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

بررسی و شبیه‌سازی ارتقاء میدان در نانو ذرات هسته-پوسته نیترید تیتانیوم(TiN) -اکسید روی(ZnO)

داوود عسگری، ندا امجدی، رسول ملک‌فر

دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک اتمی -مولکولی، دانشگاه تربیت مدرس

davood.asgari74@gmail.com, amjadineda68@gmail.com, Malekfar@modares.ac.ir

چکیده - در این پژوهش ابتدا سطح مقطع جذب، با استفاده از نظریه مای (Mie theory) برای نیترید تیتانیوم با شعاع ۳۰ نانومتر، پوسته اکسید روی باضخامت ۵ نانومتر و هسته- پوسته (نیترید تیتانیوم-اکسید روی) محاسبه شد. نتایج نشان می‌دهند که نانوساختار هسته- پوسته نسبت به حالت تک ذره نیترید تیتانیوم جذب بهتری دارد و جذب آن دارای یک قله تشدیدی در ۵۷۵ نانومتر است. در ادامه ارتقاء میدان برای هر سه حالت محاسبه شد و مشاهده گردید که مقدار ارتقاء میدان در نانو ذرات هسته- پوسته نسبت به نانوذره نیترید تیتانیوم خالص کمتر است. ارتقاء میدان برای نانوذره نیترید تیتانیوم با شعاع ۳۰در طول موج ۵۳۲ نانومتر در حدود ۱۳ بدست آمد. در نهایت برای طول‌موج ۵۳۲ نانومتر شعاع پوسته را متغیر در نظر گرفتیم و مشاهده شد که با افزایش شعاع پوسته مقدار ارتقاء میدان کاهش می‌یابد، برای پوسته با ضخامت ۵ نانومتر میزان ارتقاء میدان در حدود ۷ محاسبه شد.

کلیدواژه: ارتقا میدان، تشدید پلاسمون‌های سطحی (LSPR)، اکسید روی، نانو ذرات هسته-پوسته، نیترید تیتانیوم.

Investigation and simulation of field enhancement in titanium nitride (TiN) -zinc oxide (ZnO) core-shell nanoparticles

Davood Asgari, Neda Amjadi, Rasoul Malekfar
Faculty of Science, Tarbiat Modares University
davood.asgari74@gmail.com, amjadineda68@gmail.com, Malekfar@modares.ac.ir

Abstract- In this study, first the cross-sectional area of the adsorption using Mie theory for titanium nitride with a radius of 30 nm, zinc oxide shell with a thickness of 5 nm and the core-shell (titanium nitride-zinc oxide) were calculated. The results show that the nanostructure of the core-shell has higher adsorption than the single particle state of titanium nitride and its absorption has one resonance peaks in 575 nm. Then, the field enhancement for all three samples were calculated. The results show that the amount of field enhancement in the core-shell nanoparticles is less than that of pure titanium nitride nanoparticles. The field enhancement was obtained for titanium nitride nanoparticles with a radius of 30 nm at a wavelength of 532 nm at about 13. Then, for the wavelength of 532 nm, the shell radius was varied and it was observed that with increasing the shell radius, the amount of field enhancement starts to decrease. For a shell with a thickness of 5 nm, the amount of field enhancement was calculated to be about 7.

Keywords: Core-shell nanoparticles; localized Surface Plasmon Resonance (LSPR); titanium nitride, zinc oxide; field enhancement;

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-05]

مقدمه

امروزه نانوساختارهای فلزی به دلیل خواص شیمیایی و الکترومغناطیسی خاص خود کاربردهای فراوانی در زمینه‌های مختلف پژوهشی و صنعتی دارند. تشدید پلاسمون سطحی جایگزیده (LSPR) در نانوساختارهای فلزی، دلیل بسیاری از پدیده‌های نوری، مانند جذب و پراکندگی نور است. LSPR به پارامترهای خاص، مانند اندازه، شکل، دما، ضریب دی‌الکتریک ماده و محیط اطراف بشدت وابسته است و با تغییر دادن این پارامترها می‌توان نانوساختارها را برای کاربردهای متنوع تنظیم کرد. در فرکانس LSPR، میدان الکترومغناطیسی بشدت افزایش می‌یابد و این امر نقش مهمی در طیف‌سنجی پراکندگی رامان ارتقاءیافته سطحی (SERS)، افزایش انتشار فلورسانس و... دارد. در سال‌های اخیر نانوساختارهای هسته-پوسته با توجه به قابلیت‌های بالای خود، مانند افزایش پایداری شیمیایی و گرمایی موردتوجه بسیاری از محققان قرارگرفته‌اند. نانوساختارهای هسته -پوسته در انواع مختلف فلز-فلز، فلز-نیمه‌هادی، نیمه‌هادی- نیمه‌هادی و... وجود دارند و بسته به نوع آن، خواص متفاوتی را از خود نشان می‌دهند. بررسی انواع نانو ذرات هسته - پوسته برای ارتقاء طیف‌سنجی رامان توسط لی و همکاران ارائه شده است [۱].

