بیست و یکمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران
و هفتمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
۲۳ تا ۲۵ دی ماه ۱۳۹۳، دانشگاه شهید بهشتی

بررسی خواص اپتیکی نانومیله‌های هسته-پوسته سیلیکا-طلا

ستار عباسی[۱،۲]، مجتبی ثروت خواه[۱،۲*] و رضا محمدی[۳]

۱- گروه فیزیک،پردیس علوم تحقیقات فارس،دانشگاه آزاد اسلامی،مرودشت،ایران
۲- گروه فیزیک،واحد مرودشت،دانشگاه آزاد اسلامی،مرودشت،ایران
۳- گروه فیزیک، دانشکده‌ی علوم پایه، دانشگاه پیام‌نور

چکیده –تا کنون مطالعات فراوانی بر روی ویژگی‌های اپتیکی نانوذرات طلا در ناحیه اول فروسرخ نزیک *(650nm-950nm)* انجام شده است، در صورتی که در ناحیه‌ی دوم فروسرخ نزدیک *(1000nm-1350nm)* نور به عمق بیشتری از بافت بدن انسان نفوذ می کند و در نتیجه برای به کارگیری در درمان نورگرمایی سرطان *(PTT)* مناسب‌تر خواهد بود. در این مقاله با استفاده از روش المان محدود *(FEM)* سطح مقطع جذب نانومیله‌های هسته-پوسته سیلیکا-طلا محاسبه شده‌است. نتایج محاسبات نشان می‌دهند که بسامدپلاسمون سطحی این نانوساختارها وابستگی شدیدی به ضخامت پوسته دارد و قابل تنظیم برای قرار گرفتن در ناحیه دوم نزدیک فروسرخ می باشند.

کلید واژه- پلاسمون سطحی، سطح مقطع جذب، فروسرخ نزدیک،نانومیله پوسته-هسته.

Investigation of optical properties of core-shell silica-gold nanorods

Sattar Abbasi[1,2], Mojtaba Servat khah[1,2*], Reza Mohammadi[3]

1- Physics Department, Science and Research Branch, Islamic Azad University, Fars, Iran.
2- Department of Physics, Marvdasht Branch, Islamic Azad University, Marvdasht, Iran
3- Department of physics, Payam-e Noor University

Abstract

Many studies have been performed on the optical properties of gold nanoparticles in the first near-infrared region (NIR) (650nm-950nm). On the other hand, the second NIR (1000nm-1350nm) light can penetrate into body tissue more hence it is more suitable in cancer photo-thermal therapy applications (PTT). In this paper, absorption cross sections of core-shell silica-gold are calculated using finite element (FEM) method. The results indicate that the surface plasmon frequency of these nanostructures strongly depend on the shell thickness and could easily be tuned for the second NIR.

Surface plasmon, absorption cross section, near-infrared, core-shell nanorod.

*servatkhah@yahoo.com

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

[Downloaded from opsi.ir on 2025-12-17]

مقدمه

در بین نانوذرات پلاسمونی فلزی، نانوذرات طلا به دلیل سازگاری خوب زیستی و پیوستگی مناسب با انواع مولکولهای زیستی لیگاند، کاندیدای مناسب‌تری در درمان سرطان می‌باشند[1].

اندازه‌ی ترجیحی نانوذرات طلا باید کمتر از ۱۰۰ نانومتر باشد چون نانوذرات بزرگتر نیمه عمر گردش خون پایینی دارند و سریعا توسط سیستم بدن پاک می شوند که برای هدف‌گیری خاص مکانهای تومور مطلوب نیست [1,2]. علاوه بر این نانوذرات طلای ایده‌آل مناسب برای درمان سرطان، باید سطح مقطع بزرگتر در ناحیه فروسرخ نزدیک داشته باشند. سطح مقطع جذب یک فاکتور مهم در برآورد تاثیر گرمای حاصل از لیزر است [3].دلیل انتخاب ناحیه فروسرخ نزدیک آن است که بافتهای سالم کمترین جذب و پراکندگی در این ناحیه دارند [4,5]. با این وجود بازه‌ی طول موجی 650nm تا 950nm که پنجره‌ی اول فروسرخ نزدیک نامیده می شود به دلیل نویز زمینه ایجاد شده توسط فلورسان بافت و محدودیت عمق نفوذ بین 1cm تا 2cm بهینه نیست [6]. مطالعات اخیر نشان داده است که در بازه‌ی طول موجی بین 1000nm تا 1350nm که پنجره‌ی دوم فروسرخ نزدیک نامیده می‌شود عمق نفوذ به درون بافت به بیشترین مقدار خود می‌رسد [7]. این ویژگی برای درمان تومورهایی که در عمق بیشتر قرار دارند بسیار مطلوب است.

