شبیه‌سازی طیف جذب نانو ذرات بیضوی طلا و نقره با در نظر گرفتن وابستگی تابع دی‌الکتریک به اندازه و شکل نانو ذرات

هادی، موحدی نژاد[۱] ؛ حمید، نجاری[۱]

[۱]دانشکده علوم پایه دانشگاه زنجان، گروه فیزیک، زنجان

چکیده – در این مقاله سطح مقطع جذبی نانو ذرات بیضوی طلا و نقره با استفاده از روش T ماتریس شبیه سازی شده است. طیف‌های بدست آمده در مقایسه با طیف مربوط به نانو ذرات کروی متفاوت است به طوری که در هر طیف، دو قله متناظر با شعاع‌های بزرگ و کوچک بیضی مشاهده می‌شود. نسبت سطح مقطع جذب دو قله، برای نانو ذرات طلا و نقره متفاوت است و به علاوه با در نظر گرفتن وابستگی تابع دی‌الکتریک به شکل و اندازه، برای نانو ذرات طلا و نقره مقدار سطح مقطع جذب کاهش و پهنا در نیم بیشینه افزایش می‌یابد.

کلید واژه: نانو ذرات بیضوی، پراکندگی، تابع دی الکتریک.

Simulation of absorption spectrum of spheroidal gold and silver nanoparticles considering size dependent dielectric function and the aspect ratio

Hadi, Movahedinejad[1]; Hamid, Nadjari[1]

[1] Department of Physics, University of Zanjan, Zanjan

Abstract- In this paper, the cross-section absorption of gold and silver spheroidal nanoparticles is simulated using the T-matrix method. The spectra obtained are different compared to the spectrum of spherical nanoparticles, so that in each spectrum, two peaks corresponding to large and small oval radii is observed. The ratio of the cross-sectional absorption of two peaks is different for gold and silver nanoparticles. In addition, considering the dependence of the dielectric function in shape and size, the amount of cross-section absorption decreases for the nanoparticles and the width increases in the half-maximum.

Keywords: spheroidal nanoparticles, scattering, dielectric function.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-01]

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

۱- مقدمه

فهم چگونگی اندرکنش نور با مواد نانو مقیاس مسئله‌ای اساسی در نانو فوتونیک می‌باشد. نانو ذرات فلزی به علت تولید پلاسمون‌های سطحی کاربردهای وسیعی در زمینه حسگرهای بیوفیزیکی، نانو آنتن‌ها، متامتریال‌ها، مدارات مجتمع نوری، موجبرهای زیر طول موجی، تصویر برداری مولکولی و ... پیدا کرده‌اند.

روش شرایط مرزی گسترده که به عنوان روش null field نیز از آن نام برده می‌شود روش قدرتمندی برای بررسی پراکندگی از ذرات با شکل‌های دلخواه می‌باشد که در واقع حالت کلیتری از تئوری می (Mie) می‌باشد این روش برای اولین بار توسط Waterman ارائه شد[۱]. از سوی دیگر مهمترین فاکتور در طراحی و بهینه سازی پلاسمون‌های ساختارهای نانو مقیاس تابع دی‌الکتریک می‌باشد این تابع برای نانو ذرات به نسبت شکل و اندازه‌ای که دارند با تابع دی‌الکتریک ماده توده‌ای متفاوت است مخصوصا زمانی که اندازه ذره از میانگین مسیر آزاد الکترون داخل ماده کمتر باشد این اثر بیشتر نمایان می‌شود. این پدیده برای نانو ذرات کروی شکل در مقالات متعددی مورد بررسی قرار گرفته است[۲]. اما در مورد نانو ذرات بیضوی با توجه به پیچیده بودن محاسبات کمتر مورد توجه قرار گرفته است. در این مقاله طیف نانو ذرات بیضوی طلا و نقره با در نظر گرفتن وابستگی دی‌الکتریک نانو ذرات به شکل و اندازه ذرات مورد بررسی قرار می‌گیرد.

