بیست و ششمین کنفرانس اپتیک و
فوتونیک ایران و دوازدهمین کنفرانس
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،
دانشگاه خوارزمی،
تهران، ایران.
15-16 بهمن 1398

محاسبه سطح مقطع پراکندگی نانو ذرات کروی طلا و سیلیکا@طلا و بررسی تاثیر ابعاد ذره بر موج پراکنده شده با استفاده از نرم افزارکامسول

مونا خلیلی ثابت[1] ، سلمان مهاجر مازندرانی[1،2،*]

[1] دانشکده فیزیک، دانشگاه خوارزمی، کرج

[2] پژوهشکده علوم کاربردی، دانشگاه خوارزمی، کرج

mona.khalilisabet91@gmail.com, Mohajer@khu.ac.ir[*]

چکیده – در این مقاله سطح مقطع پراکندگی، جذب و خاموشی نانو ذرات کروی طلا و سیلیکا-طلا با استفاده از نرم‌افزار کامسول به روش انتگرال بردار پوینتینگ و گرمای ایجاد شده در اثر اتلاف موج پراکنده شده محاسبه شده است و همچنین اثر تغییر سایز نانو ذره، هسته-پوسته بر سطح مقطع پراکندگی، برای ذرات شبیه سازی شده با اعمال وابستگی های فرکانسی و ابعادی ضریب شکست طلا و سیلیکا مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج شبیه سازی نشان می دهد تغییر نسبت اندازه هسته به پوسته سطح مقطع پراکندگی را تغییر داده و طول موج بیشینه نیز جابجا می شود.

کلید واژه- سطح مقطع پراکندگی، ضریب خاموشی، نانو ذره سیلیکا@طلا، نانو ذره طلا

Computing Scattering Cross Section of Gold Nanoparticle**s** and SiO2@**Au** Core-Shell and Size Effect on the Scattered Wave Using COMSOL MULTIPHYSICS Software

Mona Khalili Sabet[1], Salman Mohajer Mazandarani [1,2,*]

[1]Physics Dep., Kharazmi University, Karaj, Iran.

[2] Applied Science Research Center, Kharazmi University, Karaj.

Abstract- In this paper scattering, absorption and extinction cross section of spherical Gold nanoparticle and Silica/Gold core/shell was computed using COMSOL MULTIPHYSICS based on Poynting vector integral and heat generated by loss of scattered wave. Effect of change in size of nanoparticle on the scattering cross section also have been studied by applying frequency and size dependencies of refractive index of Gold and Silica.

Keywords: Scattering Cross Section, Extinction Coefficient, SiO2@Au nanoparticle, Gold Nanoparticle

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

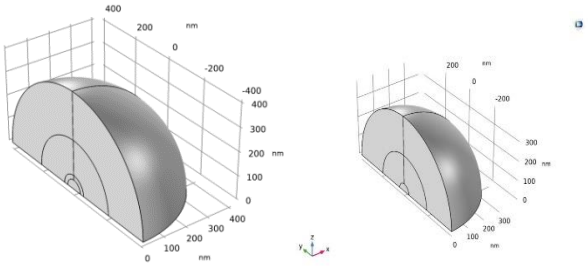
[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-19]

مقدمه

یکی از مسائل مهم در نانوفوتونیک چگونگی برهم کنش نور و ماده در مقیاس نانو می باشد، در صورت فلزی بودن نانو مواد، شاهد تولید پلاسمون های سطحی در آن ها خواهیم بود که وابستگی زیادی به سایز ذرات دارد و این مسئله باعث کاربرد هرچه بیشتر این نانو ذرات در پزشکی و صنعت می شود بطوریکه این مواد در حسگر های نانو بیوفوتونیکی، مدارات الکترونیکی، تصویربرداری ها، دارو رسانی به بافت ها، درمان تومور ها و ... بسیار مورد توجه و استفاده قرار گرفته اند. یکی از روشهای پرکاربرد برای بررسی برهم کنش نور و نانو مواد، بررسی طیف جذبی آنها در ناحیهٔ نور مرئی می باشد. که این طیف در اثر جذب و پراکندگی از ذرات حاصل می شود؛ در نتیجه محاسبه ی ضرایب پراکندگی، جذب و خاموشی اطلاعات مهمی در مورد برهم کنش نور و نانو ذرات به دست می دهد. این ضرایب را می توان با استفاده از تئوری می (Mie) و انتگرال بردار پوینتینگ موج پراکنده شده روی سطح نانو ذره و اتلاف این موج بدست آورد. از سوی دیگر، ضریب شکست فلزات به طول موج اعمال شده وابسته است، در نتیجه در نظر گرفتن این وابستگی، برای شبیه سازی آنها الزامیست، علاوه بر این ضریب شکست آنها در مقیاس نانو، به سایز آنها نیز وابستگی پیدا می کند و باید تصحیحات مقیاس نانو نیز اعمال شود. مخصوصا هنگامیکه ابعاد ذره از مسافت آزاد میانگین الکترون در آن کوچکتر باشد.