تحقیقات بسیاری در تنظیم ویژگی‌های اپتیکی نانوذرات طلا با شکلهای مختلف به پنجره اول فروسرخ نزدیک انجام شده است. در این بین نانومیله‌ها به دلیل داشتن سطح مقطع بزرگتر و فرآیند سنتز آسان کاندیدای مناسب‌تری برای استفاده در درمان سرطان محسوب می شوند [8].

در این مقاله ویژگی‌های اپتیکی نانومیله‌های هسته-پوسته سیلیکا-طلا، مورد بررسی قرار می‌گیرد و با نانومیله‌ها مقایسه و امتیاز استفاده از نانوپوسته‌های میله‌ای نسبت به نانومیله‌ها بیان می شود.

روش مدل سازی

شبیه سازی‌ها در این مقاله با استفاده از روش المان محدود (FEM) انجام شده است. محیط زمینه‌ای که نانوذرات در آن قرار دارند، آب با ضریب شکست 1.34 در نظر گرفته شده و از داده های مرجع [9] برای ثابت دی الکتریک طلا استفاده شده است. ضریب شکست سیلیکا نیز 1.44 می باشد [9].

در شبیه سازی‌های انجام شده، سطح مقطع جذب ذره با توجه به زیر محاسبه می شود:

$$C_{abs} = \frac{1}{I_0} \iiint Q_h dv \qquad (1)$$

که در آن I_0 شدت نور فرودی، Q_h چگالی توان اتلافی در ذره است و به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$Q_h = Q_{ml} + Q_{rh} \qquad (2)$$

که Q_{ml} اتلاف مغناطیسی و Q_{rh} اتلاف مقاومتی، با روابط زیر هستند:

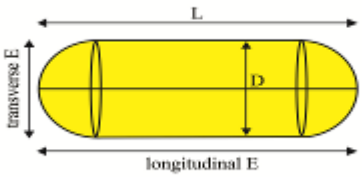
$$Q_{ml} = \frac{1}{2}\mathrm{Re}(i\,\omega B.H^*) \qquad (3)$$

$$Q_{rh} = \frac{1}{2}(E.J) \qquad (4)$$

و انتگرال بر روی حجم ذره گرفته می‌شود[10-12].

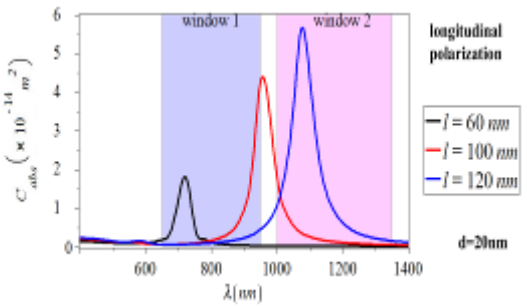
بحث و نتیجه گیری

شکل ۱، طرحواره‌ای از نانومیله‌ها و هسته‌ی از جنس سیلیکای نانوپوسته‌های شبیه‌سازی شده در این مقاله را نشان می‌دهد که نانوپوسته‌ها، پوسته‌ای به ضخامت t از جنس طلا نیز دارند. نور فرودی با قطبش طولی (میدان الکتریکی در امتداد طول L نانوذره) یا قطبش عرضی (میدان الکتریکی در امتداد قطر D نانوذره) بر آن تابیده می شود[13].

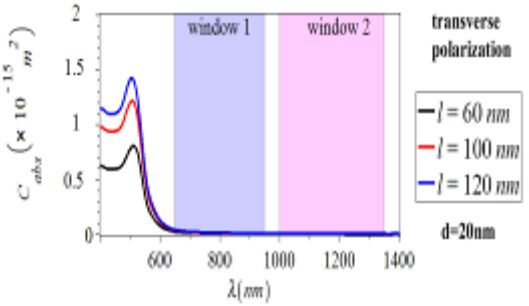


شکل ۱- طرحواره ای از نانومیله و هسته نانوپوسته با ابعاد دلخواه

[Downloaded from opsi.ir on 2025-12-17]

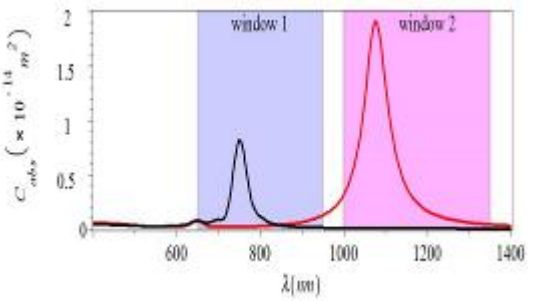


شکل ۲- طیف جذبی محاسبه شده برای نانومیله‌های با طول های مختلف زمانی که تحت قطبش طولی نور قرار دارد.