۲- بیان مسئله

موج تخت وارد شده و موج پراکنده شده از یک تک نانو ذره می‌تواند به صورت مجموعی از توابع برداری موج کروی نوشته شود[۳].

$$E^{inc}(r)=\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}[a_{mn}RgM_{mn}(k_1r)+b_{mn}RgN_{mn}(k_1r)] \quad (۱)$$

$$E^{inc}(r)=\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}[p_{mn}M_{mn}(k_1r)+q_{mn}N_{mn}(k_1r)] \quad (۲)$$

M و N توابع بسل کروی و RgM و RgN توابع هنکل کروی هستند k عدد موج در محیط پیرامون نانو ذره می‌باشد. ضرایب a و b به تفصیل در مراجع مختلف مورد بررسی قرار گرفته‌اند[۴] رابطه خطی بین ضرایب میدان پراکنده شده از یک سو و از سوی دیگر ضرایب میدان ورودی وجود دارد[۱] که این روابط با ماتریس T بیان می‌شود.

$$\begin{bmatrix}p\\q\end{bmatrix}=T\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}T^{11} & T^{12}\\T^{21} & T^{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix} \quad (۳)$$

با مشخص شدن عناصر ماتریس T میدان پراکندگی بدست خواهد آمد ماتریس T فقط به ویژگی های فیزیکی و هندسی نانو ذرات وابسته است. میانگین سطح مقطع خاموشی و پراکندگی برای نانو ذرات بیضوی طبق محاسبات Mishchenko از روابط زیر بدست می‌آید[۵].

$$\langle C_{ext}\rangle=-\frac{2\pi}{k^2}\mathrm{Re}\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}\sum_{k=1}^{2}T^{kk}_{mnmn}(\rho) \quad (۴)$$

$$\langle C_{sca}\rangle=\frac{2\pi}{k^2}\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{n'=1}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}\sum_{m'=-n'}^{n'}\sum_{k=1}^{2}\sum_{l=1}^{2}\left|T^{kl}_{mnm'n'}(\rho)\right|^2 \quad (۵)$$

از سوی دیگر محاسبات مربوط به پراکندگی با تعریف و مدل سازی مناسب تابع دی‌الکتریک معنی پیدا می‌کند. با توجه به ابعاد نانو ذرات ضریب دی‌الکتریک نانو ذرات با حالت حجمی ماده متفاوت است ما در این پژوهش از داده‌های تجربی Johnson و Christy استفاده کرده‌ایم[۶]. پارامتر اندازه، مربوط به مسیر آزاد الکترون‌های آزاد داخل ماده می‌باشد که به صورت موثری بر روی تابع دی-الکتریک تاثیر می‌گذارد. تابع دی‌الکتریک و ثابت واپاشی برای نانو ذرات به صورت زیر نوشته می‌شود.

$$\varepsilon(\omega,\mathrm{R})=\varepsilon_{bulk}(\omega)+\omega_P^2\left(\frac{1}{\omega^2+\Gamma_\infty^2}-\frac{1}{\omega^2+\Gamma(\mathrm{R})^2}\right)+\mathrm{i}\frac{\omega_P^2}{\omega}\left(\frac{\Gamma(\mathrm{R})}{\omega^2+\Gamma(\mathrm{R})^2}-\frac{\Gamma_\infty}{\omega^2+\Gamma_\infty^2}\right) \quad (۶)$$

$$\Gamma(R)=\frac{v_F}{l}+A\frac{v_F}{R} \quad (۷)$$

v_F سرعت فرمی و w_p فرکانس پلاسما می‌باشد که با رابطه $\omega_P=\sqrt{\frac{ne^2}{\varepsilon_0 m}}$ داده می‌شود n چگالی تعداد الکترون‌های آزاد ماده می‌باشد پارامترهای استفاده شده برای نانو ذرات طلا و نقره در جدول زیر خلاصه شده‌اند. فاکتور A ذکر شده در فرمول (۷) مربوط به پراکندگی الکترون‌های آزاد از دیواره نانوذرات می‌باشد که متناسب با $\frac{4V}{S}$ است v و s به ترتیب حجم و مساحت نانوذره می-باشد [۷].

