



بیست و هشتمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران و چهاردهمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران، دانشگاه شهید چمران اهواز، خوزستان، ایران.  
۱۴-۱۲ بهمن ۱۴۰۰



## بررسی تحلیلی خواص اپتیکی جفت نانوذره فلزی در تقریب دوقطبی

مهدی سیمیاری<sup>۱</sup>، ناصر سپهری جوان<sup>۲\*</sup> و آصف خیراندیش<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup>دانشگاه امام علی (ع)، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک

ایمیل: Mahdi.Simiari@gmail.com

<sup>۲\*</sup>دانشگاه محقق اردبیلی، دانشکده علوم، گروه فیزیک، ایمیل:

ایمیل: sephri\_javan@uma.ac.ir و Asef.kheirandish@gmail.com

چکیده - در این مطالعه، با استفاده از مدل تعمیم یافته دورد و در تقریب دوقطبی، به بررسی تحلیلی خواص اپتیکی جفت نانوذره کرومی طلا در اندرکنش با یک باریکه لیزر با قطبش موازی نسبت به سمت گیری جفت نانوذره پرداخته ایم. تاثیر اندرکنش بین نانوذرات بر بازده خاموشی بررسی شده و نشان داده شده است که اندرکنش بین نانوذرات سبب افزایش بازده خاموشی و انتقال به قرمز در ناحیه طول موجی تشدید پلاسمون می شود. گذردهی الکتریکی مختلط برای جفت نانوذره طلا برای فواصل جدایی مختلف رسم شده است. همچنین، ملاحظه شده است که در مقایسه با یک نانوذره تنها، اندرکنش بین نانوذرات سبب کاهش در مقدار قدرمطلق قسمت حقیقی و نیز قسمت موهومی گذردهی می شود. در نهایت نشان داده شده است که برای جابه جایی طول موج تشدید پلاسمون، یک رابطه درجه سوم و یا نمایی بر حسب شعاع و فاصله جدایی می توان برآزش کرد.

کلیدواژه - انتقال به قرمز، اندرکنش دوقطبی-دوقطبی، پلاسمون، لیزر، نانوذرات طلا، دوتایی

## Analytical Study of Optical Properties of Metallic Nanoparticle Dimer in The Dipole Approximation

Mahdi Simiari<sup>1</sup>, Nasser Sepehri Javan<sup>2\*</sup>, and Asef Kheirandish<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Ahvaz Branch, University of Ahvaz, Ahvaz, Iran, <sup>2\*</sup>Department of Physics, Faculty of Sciences, Ardabil Branch, University of Maragheh, Maragheh, Iran

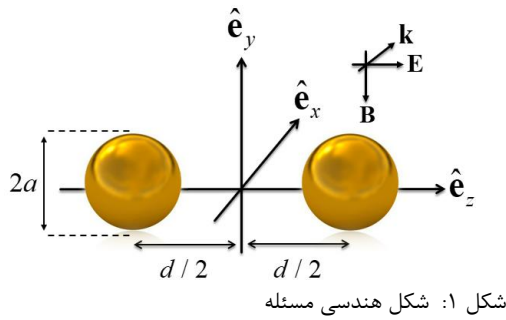
Email: Mahdi.Simiari@gmail.com

<sup>2\*</sup>Department of Physics, Faculty of Sciences, Ahvaz Branch, University of Ahvaz, Ahvaz, Iran, <sup>2</sup>Department of Physics, Faculty of Sciences, Ahvaz Branch, University of Ahvaz, Ahvaz, Iran

Email: Sepehri\_javan@uma.ac.ir and Asef.kheirandish@gmail.com

**Abstract-** In this study, using a modified Drude model, in the dipole approximation, we have analytically investigated the optical properties of spherical gold nanoparticle dimer in the interaction with a laser beam whose polarization is parallel to the orientation of the dimer. Effect of the nanoparticles interaction on the extinction efficiency is studied and it is shown that the interparticle interaction causes an increase in the extinction efficiency and the red-shift of the plasmon resonance wavelength area. Complex permittivity of the gold nanoparticle dimer is presented for different values of nanoparticles separation. Comparing with an individual nanoparticle, it is noticed that the interaction of nanoparticles leads to the decrease in the absolute value of the real part of the permittivity and decrease in its imaginary part as well. Finally, it is shown that a cubic or an exponential relation with respect to the radius separation of nanoparticles can be fitted for the displacement of plasmon resonance wavelength.