نانو ذرات $Ag@TiO_2$ برای SERS سنتز و مشاهده شده است که این نانو ذرات هسته -پوسته در مقایسه با نانو ذرات خالص نقره، حساسیت بالاتری را برای SERS دارند [۲].

در طی یک مطالعه دیگر توانستند میدان نزدیک نانو ذرات را با استفاده از یک ساختار چندلایه افزایش دهند. این ساختار سه لایه از یک هسته نقره و دو پوسته سیلیکون و طلا تشکیل‌شده بود. در این پژوهش نشان دادند که استفاده از این ساختار چندلایه در مقایسه با ساختار کروی تک ذره طلا یا نقره، میدان نزدیک را به مقدار بیشتری افزایش می‌دهد[۳ و ۴].

نیترید تیتانیوم(TiN)

در سال‌های اخیر نیترید تیتانیوم به دلیل خواص منحصربه‌فردی که دارد موردتوجه قرارگرفته است. رفتار فلزی نیترید تیتانیوم همراه با سختی و پایداری شیمیایی آن در تحقیقات میکروالکترونیک موردتوجه است. نانو ذرات نیترید تیتانیوم دارای پیک تشدید پلاسمونی پهن در پنجره شفافیت بیولوژیکی هستند. خواص پلاسمونی نانو ذرات نیترید تیتانیوم با استفاده از استوکیومتری نیتروژن/فلز قابل تنظیم است و می‌تواند تغییر کند. یکی از مهم‌ترین ویژگی‌های این ماده این است که می‌تواند دماهای بالا را بدون ذوب شدن تحمل کند. دمای ذوب نیترید تیتانیوم، ۲۹۳۰ درجه سانتی‌گراد است. این خاصیت مهم برای کاربردهایی که در دمای بالا به ماده با خاصیت پلاسمونی نیاز دارد مانند فوتو ولتایی حرارتی (ترموفوتوولتایی) مناسب است. در طی یک شبیه‌سازی فاکتور ارتقاء را برای نانولوله‌های نیترید تیتانیوم با طول‌های متفاوت بدست آوردند [۵]. همچنین از نانو ذرات سنتز شده نیترید تیتانیوم به‌عنوان زیرلایه SERS استفاده شده که فاکتور ارتقاء برای مولکول‌های متیلین آبی (Methylene Blue) و رودآمین 6G (Rhodamine 6G)، از مرتبه 10^6 به دست آمده است[۶].

اکسید روی (ZnO)

ویژگی‌های ذاتی اپتیکی نانوساختارهای اکسید روی به‌طور عمده از طریق مطالعه طیف فوتولومینسانس آن حاصل می‌شود. اکسید روی نیمرسانایی شفاف است و گاف انرژی آن در دماهای پایین ۳,۴۴۳ الکترون‌ولت و در دمای اتاق ۳,۳۷ الکترون‌ولت اندازه‌گیری شده است. این ویژگی اکسید روی را برای کاربردهای اپتوالکترونیکی در نواحی طیفی

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-05]

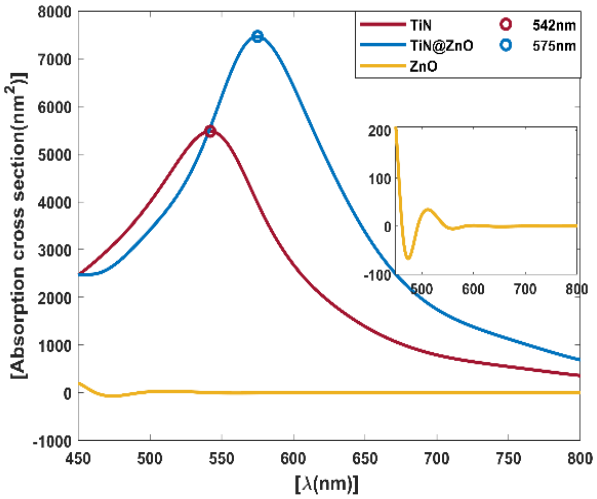
فرابنفش، شامل دیودهای نورگسیل، لیزر دیودها و آشکارسازهای نوری مطلوب می‌سازد. درواقع اکسید روی در طیف فرابنفش-مرئی یک بیشینه تابشی در طول‌موج ۳۸۰ نانومتر دارد که حاکی از عبور دهی نور مرئی و جذب در ناحیه فرابنفش است. استفاده از اکسید روی را می‌توان در مراجع [9- ۷] مشاهده کرد.