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

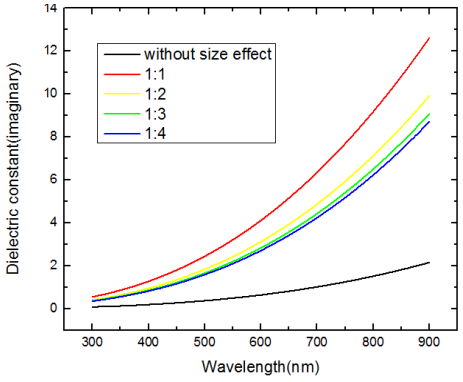
[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-01]

جدول۱ : پارامترهای مورد نیاز محاسبات برای نانو ذرات طلا و نقره.

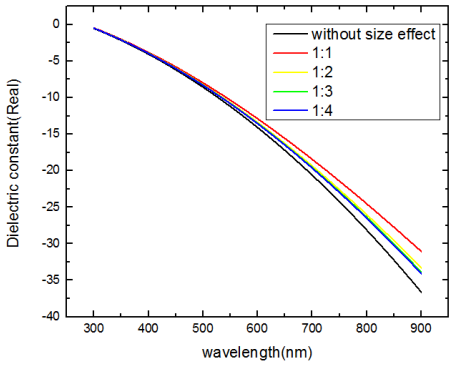
		Silver	Gold
Mean free path for free electrons (nm)	l	52	42
Plasma frequency(*Hz*)	ω_P	2.14×10^{15}	2.17×10^{15}
Fermi velocity(m/s)	v_F	1.39×10^{6}	1.39×10^{6}
Constant parameter	A	1	0.33
Density(g/cm^3)	ρ	10.49	19.32

۳- بحث و نتایج

در شبیه سازی انجام گرفته شکل هندسی نانو ذرات به صورت بیضوی در نظر گرفته می‌شود بطوریکه سطح مقطع بیضوی دایره است در نتیجه مسئله را می‌شود به صورت دو بعدی در نظر گرفت. سطح مقطع جذب کل، میانگین سطح مقطع جذب نانو ذرات در زاویه‌های مختلف نسبت به نور فرودی می‌باشد. شبیه سازی توسط نرم افزار MATLAB صورت گرفته است.



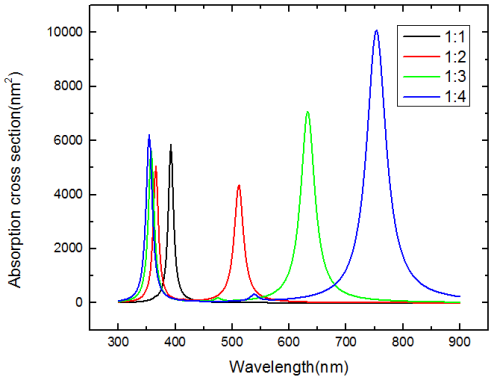
(الف)



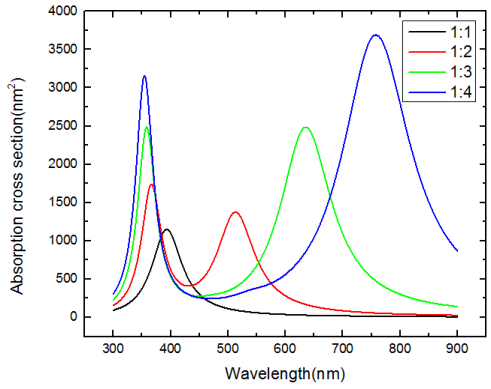
(ب)

شکل ۱: قسمت مجازی(الف) و قسمت حقیقی(ب) تابع دی الکتریک بر حسب طول موج برای نانو ذرات بیضوی نقره در نسبت‌های بیضوی مختلف رسم شده است.