Keywords: red-shift, dipole-dipole interaction, plasmon, laser, gold nanoparticle, dimer.



زیر می نویسیم

$$m_e \frac{d\mathbf{r}_j^2}{dt^2} + m_e \gamma \frac{d\mathbf{r}_j}{dt} + m_e \xi \omega_p^2 \mathbf{r}_j = -e\mathbf{E}_j, j = 1, 2, \quad (2)$$

که  $\omega_p = \sqrt{n_0 e^2 / m_e \epsilon_0}$  فرکانس پلاسمایی نانوذره،  $n_0$  چگالی الکترونها،  $\epsilon_0$  گذردهی هدایت،  $\mathbf{r}_j$  جابجایی ابر الکترونی از حالت تعادل،  $m_e$  جرم الکترون،  $\gamma$  فاکتور میرایی مربوط به پراکندگی الکترون [۵]،  $e$  بار الکترون،  $\xi$  تابعی از شعاع نانوذره است که مقدار آن از مرجع [۵] منظور می شود و  $\mathbf{E}_j$  جمع میدان الکتریکی لیزر و میدان الکتریکی ناشی از نانوذره همسایه است که برابر است با

$$E_{n \neq j} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[ \frac{3\hat{\mathbf{e}}_n (\mathbf{p}_n \cdot \hat{\mathbf{e}}_n) - \mathbf{p}_n}{d^3} - ik \frac{3\hat{\mathbf{e}}_n (\mathbf{p}_n \cdot \hat{\mathbf{e}}_n) - \mathbf{p}_n}{d^2} + k^2 \frac{\mathbf{p}_n - \hat{\mathbf{e}}_n (\mathbf{p}_n \cdot \hat{\mathbf{e}}_n)}{d} \right], \quad (3)$$

که  $\hat{\mathbf{e}}_n$  بردار یکه‌ای است که سمت‌گیری آن از مرکز نانوذره  $n$ ام به سمت مرکز نانوذره  $j$ ام است. با استفاده از رابطه (۱) و (۳) معادله حرکت برای ابرالکترونی نانوذره اول به صورت زیر در می آید

$$\frac{d^2 z_1}{dt^2} + \gamma \frac{dz_1}{dt} + \xi \omega_p^2 z_1 = \frac{-eE}{2m_e} (e^{i(kx - \omega t)} + c.c.) + \frac{Ze^2}{2\pi\epsilon_0 m_e} \left( \frac{1}{d^3} - \frac{ik}{d^2} \right) z_2, \quad (4)$$

که  $Z = n_0 V$ ،  $V$  حجم نانوذره است و برای داشتن معادله حرکت ابر الکترونی ذره دوم کافیست در معادله بالا اندیسهای ۱ و ۲ جابجا شوند. با قرار دادن جواب‌هایی به

## مقدمه

نانوذرات فلزی مخصوصاً نانوذرات طلا و نقره به سبب رابطه غیرخطی پاسخ آن‌ها به میدان الکتریکی موج الکترومغناطیسی فرودی که در منطقه تشدید پلاسمونی اتفاق می افتد، دارای کاربردهای زیادی در حوزه‌های پژوهشی مانند اپتوالکترونیک، الکترونیک، اپتیک خطی و غیر خطی هستند [۱-۲]. در این میان دینامیک غیرخطی نانوذرات در اندرکنش با میدان‌های قوی لیزر توجهات زیادی را به خود جلب کرده است [۳-۵]. در تمامی این حوزه‌ها، تعیین گذردهی الکتریکی مختلط وابسته به اندازه نانوذره دارای اهمیت اساسی می باشد. در این مقاله با استفاده از مدل درود تعمیم یافته ارائه شده توسط خیراندیش و همکاران [۶] برای نانوذرات منفرد طلا که در آن تاثیر محدودشدگی کلاسیکی در تطابق با داده‌های تجربی وارد شده است، به مطالعه تحلیلی اندرکنش میدان‌های الکترومغناطیسی لیزر با جفت نانوذره طلا پرداخته‌ایم. در تقریب دوقطبی، با لحاظ کردن اندرکنش نانوذرات با یکدیگر، نحوه حرکت ابر الکترونی نانوذرات با استفاده از حل تحلیلی معادلات دیفرانسیل جفت شده حاصل شده است.

