بیست و ششمین کنفرانس اپتیک و
فوتونیک ایران و دوازدهمین کنفرانس
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،
دانشگاه خوارزمی،
تهران، ایران.
۱۵-۱۶ بهمن ۱۳۹۸

خواص نوری لایه‌ی نازک نانولوله‌های تیتانیوم دی‌اکسید حاوی نقره

سید کامران طاهریان قهفرخی[۱]، مجید رشیدی هویه[۲]

دانشگاه سیستان و بلوچستان

[1]kamran.taherian8432@gmail.com, [2]majid.rashidi@phys.usb.ac.ir

چکیده – خواص نوری لایه‌ی نازکی از نانولوله‌های تیتانیوم دی‌اکسید حاوی نقره مورد بررسی قرار گرفت. بدین منظور ابتدا مدلی بر اساس تداخل پرتوهای بازتابی از لایه نازک ارائه شد. به کمک این مدل، بازتاب و جذب نمونه به دست آمد. نتایج نشان داد که با افزایش ضخامت جداره نانولوله‌های تیتانیوم دی‌اکسید، طول موج تشدید پلاسمون سطحی ناشی از حضور نقره در ساختار نمونه، به سمت قرمز جابه‌جا می‌شود و دامنه جذب افزایش می‌یابد. همچنین اثر شکل و ریخت‌شناسی ساختارهای مذکور بر پاسخ نوری، به کمک بسته نرم‌افزاری کامسول مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج شبیه‌سازی موید دو مد تشدید پلاسمون سطحی عرضی و طولی است.

کلید واژه-«تئوری محیط مؤثر»، «نانولوله تیتانیوم دی‌اکسید»، «نانوساختار نقره»، «تشدید پلاسمون سطحی».

Optical properties of a thin film of titanium dioxide nanotube containing silver

Seyed Kamran Taherian Ghahfarokhi, Majid Rashidi Huyeh

Department of Physics, University of Sistan and Baluchestan

Abstract- In this communication, were presented the optical properties of a thin film of titanium dioxide nanotubes including silver. For this, first, a model was developed to evaluate the reflectance and the absorption spectra. The model is based on the interference of multi-beam, reflected from the titanium dioxide nanotubes thin layer. The results showed that by increasing the nanotube wall thickness, the surface plasmon resonance wavelength presents a redshift and its amplitude increases. In addition, the nanotube morphology and shape effects were investigated, using COMSOL Multiphysics. The results confirmed the presence of two surface plasmon resonance modes of longitudinal and transversal.

Keywords: “Effective Medium Theory”, “Silver Nano-Structures”, “Surface Plasmon Resonance”, “Titanium Dioxide Nanotube”.

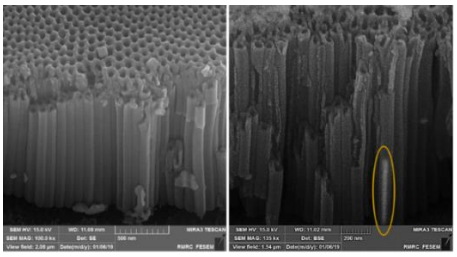
مقدمه

نانولوله‌های تیتانیوم دی‌اکسید امروزه توجه محققین زیادی را به خود جلب نموده است. این توجه به علت کاربردهای مختلف از جمله در ساخت ادوات نوری و الکترونی و همچنین کاربردهای پزشکی و پارپزشکی می‌باشد [۱, ۲]. نانولوله‌های TiO_2 ممکن است به روش آندایزینگ تهیه شود [۳]. در حقیقت با انجام فرایند آندایزینگ روی سطح فلز

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

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-03]