همانطور که در شکل ۱ دیده می‌شود اعمال اثر اندازه ذره، باعث تغییر در مقدار تابع دی‌الکتریک می‌شود این تغییر در قسمت مجازی تابع دی‌الکتریک خود را بیشتر نمایان می‌سازد ما از توابع دی‌الکتریک جدید بدست آمده برای شبیه سازی طیف جذبی نانو ذرات نقره برای بیضوی‌هایی با سطح مقطع دایره که قطر کوچک آنها ثابت و ۱۰ نانومتر بوده و قطر بزرگ برای نمونه‌های اول تا چهارم به ترتیب ۱۰، ۲۰، ۳۰، ۴۰ نانومتر است، استفاده کرده‌ایم. بدیهی است که نسبت ۱:۱ مربوط به کره‌ای با قطر ۱۰ نانومتر می‌باشد.



(الف)



(ب)

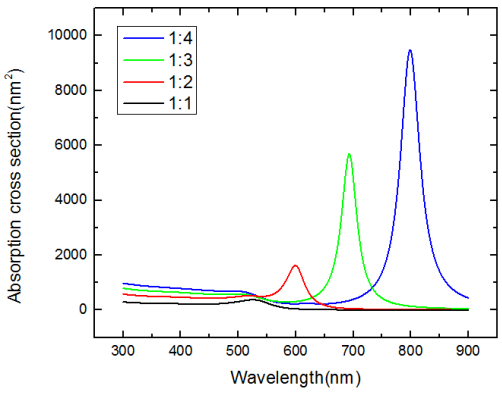
شکل ۲: سطح مقطع جذب نانو ذرات بیضوی نقره (الف) بدون در نظر گرفتن اثرات اندازه در تابع دی‌الکتریک و (ب) با اعمال پارامتر اندازه در تابع دی الکتریک.

در شکل ۲ ملاحظه می‌شود که نانو ذرات بیضوی نقره دارای دو قله می‌باشند که قله واقع شده در طول موج‌های بزرگتر، با افزایش قطر بزرگ بیضی به سمت طول موج-های بزرگتر انتقال پیدا می‌کند و مکان طول موجی قله‌ی اول به علت ثابت ماندن قطر کوچک، تقریبا ثابت است. طیف‌های شکل ۲ (ب) در مقایسه با شکل ۲ (الف) اولا پهنای بیشتری دارند که طبیعتا به علت وارد کردن عامل پراکندگی الکترون‌های آزاد از سطح نانو ذرات می‌باشد و ثانیا سطح مقطع جذب آنها به میزان تقریبی ۲/۵ برابر کمتر شده است. در مورد نانو ذرات طلا در فاصله طول

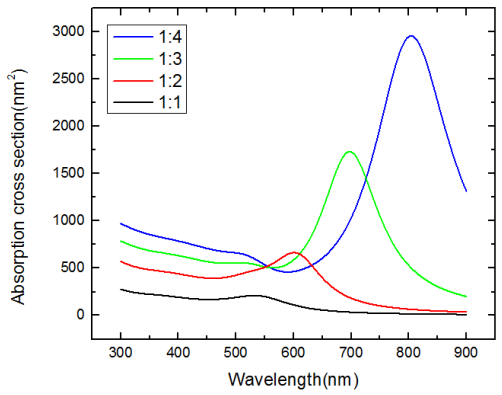
این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-01]

موجی ۳۰۰ تا ۹۰۰ نانومتر یک قله مشخص دیده می‌شود که با طویل‌تر شدن قطر بزرگ بیضوی به سمت طول موج‌های بزرگتر منتقل می‌شود. اولین نتیجه حاصل شده از شکل ۳ (الف) این است که با بزرگ شدن نانو ذره طلا (قطر بزرگ) سطح مقطع جذب به شدت افزایش می‌یابد به صورتیکه اختلاف جذب ناشی از قطر بزرگ نسبت به قطر کوچک چنان بزرگ می‌شود که قله ناشی از سطح مقطع جذب در طول موج کوچکتر (ناشی از قطر کوچک) به چشم نمی‌آید در حالیکه برای نانو ذرات نقره این رفتار مشاهده نشد. با توجه به شکل ۳ با در نظر گرفتن وابستگی تابع دی‌الکتریک به شکل نانو ذره پهنای طیف جذب افزایش می‌یابد و از طرفی مقدار سطح مقطع جذب به میزان تقریبی ۳ برابر کاهش می‌یابد که میزان کاهش در مقایسه با نقره بیشتر است.