شبیه‌سازی

برای مشاهده فاکتور ارتقاء میدان در نانو ذرات از روش‌های متفاوت شبیه‌سازی مثل تقریب دوقطبی گسترده (DDA)، المان محدود در حوزه فرکانسی (FEFD)، دیفرانسیل محدود در حوزه زمانی (FDTD)، المان محدود FEM و ... استفاده می‌شود. در این پژوهش از نرم‌افزار کامسول (COMSOL Multiphysics) و متلب (MATLAB) استفاده‌شده است. برای انجام این شبیه سازی در کامسول از ماژول RF (Radio Frequency) استفاده شد، در طی این شبیه‌سازی نانوساختار در یک میدان یکنواخت E0=1(V/m) قرار گرفت و میزان ارتقاء میدان که متناسب با [E/E0]^2 است محاسبه شد. محیط اطراف نانوذره هوا با ضریب شکست ۱ در نظر گرفته شد و ضریب دی الکتریک برای نیترید تیتانیوم با استفاده از داده های تجربی در کتاب آقای پالیک (Palik) وارد شده است.

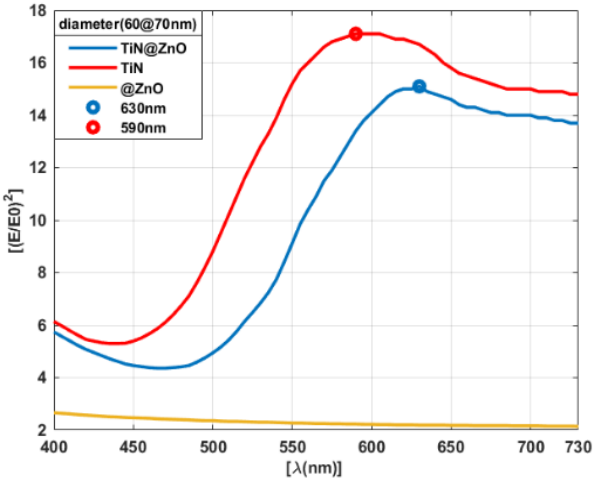
نظریه مای در سال ۱۹۰۸ توسط گوستاو مای برای نانو ذرات کلوئیدی ارائه شد و این نظریه باوجود محاسبات پیچیده پاسخ دقیقی برای میدان در اطراف نانو ذرات می‌دهد. ابتدا با استفاده از نظریه مای سطح مقطع جذب با نرم‌افزار متلب و سپس فاکتور ارتقاء میدان به‌وسیله کامسول برای نانو ذرات محاسبه شد.

با استفاده از نرم‌افزار متلب طیف جذب را برای هسته-پوسته (نیترید تیتانیوم-اکسید روی)، هسته (نیترید تیتانیوم) با شعاع ۳۰ نانومتر و پوسته (اکسید روی) باضخامت ۵ نانومتر محاسبه شد. شکل (۱).



شکل ۱: نمودار جذب-طول موج برای هرسه حالت

در ادامه میزان ارتقاء میدان برحسب طول‌موج رسم و مشاهده شد که میزان ارتقاء میدان در حالت هسته-پوسته کمتر است و جا به جایی قرمز دارد.

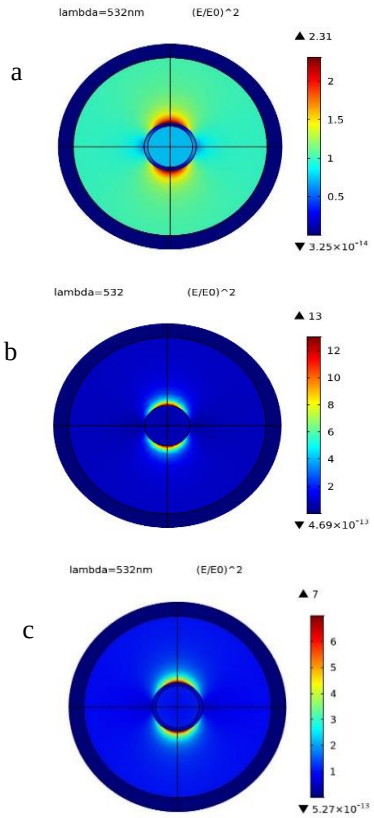


شکل ۲: نمودار ارتقاء میدان برای نمونه‌های مختلف.