شبیه سازی و محاسبات

به منظور شبیه سازی نانو ذره همانطور که در شکل ۱ مشخص است، از سه کره استفاده شده است، کوچکترین کره برای هسته (ذرهٔ طلا)، لایهٔ میانی برای محیط اطراف نانو ذره که آب می باشد و خارجی ترین کره، PML[۱] می باشد که اولاً به منظور شبیه سازی شرایط میدان-دور و ثانیاً برای جذب امواج رسیده به سطح و جلوگیری از بازتاب آنها به ساختار و اختلال محاسبات، قرار داده می شود. شعاع ذره متغیر بوده و ضخامت آب اطراف و PML به ترتیب ۱۵۰و ۲۰۰ نانومتر می باشد. برای شبیه سازی هسته-پوسته مطابق شکل ۲، یک لایه میان آب و هسته افزوده می شود که همان لایهٔ پوسته است و ضخامت آن متغیر می باشد.



شکل ۱ طرح شماتیک نانوذره شکل ۲ هسته-پوسته شبیه سازی شده به همراه لایه PML

برای اعمال وابستگی ضریب شکست به طول موج از تابع دی الکتریک طلا که به طور تجربی توسط جانسون وکریستی(*Christy & Johnson*)به دست آمده است استفاده کرده ایم.[۱] البته با اعمال اصلاحات مربوط به ابعاد ذره. به منظور شبیه سازی محیط اطراف ذره از آب استفاده می کنیم که مشخصات این آب از نتایج پژوهش هیل و کوئری(*Hale* و *Query*) به دست می آید.[۲] در موردنانوذره هسته-پوسته، پوسته[۲] از جنس طلا می باشد و هسته از جنس سیلیکا، که مشخصات آنها از معادلهٔ سل مایر(*Sellmeier*) به دست می آید.[۳]

سطح مقطع پراکندگی از انتگرال $\int \boldsymbol{S_{rel}}.\boldsymbol{ndA}$ روی سطح نانو ذره تقسیم بر P_0 به دست می آید که $\boldsymbol{S_{rel}}$ بردار پوینتینگ نسبی، n بردار عمود بر سطح و P_0 توان تابشی اولیه است. سطح مقطع جذب از انتگرال گرمای ایجاد شده تقسیم بر توان تابشی اولیه روی حجم نانو ذره به دست می آید و سطح مقطع خاموشی از جمع این دو سطح مقطع به دست می آید. سطح مقطع پراکندگی، جذب

[۱] Perfectly matched layer

[۲] shell

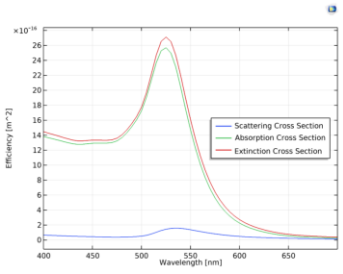
این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-19]

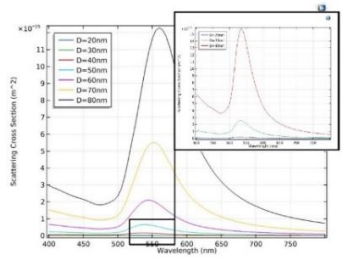
و خاموشی برای نانو ذره ای به اندازهٔ $۴۰nm$ و برای نانوذره با هستهٔ SiO_2 به قطر $۳۰nm$ و پوستهٔ طلا به ضخامت nm ۵ به دست آوردیم و تغییرات سطح مقطع پراکندگی را برای قطر های مختلف نانو ذره و برای هسته-پوسته را یکبار با ثابت بودن اندازه ی هسته و تغییر اندازه ی پوسته و یکبار دیگر با ثابت بودن اندازه ی کل ذره یعنی مجموع پوسته و هسته و تغییر اندازه ی پوسته و هسته به دست آورده ایم.