(الف)



(ب)

شکل ۳: سطح مقطع جذب نانو ذرات بیضوی طلا (الف) بدون در نظر گرفتن اثرات اندازه در تابع دی‌الکتریک و (ب) با اعمال پارامتر اندازه در تابع دی‌الکتریک.

از آنجایی که قطر کوچک نسبت به قطر بزرگ در مقایسه با مسیر آزاد میانگین الکترون در نانو ذره، به مقدار بیشتری کوچکتر می‌باشد انتظار می‌رود که سطح مقطع جذب ناشی از قطر کوچک بیضوی در مقایسه با سطح مقطع جذب ناشی از قطر بزرگتر به میزان بیشتری پهن‌تر شود که همین اتفاق هم روی داده است.

در نمونه‌های آزمایشگاهی همه نانو ذرات یک نمونه اندازه یکسانی ندارند و از یک توزیعی تبعیت می‌کنند با این وجود با اعمال کردن اثر اندازه نانو ذره بر روی تابع دی‌الکتریک طیف‌های شبیه سازی شده انطباق خوبی با طیف مرئی/فرابنفش حاصل از نمونه‌های آزمایشگاهی نشان می‌دهند[۸].

۴- نتیجه‌گیری

شبیه سازی طیف نانو ذرات بیضوی طلا و نقره نشان داد که نانو ذرات بیضوی نقره در فاصله طول موجی ۳۰۰ تا ۹۰۰ نانومتر دارای دو قله می‌باشد از آنجایی که در همه چهار نمونه بررسی شده قطر کوچک بیضی ثابت در نظر گرفته شده است مکان یکی از قله‌ها تقریبا ثابت است و مکان طول موجی قله دوم برای قطرهای بزرگتر در طول موجهای بالاتری قرار خواهد گرفت. با لحاظ کردن اثر اندازه در تابع دی‌الکتریک پهنا در نصف بیشینه (FWHM) افزایش، و سطح مقطع جذب نیز به صورت ملموسی کاهش یافته است. در مورد نانو ذرات طلا در این بازه طول، اختلاف اندازه سطح مقطع جذب دو قله زیاد بوده، که با اثر دادن پارامتر اندازه، رفتاری مثل نانو ذرات نقره از نانو ذرات بیضوی طلا مشاهده شد.

مراجع

[1] P. C. Waterman, “Matrix formulation of electromagnetic scattering’’, Proc. IEEE, Vol. 53, pp. 805–812, 1965.

[2] A. Derkachova, K. Kolwas, I. Demchenko, “Dielectric function for gold in plasmonics applications: Size dependence of plasmon resonance frequencies and damping rates for nano spheres’’, Plasmonics, Vol. 11, No. 3, pp. 941–951, 2016.

[3] MI. Mishchenko, LD. Travis, AA. Lacis, *Scattering, absorption and emission of light by small particles*, 3rd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2002.

[4] L. Tsang, J. A. Kong, and R. T Shin, *Theory of Microwave Remote Sensing*, Wiley, New York, 1985.

[5] M. I. Mishchenko, *Light Scattering by Nonspherical Particles*, Academic Press, 2000.

[6] P.B Johnson, R.W. Christy, “Optical constantsof the noble metals”, Phys. Rev. B, Vol. 6, No. 12, pp.4370, 1972.

[7] Eduardo, A. Coronado, George, Schatz, “Surface plasmon broadening for arbitrary shape nanoparticles: A geometrical probability approach”, J. Chem. Phys., Vol. 119, pp. 3926, 2003.

[8] Paerhatijiang Tuersun, “Simulated localized surface plasmon spectra of single gold and silver nanobars”, Optik, Vol. 127, pp. 3466–3470, 2016.

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-01]