## اندرکنش نانوذرات

در شکل (۱)، هندسی مسئله نشان داده شده است که در آن  $a$  شعاع و  $d$  فاصله بین نانوذرات است و میدان الکتریکی لیزر موازی با جهت‌گیری جفت نانوذره و به صورت موج تخت در نظر گرفته شده است:

$$\mathbf{E}_L = \frac{1}{2} E e^{i(kx - \omega t)} \hat{\mathbf{e}}_z + c.c., \quad (1)$$

که  $\omega$ ،  $k$  و  $E$  به ترتیب عدد موج، فرکانس و دامنه میدان الکتریکی باریکه لیزر هستند. برای توصیف اندرکنش میدان‌های الکترومغناطیسی لیزر با نانوذرات، معادله حرکت برای ابرالکترونی را به صورت

بدست آمده را با نتایج تجربی مورد مقایسه قرار دهیم. سطح مقطع خاموشی از رابطه زیر حاصل می شود [۷]:

$$C_{ext} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \operatorname{Re}(a_n + b_n), \quad (11)$$

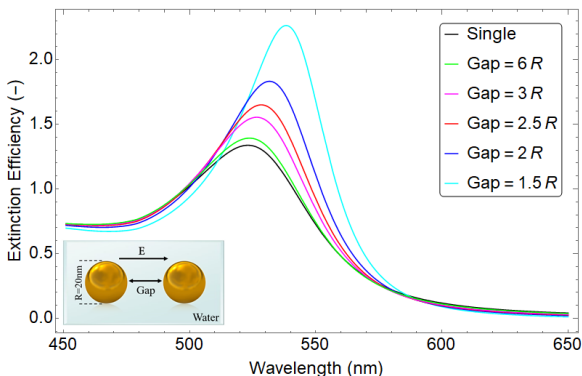
$$a_n = \frac{m\psi_n(mx)\psi_n'(x) - \psi_n(x)\psi_n'(mx)}{m\psi_n(mx)\xi_n'(x) - \xi_n(x)\psi_n'(mx)}, \quad (12)$$

$$b_n = \frac{\psi_n(mx)\psi_n'(x) - m\psi_n(x)\psi_n'(mx)}{\psi_n(mx)\xi_n'(x) - m\xi_n(x)\psi_n'(mx)}. \quad (13)$$

که پارامتر اندازه،  $x = 2\pi Na/\lambda$  ضریب شکست  $m = N_1/N$  نسبی،  $N_1 = \sqrt{\varepsilon}$  ضریب شکست ذره،  $N = \sqrt{\varepsilon_m}$  ضریب شکست محیط و  $\psi_n(x), \xi_n(x)$  توابع ریکاتی-بسل است.

### بحث عددی

در محاسبات عددی، یک جفت نانوذره طلا با قطر  $R = 4nm$  نشانده درشیشه را در نظر می گیریم. در شکل (۲) بازده خاموشی  $(C_{ext}/\pi a^2)$  برای فواصل مختلف بین ذرات ( $Gap = d - R$ ) رسم شده است. برای مقایسه، بازده خاموشی نانوذره منفرد هم آورده شده است. مشاهده می شود که اندرکنش بین ذرات، علاوه بر افزایش بازده خاموشی در ناحیه تشدید پلاسمون، منجر به انتقال به قرمز هم می شود.