بحث و نتایج

در شکل۳، نمودار سطح مقطع پراکندگی، جذب و خاموشی برای نانو ذره ای به اندازهٔ $۴۰nm$ رسم شده است. همانطور که مشخص است بخش اصلی ضریب خاموشی توسط جذب تامین می شود بطوریکه مقدار بیشینه هردو که طول موج $nm۵۲۵$ اتفاق می افتد، $13 \times 10^{-17}(m^2)$ با هم اختلاف دارند یعنی سهم سطح مقطع پراکندگی تاثیر اندکی دارد و مقدار ماکسیمم آن $15 \times 10^{-17}(m^2)$ در طول موج حدود nm ۵۳۵ رخ می دهد و بیش از آنکه در مقدار بیشینهٔ ضریب خاموشی اثر گذار باشد، در پهنای آن اثر گذاشته است، آن هم به مقدار جزئی که این نتیجه با توجه به مختلط بودن ضریب دی الکتریک فلزات مورد توجیه است. در شکل ۴، تغییرات سطح پراکندگی به ازای اندازه های مختلف نانو ذره (۲۰,۳۰,...,۸۰ nm) رسم شده است. با افزایش اندازهٔ نانو ذره شاهد افزایش اندازهٔ ماکسیمم سطح مقطع پراکندگی و انتقال به طول موج های بزرگ تر (انتقال به سرخ) آن هستیم. علاوه بر این منحنی های متناظر با نانو ذره های کوچکتر، دارای پهنای بیشتری هستند که علت آن تاثیر عامل اندازه ذره است. در واقع برای ذرات کوچکتر از nm ۴۲ ، مسافت آزاد میانگین الکترون در فلز، بر پهنای طیف پراکندگی اثر می گذارد و باعث پراکندگی در طول موج های بیشتری می شود.

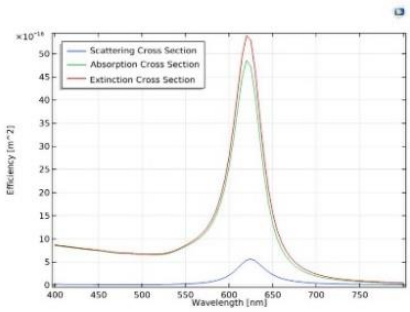


شکل ۳ سطح مقطع پراکندگی جذب و خاموشی نانوذره با اندازهٔ ۴۰ نانومتر



شکل ۴ سطح مقطع پراکندگی برای نانو ذرات با ابعاد ۲۰،۳۰،۴۰،۵۰،۶۰،۷۰،۸۰ نانومتر

در شکل ۵ منحنی تغییرات سطح مقطع پراکندگی، جذب و خاموشی برای هستهٔ SiO_2 به اندازهٔ ۳۰ nm و پوستهٔ طلا به اندازهٔ nm ۵ رسم شده است. در این حالت پراکندگی همچنان سهم کمتری نسبت به جذب در خاموشی دارد. اما در مقایسه با شکل ۳، این سهم افزایش یافته است، اندکی از این تغییر به علت کاهش سایز ذره است اما علت اصلی تر آن رزونانس پلاسمون های سطحی است که هم مقدار پراکندگی را افزایش می دهد و هم باعث انتقال به سرخ حدوداً ۱۰۰ نانومتری می شود.

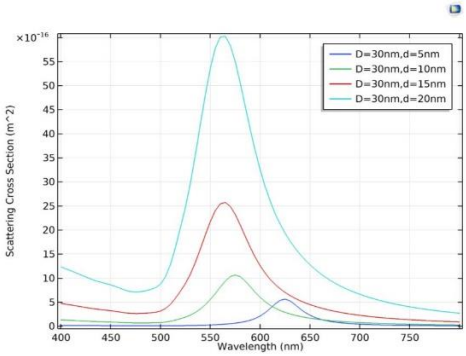


شکل ۵ سطح مقطع پراکندگی، جذب و خاموشی برای $SiO_2@Au$ (اندازهٔ هسته ۳۰ نانومتر و ضخامت پوسته ۵ نانومتر)