جدول ۱: ارتقاء میدان برای نمونه های متفاوت

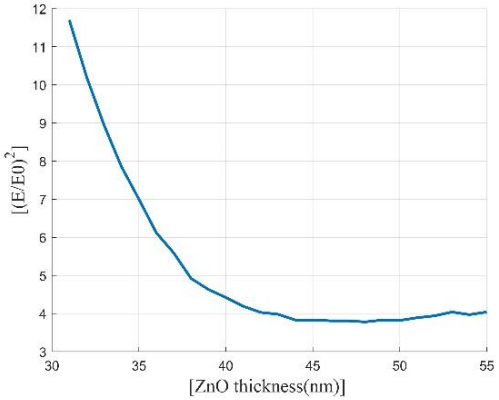
نانوساختار	قطر(nm)	ارتقاء میدان	مرجع
TiN	۴۰	۱۷	تحقیق حاضر
Au	۴۰	۴۷	[3]
Ag	۴۰	۵۰	[3]
TiN-ZnO	۶۰-۷۰	۱۵	تحقیق حاضر
Ag-ZrO_2	۶۰-۷۰	۱۶	[10]

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-05]



شکل ۳: ارتقاء میدان در طول‌موج ۵۳۲ نانومتر برای (a) اکسید روی، (b) نیترید تیتانیوم، (c) هسته-پوسته.

با افزایش ضخامت پوسته ارتقاء میدان کاهش می‌یابد.



شکل ۴: ارتقاء میدان با تغییر ضخامت پوسته

نتیجه‌گیری

نانوذره نیترید تیتانیوم در ناحیه مرئی دارای یک قله جذبی در ۵۴۲ نانومتر است. مزیت این ساختار تحمل دمایی بالا و ارزان بودن آن است بااینکه میزان ارتقاء میدان توسط نانوذره نیترید تیتانیوم در مقایسه با فلزات نجیب مثل طلا و نقره کمتر است. استفاده از اکسید روی به‌عنوان پوسته موجب افزایش مقدار جذب(شکل۱) و درعین‌حال موجب کاهش مقدار ارتقاء میدان شده است(شکل۲). به‌طورکلی استفاده از اکسید روی موجب جابه جایی به سمت طول‌موج‌های قرمز در طیف جذب و ارتقاء میدان شده است. همچنین نشان دادیم که با افزایش ضخامت پوسته از ۱ تا ۲۰ نانومتر ارتقاء میدان کاهش می‌یابد (شکل ۴).

مرجع‌ها

[1] Li, Jian-Feng, et al. "Core–shell nanoparticle-enhanced Raman spectroscopy." *Chemical reviews* 117.7 (2017): 5002-5069.

[2] Yang, Jie, et al. "Highly sensitively detecting tetramethylthiuram disulfide based on synergistic contribution of metal and semiconductor in stable Ag/TiO2 core-shell SERS substrates." *Applied Surface Science* 539 (2021): 147744.

[3] Paria, Debadrita, Chi Zhang, and Ishan Barman. "Towards rational design and optimization of near-field enhancement and spectral tunability of hybrid core-shell plasmonic nanoprobes." *Scientific reports* 9.1 (2019): 1-9.

[4] Zhang, Hua, et al. "Core–shell nanostructure-enhanced Raman spectroscopy for surface catalysis." *Accounts of chemical research* 53.4 (2020): 729-739.

[5] Zhao, Fengtong, et al. "TiN nanorods as effective substrate for surface-enhanced Raman scattering." *The Journal of Physical Chemistry C* 123.48 (2019): 29353-29359.

[۶] م. اسماعیل‌زاده، "تولید نانو ذرات نیترید تیتانیوم به روش کندگی لیزری و استفاده از آن به‌عنوان زیرلایه"، پایان_نامه مقطع ارشد، دانشگاه تربیت مدرس، ۱۳۹۶.

[7] Barbillon, Grégory. "Fabrication and SERS performances of metal/Si and metal/ZnO nanosensors: A review." *Coatings* 9.2 (2019): 86..

[8] Liu, Heguang, et al. "Surface enhanced Raman scattering (SERS) effect using flexible and self-closing ZnO nanowire-Au nanoparticle heterostructures." *Applied Surface Science* 496 (2019): 143681.

[9] Yang, Lili, et al. "Fabrication of semiconductor ZnO nanostructures for versatile SERS application." *Nanomaterials* 7.11 (2017): 398.

[10] Yongfeng Zhou, et al. "A facile seed growth method to prepare stable Ag@ZrO2 core-shell SERS substrate "Journal Pre-proof (2019)

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-05]