تیتانیوم، لایه‌ی نازکی از نانولوله‌های TiO_2 روی سطح تیتانیوم ایجاد می‌شود [۴]. از سوی دیگر نانوذرات فلزات نجیب به علت خواص نوری ویژه‌ی وابسته به پدیده تشدید پلاسمون سطحی، مورد توجه است [۵]. در حقیقت پدیده تشدید پلاسمون سطحی بر اثر نوسانات هماهنگ الکترون-های آزاد نانوذرات فلزی تحت اعمال میدان الکتریکی امواج نوری به وجود می‌آید و منجر به جذب نور در طول‌موجی، تحت طول‌موج تشدید پلاسمون سطحی می‌شود. به همین دلیل این نانوذرات در ساخت ادوات فوتونیکی و همچنین کاربردهای پزشکی پیشنهاد شده‌اند. در این تحقیق، هدف بررسی خواص نوری نانولوله‌های تیتانیوم دی‌اکسید حاوی نقره می‌باشد. ما قبلا تهیه و مشخصه‌یابی چنین ساختاری را به تفصیل در مرجع ۶ ارائه داده‌ایم. این ساختار، شامل لایه‌ی نازکی از نانولوله‌های TiO_2 می‌باشد که درون برخی از نانولوله‌ها با فلز نقره پر شده‌است (شکل ۱). به منظور بررسی خواص نوری چنین ساختاری، ابتدا مدلی بر اساس تداخل بس‌پرتویی از لایه نازک ارائه می‌شود. از طرفی به منظور بررسی پاسخ موضعی این گونه ساختارها به امواج نورانی، سطح مقطع جذب چنین ساختاری به کمک بسته نرم‌افزاری Comsol Multiphysics شبیه‌سازی شد.



(الف) (ب)

شکل ۱: تصویر FESEM از سطح مقطع نمونه سنتز شده، (الف) چیدمان منظم نانولوله‌ها به خوبی مشخص است. (ب) نانومیله نقره در درون نانولوله تشکیل شده است [۶].

مدل

مدل بس‌پرتوی

همان طور که در مقدمه ذکر شد، نمونه مورد نظر شامل لایه نازکی از نانولوله‌های TiO_2 می‌باشد که درون برخی از آنها با نقره پر شده است (شکل ۲). دامنه بازتاب نور، با توجه به تداخل پرتوهای بازتابی از سطح مشترک هوا-لایه و لایه-زیرلایه به صورت زیر بیان می‌شود [۷]:

$$r = \frac{r_{0f} + r_{fs} e^{-2j\beta}}{1 + r_{0f} r_{fs} e^{-2j\beta}} \qquad (۱)$$

$$\beta = 2\pi \left(\frac{d}{\lambda_0} \right) \left(\tilde{n}_f \right) \cos\left(\varphi_f \right) \qquad (۲)$$

که φ_f، $\tilde{n}_f$، λ_0 و d به ترتیب زاویه‌ی شکست در لایه نازک، ضریب شکست لایه نازک، طول‌موج پرتو فرودی و ضخامت لایه نازک می‌باشند. r_{ij} دامنه بازتاب فرنل از سطح مشترک دومحیط i و j می‌باشند که برای قطبش‌های عمود p و موازی s عبارتند از:

$$r_{ij}^{p} = \frac{\tilde{n}_j \cos\left(\varphi_i\right) - \tilde{n}_i \cos\left(\varphi_j\right)}{\tilde{n}_j \cos\left(\varphi_j\right) + \tilde{n}_i \cos\left(\varphi_i\right)} \qquad (۳)$$

$$r_{ij}^{s} = \frac{\tilde{n}_i \cos\left(\varphi_i\right) - \tilde{n}_j \cos\left(\varphi_j\right)}{\tilde{n}_i \cos\left(\varphi_i\right) + \tilde{n}_j \cos\left(\varphi_j\right)} \qquad (۴)$$