شکل ۲: طیف بازده خاموشی جفت نانوذره طلا با قطر ۴ نانومتر برای فواصل مختلف بین نانوذرات  $Gap = d - R$

فرم  $z_{1,2} = (1/2)\tilde{z}_{1,2} \exp[i(kx - \omega t)] + c.c.$  در معادلات حرکت، دامنه جابه جایی به صورت زیر حاصل می شود:

$$\tilde{z}_1 = \tilde{z}_2 = \frac{1}{1 - \alpha} z_0 \quad (5)$$

$$z_0 = \frac{eE}{m_e(\omega^2 + i\omega\gamma - \xi\omega_p^2)}, \quad (6)$$

$$\alpha = \frac{-Ze^2}{2\pi\varepsilon_0 m_e(\omega^2 + i\omega\gamma - \xi\omega_p^2)} \left( \frac{1}{d^3} - \frac{ik}{d^2} \right), \quad (7)$$

با تعریف قطبش به صورت  $\mathbf{P} = \varepsilon_0 \chi \mathbf{E}_L$ ، می توان پذیرفتاری الکتریکی را بصورت زیر نوشته

$$\chi = \left( \frac{1}{1 - \alpha} \right) \frac{-\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma - \xi\omega_p^2}, \quad (8)$$

و گذردهی هر نانوذره اندرکنشی به شکل زیر می شود:

$$\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} = n^2 = 1 + \chi = 1 - \frac{(1 - \alpha)^{-1} \omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma - \xi\omega_p^2}, \quad (9)$$

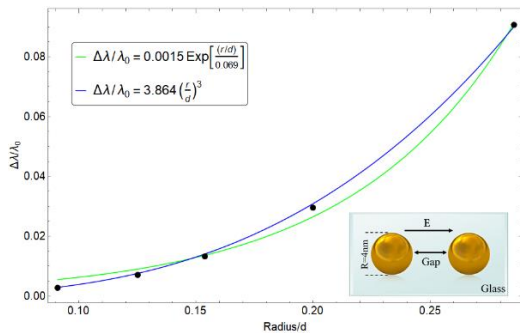
که  $n^2$  ضریب شکست نانوذرات است. با توجه به مدل درود-لورنتس، برای در نظر گرفتن نقش الکترون های لایه ظرفیت، باید رابطه (۹) را به صورت زیر تصحیح کنیم

$$\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} = \varepsilon_{\infty} - \left( \frac{1}{1 - \alpha} \right) \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma - \xi\omega_p^2}, \quad (10)$$

که  $\varepsilon_{\infty}$  از داده های تجربی محیط حجیم بدست می آید. در ادامه به منظور بررسی اثر اندرکنش بین دوناوذره، محاسبات عددی انجام خواهیم داد. گذردهی الکتریکی در آزمایشگاه به صورت مستقیم اندازه گیری نمی شود و به جای آن سطح مقطع خاموشی نانوذره که به گذردهی الکتریکی نیز وابسته است مورد اندازه گیری قرار می گیرد. ما با قرار دادن گذردهی الکتریکی که در رابطه (۱۰) بدست آوردیم در رابطه مربوط به سطح مقطع خاموشی، می توانیم نتایج

### نتیجه گیری

در تقریب دوقطبی و با یک مدل تعمیم یافته درود، بصورت تحلیلی، تاثیر اندرکنش بین جفت نانوذره طلا بر خواص اپتیکی آن مورد مطالعه قرار گرفت. نشان داده شد که در مقایسه با حالت غیر اندرکنشی، ناحیه تشدید پلاسمون جابجایی به قرمز دارد. همچنین ملاحظه شد که اندرکنش ذرات سبب کاهش مقدار قدر مطلق قسمت حقیقی و جابجایی طول موج تشدید پلاسمون یک رابطه درجه سوم و یک رابطه نمایی برازش شد.