شکل ۳- طیف جذبی محاسبه شده برای نانومیله‌هایی با طول‌های مختلف زمانی که تحت قطبش عرضی نور قرار دارد.

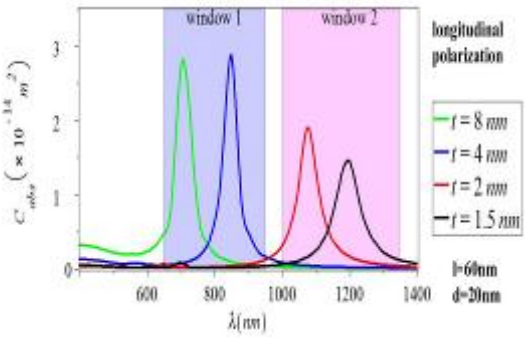
از بررسی نمودارهای طیف جذبی شکلهای ۲و۳ واضح است که با افزایش نسبت وجوه (نسبت طول به قطر) از ۳ به ۶ مد طولی از پنجره اول فروسرخ نزدیک، به پنجره دوم منتقل می‌شود.در حالی که مد عرضی انتقالی را تجربه نمی کند.بنابراین اگر بخواهیم سطح مقطع جذب نانومیله‌ها را در پنجره‌ی دوم فروسرخ نزدیک، تنظیم کنیم باید ابعاد نانومیله، بزرگتر از 100nm باشد. شکل ۴ طیف جذبی نانوپوسته‌ای را نشان می‌دهد که قله تشدید پلاسمونی آن در پنجره‌ی دوم قرار گرفته است.



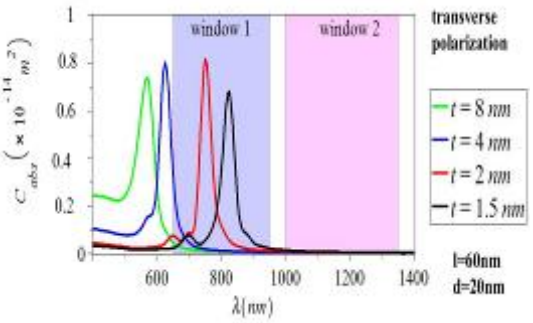
شکل ۴- طیف جذبی محاسبه شده برای نانوپوسته میله‌ای شکل با ابعاد (l=60nm,d=20nm,t=2nm) زمانی که تحت تابش طولی(نمودار قرمز رنگ) و عرضی (نمودار سیاه رنگ) نور قرار دارد.

مقایسه‌ی نمودار شکلهای۲ و۴ مزیت استفاده از نانوپوسته‌ها را نشان می‌دهد زیرا می‌توان با ابعاد کوچکتر از 100nm قله تشدید پلاسمونی را در پنجره‌ی دوم فروسرخ نزدیک تنظیم کرد. از طرف دیگر استفاده از نانوپوسته‌ها با داشتن هسته‌ای از جنس سیلیکا هزینه درمان را پایین می آورد زیرا نیاز به استفاده‌ی کمتر از طلا می باشد.

مقایسه نمودار شکلهای ۵ و ۶ نشان می‌دهد که در هر دو مد طولی و عرضی با کاهش ضخامت پوسته سطح مقطع جذب کاهش می یابد اما در مد طولی قله جذب به سمت پنجره‌ی دوم فروسرخ نزدیک، منتقل می‌شود و در مد عرضی قله جذب به سمت طول موج‌های بلندتر منتقل شده اما در پنجره‌ی اول فروسرخ نزدیک، باقی می ماند.



شکل ۵- طیف جذبی محاسبه شده نانوپوسته های میله-ای(l=60nm,d=20nm) با ضخامت های مختلف زمانی که تحت تابش طولی قرار دارد.

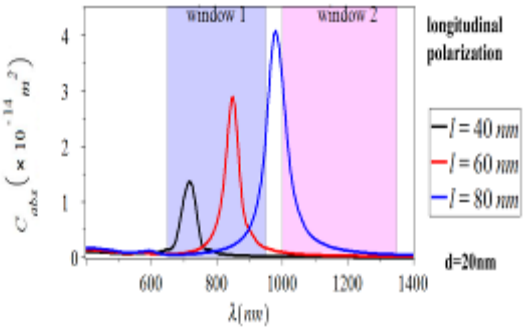


شکل ۶- طیف جذبی محاسبه شده نانوپوسته‌های میله-ای(l=60nm,d=20nm) با ضخامت های مختلف زمانی که تحت تابش عرضی نور قرار دارد.