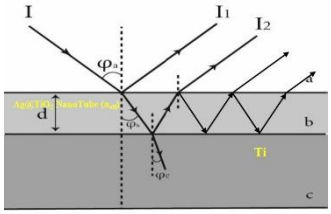
با توجه به این واقعیت که کسر حجمی نقره بسیار اندک است، ضریب شکست لایه نازک را می‌توان از تئوری ماکسول-گرنت به دست آورد [۸]:

$$\tilde{\varepsilon}_f = \varepsilon_a \frac{(1+2p)\tilde{\varepsilon}_m + 2(1-p)\tilde{\varepsilon}_a}{(1-p)\tilde{\varepsilon}_m + (2+p)\tilde{\varepsilon}_a} \qquad (۵)$$

که در آن $\tilde{\varepsilon}_m$ تابع دی‌الکتریک نقره و p کسر حجمی نقره در محیط است. ε_a تابع دی‌الکتریک محیط اطراف نقره است. این محیط شامل نانولوله‌های TiO_2 می‌باشد. تابع دی‌الکتریک چنین محیطی را ممکن است به کمک نظریه محیط مؤثر بروگمان به صورت زیر نوشت [۸]:

$$p_0 \left(\frac{1-\varepsilon_a}{1+2\varepsilon_a} \right) + \left(1-p_0\right) \left(\frac{\varepsilon_{TiO_2} - \varepsilon_a}{\varepsilon_{TiO_2} + 2\varepsilon_a} \right) = 0 \qquad (۶)$$

که p_0 کسر حجمی هوا، و ε_{TiO_2} ثابت دی‌الکتریک TiO_2 است.



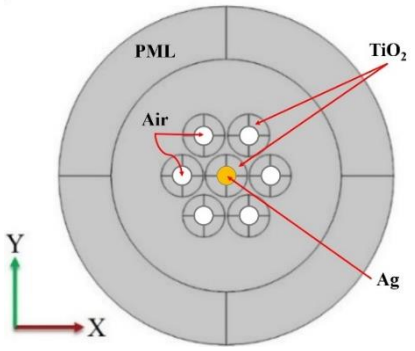
شکل ۲: طرح‌واره‌ی مدل لایه‌ای شامل یک لایه نازک از نانولوله‌های TiO_2 که بخشی از آنها با نقره پر شده‌اند، روی بستر تیتانیوم.

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

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-03]

سطح مقطع جذب

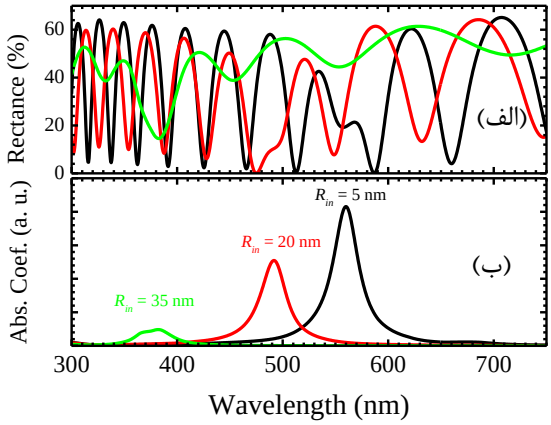
در مدل بس‌پرتویی بالا، به منظور بررسی خواص نوری نمونه‌ها، از نظریه‌های محیط موثر استفاده شد. در چنین نظریه‌هایی، یک محیط غیرهمگن با یک محیط همگن جایگزاری می‌شود. در این‌گونه نظریه‌ها، که بر اساس میدان متوسط می‌باشد، چیدمان ساختار لحاظ نمی‌شود و از طرفی از پراکندگی موج صرف‌نظر می‌شود. به منظور بررسی اثرات پراکندگی در ساختار مورد نظر، جذب چنین ساختاری به کمک بسته نرم‌افزاری کامسول محاسبه شد. هندسه مورد نظر در شکل (۳) نمایش داده شده است. این هندسه شامل نانولوله‌ی TiO_2 می‌باشد که در کنار یکدیگر قرار داده‌شده‌اند. درون نانولوله‌ی مرکزی با نقره پرشده‌است در حالی که درون نانولوله‌های مجاور، هوا در نظر گرفته شده است. به منظور جلوگیری از لحاظ غیر واقعی پراکندگی امواج از لبه‌های خارجی، اطراف ساختار از یک لایه جاذب کامل (PML) در شبیه‌سازی استفاده شد.