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

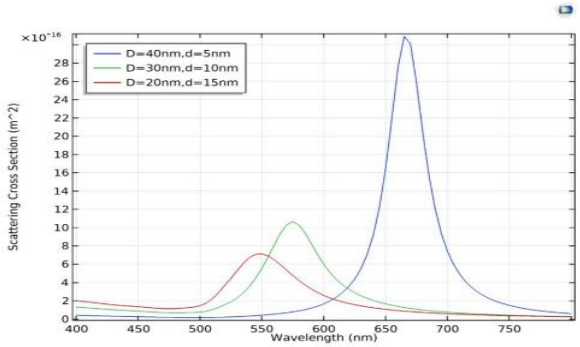
[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-19]

در شکل ۶، نمودار تغییرات سطح مقطع پراکندگی برای نانو ذره هایی با اندازهٔ هستهٔ نمودار تغییرات سطح مقطع پراکندگی برای نانو ذره هایی با اندازهٔ هستهٔ nm ۳۰ و پوسته متفاوت $(d=5,10,15,20)$ رسم شده است. با افزایش ضخامت پوسته، مقدار ماکسیمم سطح مقطع پراکندگی افزایش یافته و به طول موج های کوچکتر انتقال می یابد و مقدار انتقال نیز کاهش خواهد داشت، علت آن این است که با افزایش ضخامت طلا طول موج پیک پراکندگی به حدود ۵۲۰ میل می کند که طول موج قله پراکندگی نانو ذره طلا به سایز هسته nm ۳۰ می باشد. یعنی اثر رزونانس پلاسمون های سطحی بر هسته کاهش می یابد یا به بیان دیگر، پلاسمون های سطحی قبل از رسیدن به هسته تقریباً میرا می شوند زیرا عمق نفوذ طلا در این حدود طول موج به طور میانگین nm ۳۱ میباشد که مقدار حدی بی تاثیر شدن پلاسمون های سطحی می باشد.



شکل ۶ تاثیر ضخامت پوسته بر سطح مقطع پراکندگی نانو ذرات

در شکل ۷، تغییرات سطح مقطع پراکندگی برای نانوذراتی با اندازهٔ ثابت nm ۵۰ با هسته هایی برابر ۲۰،۳۰ و ۴۰ نانومتر و پوسته هایی با ضخامت ۵،۱۰ و ۱۵ نانومتر، رسم شده است.همانطور که با توجه به نتایج قبل داشتیم، نانوذره با هستهٔ بزرگتر و ضخامت پوستهٔ کمتر، پراکندگی بیشتر در طول موج های بالاتر بدست می دهد و این دو اثر، (انتقال به سرخ و افزایش ماکسیمم سطح مقطع پراکندگی) با کاهش اندازهٔ هسته (و یا افزایش ضخامت پوسته) بیشتر می شود.



شکل ۷ سطح مقطع پراکندگی نانوذرات با اندازهٔ ۵۰ نانومتر با سایز هسته و پوستهٔ ۵/۴۰، ۱۰/۳۰، ۱۵/۲۰ نانومتر

نتیجه‌گیری

با توجه به نتایج شبیه سازی، مشاهده کردیم که با افزایش اندازهٔ نانو ذره بیشینه سطح مقطع پراکندگی و طول موج متناظر با آن افزایش می یابد. در صورت افزودن پوسته با ثابت بودن سایز هسته و افزایش ضخامت پوسته، سطح مقطع پراکندگی افزایش می یابد، اما در طول موج های کوچکتری ماکسیمم می شود. و در صورت ثابت بودن سایز کل ذره، با افزایش سایز هسته و در نتیجه کاهش ضخامت پوسته، بیشینهٔ سطح مقطع پراکندگی و طول موج متناظر آن، افزایش می یابد.

مرجع‌ها

[1] P. B. Johnson, R. W. Christy, " Optical Constant of Noble Metals", Phys. Rev. B 6, 4370 , 15 Dec. 1972

[2] G. M. Hale, M. R. Querry, "Optical Constant of Water(D2O)", Applied Optics, Vol, 12, Issue 3, 1973

[3] I. H. Malitson, "Interspecimen Comparison of the Refractive Index of Fused Silica", Journal of the Optical Society of America, Vol, 55, Issue 10, 1965

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

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-19]