شکل ۷ نیز نشان می‌دهد که با افزایش طول، قله تشدید پلاسمونی به پنجره‌ی دوم منتقل شده و سطح مقطع جذب افزایش می‌یابد. بنابراین در صورت نیاز به سطح

[Downloaded from opsi.ir on 2025-12-17]

مقطع جذب بیشتر، می‌توان طول نانوپوسته را افزایش داد.



شکل ۷- طیف جذبی محاسبه شده نانوپوسته‌های میله‌ای با طول‌های مختلف و t=4nm زمانی که تحت تابش طولی نور قرار دارد.

نتیجه‌گیری

باتوجه به شبیه‌سازی‌های انجام شده، ضخامت پوسته و طول نانوذره دو عامل اصلی هستند که ویژگی‌های اپتیکی نانوپوسته‌های میله‌ای شکل را تنظیم می‌کند در نتیجه می‌توان با کاهش ضخامت پوسته محل قله را در ناحیه‌ی دوم نزدیک فروسرخ قرار داد و با افزایش طول نانوذره سطح مقطع جذب را به منظور کارایی بیشتر در درمان سرطان افزایش داد. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت، در درمان تومورهایی که در اعماق بافت بدن قرار دارند استفاده از نانوپوسته‌ها موثرتر است.

مراجع

[1] Dreaden, E. C., Mackey, M. A., Huang, X., Kang, B., and El-Sayed, M. A., *Beating cancer in multiple ways using nanogold*, **Chem. Soc. Rev**., 2011, 40, 3391–3404.

[2] Wang, Y., Black, K. C. , Luehmann, H. P., Li, W., Zhang, Y. , Cai, X., Wan, D., Liu, S.-Y., Li, M., Kim, P., Li, Z.-Y., Wang, L. V., Liu, Y., and Xia, Y., *A comparison study of gold nanohexapods, nanorods, and nanocages for photothermal cancer treatment*, **ACS Nano 7(3)**,(2013), 2068–2077.

[3] Khlebtsov, B., Zharov, V., Melnikov, A., Tuchin, V., and Khlebtsov, N., *Optical amplification of photothermal therapy with gold nanoparticles and nanoclusters*, **Nanotechnology**,(2006), 17, 5167.

[4] Hong, G. , Robinson, J. T., Zhang, Y. , Diao, Antaris, A. L. , Wang, Q., and Dai , H., *In Vivo Fluorescence Imaging with Ag2S Quantum Dots in the Second Near-Infrared Region*, **Angew. Chem**., (2012), 124, 9956–9959.

[5] Yasun, E., Kang, H., Erdal, H., Cansiz, S., Ocsoy, I., Huang, Y.-F., and Tan, W., *Cancer cell sensing and therapy using affinity tag-conjugated gold nanorods*, **Interface Focus**, (2013), 3,20130006.

[6] Smith, W., Mancini, M. C., and Nie , S., *Second window for in vivo imaging*, **Nat. Nanotechnol**.,(2009), 4, 710–711.

[7] Welsher, K., Sherlock, S. P., and Dai, H., *Deep-tissue anatomical imaging of mice using carbon nanotube fluorophores in the second near-infrared window*, Proc. **Natl. Acad. Sci.U. S. A**., (2011), 108, 8943–8948.

[8] vonMaltzahn, G., Park, J.-H., Agrawal, A., Bandaru, N. K. , Das, S. K., Sailor, M. J., and Bhatia, S. N.,*Computationally guided photothermal tumor therapy using long-circulating gold nanorod antennas*, **Cancer Res**., (2009), 69, 3892–3900.

[9] http://refractiveindex.info.

[10] Jin, J., *The Finite Element Method in Electromagnetics*, **Wiley-IEEE Press**,(2002) ,2nd ed.

[11] Kovetz, A., *The Principles of Electromagnetic Theory*, **Cambridge University Press**,(1990).

[12] Wangsness, R.K., *Electromagnetic Fields*, **John Wiley & Sons**, (1986), 2nd ed.

[13] Wang, S., Xu, H., Ye,J., *Plasmonic rod-in-shell nanoparticles for photothermal therapy*, ***Phys.Chem.Chem.Phys.***, 2014, 16, 12275-12281.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-12-17]