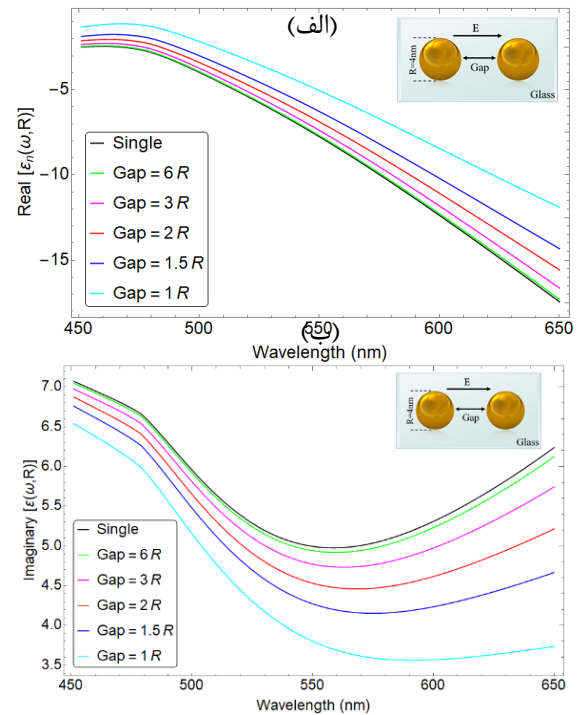


شکل ۴: جابجایی طول موج رزونانس پلاسمون جفت نانوذره طلا نسبت به  $(a/d)$ .

### مرجع ها

- [۱] M. Ohtsu, *Progress in Nano-Electro-Optics III: Industrial Applications and Dynamics of the Nano-Optical System*, Springer, Berlin, ۲۰۰۵.
- [۲] Q. Wang, J. Xu, and R. H. Xie, *Nonlinear Optics of Nanoparticles and Nanocomposites*, Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology, Vol. ۸, ۲۰۰۴.
- [۳] K.-H. Su, Q.-H. Wei, *Interparticle Coupling Effects on Plasmon Resonances of Nanogold Particles*, NANO LETTERS, Vol. ۳, No. ۸, ۲۰۰۳
- [۴] W. Rechberger, A. Hohenau, *Optical properties of two interacting gold nanoparticles*, Optics Communications ۲۲۰ (۲۰۰۳)
- [۵] E. Hao, G. C. Schatz, *Electromagnetic fields around silver nanoparticles and dimers*, J. Chem. Phys. ۱۲۰ (۲۰۰۴)
- [۶] A. Kheirandish, N. S. Javan, and H. Mohammadzadeh, *Scientific Reports (Nature Publisher Group)* ۱۰, ۶۵۱۷ (۲۰۲۰).
- [۷] C. F. Bohren, D. R. Huffman, "Absorption and Scattering of Light by Small Particles", Wiley, ۱۹۹۸.

در شکل (۳) قسمت حقیقی و موهومی تغییرات گذردهی نسبت به طول موج برای فواصل مختلف بین نانوذرات رسم شده است. همچنین برای مقایسه، گذردهی نانوذره منفرد هم رسم شده است. مشاهده می کنیم، در مقایسه با نسبت حالت ذرات منزوی، اندرکنش بین نانوذرات سبب کاهش در مقدار موهومی و نیز قدرمطلق قسمت حقیقی شده است.



شکل ۳: تغییرات قسمت حقیقی و موهومی گذردهی نسبت به طول موج برای فواصل مختلف بین نانوذرات

در شکل (۴) نمودار جابجایی طول موج تشدید پلاسمون نسبت به  $a/d$  آورده شده است و ملاحظه می شود که خیلی خوب توسط دو تابع مختلف زیر قابل برازش است:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} = 0.0015 \exp\left(\frac{a/d}{0.069}\right), \quad (14)$$

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} = 3.864 \left(\frac{a}{d}\right)^3, \quad (15)$$

که  $\Delta\lambda = \lambda_{\max} - \lambda_0$  است،  $\lambda_0$  طول موج تشدید پلاسمونی نانوذره منفرد و  $\lambda_{\max}$  طول موج تشدید پلاسمونی جفت نانوذره طلای اندرکنشی است.