعداد مقالات علمی منتشر شده سالیانه که عبارت "پلاسمون سطحی" در عنوان یا چکیده آن‌ها وجود دارد، نشان داده شده است [۲].

تشدید پلاسمون سطحی نانو ساختارها در تصویربردای بیولوژیکی، حسگرهای زیستی و شیمیایی [۳]، فیلترهای اپتیکی [۴]، دستگاه‌های پلاسمونیک [۵ و ۶]، سلول‌های خورشیدی [۷ و ۸] و... کاربرد دارند.

شکل ۱-۲ تعداد سالیانه انتشارات شامل کلمه‌های "پلاسمون سطحی" در عنوان یا چکیده را نشان می‌دهد. از ۱۹۹۰ تعداد سالیانه مقالات درباره پلاسمون‌های سطحی هر پنج سال دو برابر شدند. توسعه و تجاری‌سازی کدهای قدرتمند شبیه‌سازی الکترومغناطیسی، تکنیک‌های ساخت نانو، و تکنیک‌های تحلیل فیزیکی ابزار ضروری برای طراحی، ساخت و تحلیل خواص اپتیکی نانو ساختارهای فلزی را در اختیار محققان و مهندسان قرار می‌دهد. ترقی اصلی در این حوزه با توسعه حسگرهای تجاری بر پایه تشدید پلاسمون سطحی در ۱۹۹۱ به دست آمد. در حال حاضر در حدود ۵۰ درصد همه انتشارات در مورد پلاسمون‌های سطحی مربوط به استفاده پلاسمون‌ها برای آشکارسازی زیستی است. نانو ساختارهای فلزی توجه شایانی را به خاطر قابلیت آن‌ها برای هدایت نور در مقیاس نانو به خود جلب کردند و آهنگ تولید اختراعات جدید در این حوزه شتاب

بیشتری گرفت. در ۱۹۹۷ جونچی تاکهارا^۱ و همکارانش پیشنهاد کردند که نانوسیم‌های فلزی قادر به هدایت پرتوهای اپتیکی با یک قطر در مقیاس نانومتر هستند. در ۱۹۹۸ توماس اِبسن^۲ و همکارانش گزارش عبور اپتیکی شگفت‌آور از روزنه‌های فلزی کوچک‌تر از طول موج را دادند. در ۲۰۰۱ جان پندری^۳ پیشنهاد کرد که یک فیلم نازک فلزی ممکن است به عنوان یک لنز کامل عمل کند. تمامی این یافته‌ها منجر به تعداد زیاد تحقیقات جدید شد [۲].

ما نیز در این پایان‌نامه به بررسی خواص اپتیکی نانوذرات فلزی ناشی از تشدید پلاسمون سطحی در آن‌ها می‌پردازیم. این مطالعه بر اساس روش تقریب دوقطبی مجزا^۴ (DDA) و با استفاده از نرم‌افزار DDSCAT صورت می‌گیرد. این فصل مقدمه‌ای بود از ویژگی‌ها و کاربردهای نانوذرات و تعداد زیاد مقالات منتشر شده مرتبط به این موضوع و نشان‌دهنده اهمیت این موضوع برای مطالعه و تحقیق بود. در فصل دوم به تعریف تشدید پلاسمون سطحی و روابط مربوط به آن می‌پردازیم. فصل سوم مربوط به بررسی تشدید پلاسمون سطحی و خواص اپتیکی نانوذرات با استفاده از روش‌های مختلف تحلیلی و عددی مانند تئوری Mie، روش تقریب شبه‌استاتیک و روش تفاضل محدود در حوزه زمان است. در فصل چهارم روش مورد استفاده در این پایان‌نامه یعنی روش تقریب دوقطبی مجزا توضیح داده می‌شود و نتایجی را که بر پایه این روش با نرم‌افزار DDSCAT برای نانوذرات تک به دست آوردیم، آورده می‌شود. در فصل پنجم نیز نتایجی را که با DDSCAT برای آرایه نانوذرات به دست آوردیم، آمده است. در نتایج فصل‌های چهارم و پنجم با تغییر عوامل موثر در تشدید پلاسمون سطحی مانند اندازه، شکل و جنس نانوذرات، فاصله نانوذرات از هم در آرایه، تعداد و نحوه چینش نانوذرات در آرایه و محیط دی‌الکتریک اطراف، نمودارهای مربوط به کمیت‌های مختلف اپتیکی مانند سطح مقطع‌های جذب، پراکندگی و خاموشی را رسم کردیم. همچنین پروفایل میدان الکتریکی را هم برای آن‌ها رسم نمودیم. در انتها نیز نتایج حاصل از این کار تحقیقاتی به طور خلاصه بیان شده است و همچنین پیشنهادهای برای کارهای آینده مطرح شده است.

^۱ Junichi Takahara

^۲ Thomas Ebbesen

^۳ John Pendry

^۴ Discrete Dipole Approximation Method

فصل دوم

پلاسمون سطحی

۱-۲) مقدمه:

در این فصل به بررسی برهم‌کنش موج الکترومغناطیس با فلزات می‌پردازیم. مدل نوسانگر ساده (مدل درود) در تجربه برای توصیف خواص نوری فلزات مدل مناسبی می‌باشد. بنابراین با این مدل پاسخ نوری فلزات بررسی شده و تابع دی‌الکتریک مختلط برای مدل درود به دست آمده است. در ادامه به تشدید پلاسمون سطحی در فلزات و روابط مرتبط پرداخته شده است. همچنین رابطه تابع دی‌الکتریک نانوذرات ارائه شده است.

۲-۲) معادلات ماکسول و رابطه پاشیدگی برای امواج طولی و عرضی:

معادلات حاکم بر پدیده‌های الکترومغناطیسی معادلات ماکسول هستند که این معادلات در غیاب بارهای خارجی و چشمه‌های جریان (در سیستم CGS) به شکل چهار معادله زیر می‌باشند:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0 \quad (1-2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0 \quad (2-2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \quad (3-2)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (4-2)$$

در این معادلات \mathbf{D} میدان جابجایی و \mathbf{H} میدان مغناطیسی است. بین میدان جابجایی و میدان الکتریکی رابطه زیر برقرار است:

$$\mathbf{D}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon(\omega, \mathbf{k})\mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}) \quad (5-2)$$

اکنون می‌خواهیم رابطه پاشیدگی را به دست آوریم. یک موج الکترومغناطیسی را با میدان الکتریکی که رابطه زیر برایش برقرار است در نظر می‌گیریم:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} \quad (6-2)$$