شکل ۳: هندسه مربوط به شبیه‌سازی به کمک بسته نرم‌افزاری کامسول شامل نانولوله‌های TiO_2، نانولوله مرکزی حاوی نقره می‌باشد. یک لایه‌ی جاذب کامل (PML) در سطح بیرونی جهت حذف پراکندگی غیر واقعی از لبه‌های خارجی در نظر گرفته شده‌است.

نتایج و بحث

به منظور بررسی خواص نوری نمونه‌های مذکور، از مدل بس‌پرتویی، که در بالا ارائه شد، بهره گرفته شد. بدین منظور ضخامت فیلم نازک حاوی نانولوله‌های TiO_2، بر اساس نتایج تجربی که در مرجع ۶ آمده است، ۱ میکرون در نظر گرفته شد. همچنین به صورت نوعی کسر حجمی نقره از مرتبه ۰/۰۰۱ درصد می‌باشد. به منظور بررسی اثر ابعاد نانولوله‌ها روی خواص نوری، شعاع خارجی نانولوله‌ها مقدار ثابت ۴۰nm در نظر گرفته شد و شعاع داخلی آنها مقادیر متفاوت ۵، ۲۰ و ۳۵nm لحاظ شدند. همچنین در محاسبات، تابع دی‌الکتریک نقره و TiO_2 از مراجع ۹ و ۱۰ استخراج شدند. نتایج در شکل (۴) آمده است. در شکل (۴) الف نمودارهای بازتاب برای سه نمونه متفاوت با شعاع داخلی متفاوت ۵ نانومتر (نمودار سیاه)، ۲۰ نانومتر (نمودار قرمز) و ۳۵ نانومتر (نمودار سبز) آمده است. مطابق شکل، در طیف بازتاب این نمونه‌ها بیشینه‌ها و کمینه‌های متوالی مشاهده می‌شود. با کاهش شعاع داخلی نانولوله‌ها (افزایش ضخامت جداره‌های نانولوله‌ها) تعداد کمینه‌ها و بیشینه‌ها افزایش می‌یابد. از طرفی یک رفتار نامنظم در یک ناحیه مشاهده می‌شود که به ترتیب در حدود طول موج‌های ۳۸۰، ۴۳۰ و ۵۶۰ نانومتر قرار دارد. چنین رفتاری اولا به علت تداخل‌های سازنده و مخرب، به دلیل تغییر فاز، بر اثر تغییر طول‌موج است. در حقیقت با کاهش شعاع داخلی نانولوله‌ها، به طور کلی ضریب شکست محیط افزایش می‌یابد. به گونه‌ای که با توجه به نظریه بروگمان ملاحظه می‌شود که با کاهش شعاع داخلی نانولوله‌ها از ۳۵ به ۵ نانومتر، ضریب شکست موثر از ۱/۲ به ۲/۴ افزایش می‌یابد. از سوی دیگر رفتار نامنظم یاد شده در بالا، به جذب نور بر اثر تشدید پلاسمون سطحی مربوط می‌شود. این امر در شکل (۴) ب، به خوبی نشان داده شده است. در این شکل نمودار ضریب جذب نمونه‌ها با استفاده از رابطه $\alpha = \frac{4\pi}{\lambda}\mathrm{Im}(\tilde{\varepsilon}_f)$ رسم شده‌است. ملاحظه می‌شود که با کاهش شعاع داخلی، طول‌موج تشدید پلاسمون سطحی به سمت قرمز جابه‌جا می‌شود و دامنه‌ی آن افزایش می‌یابد [۵].



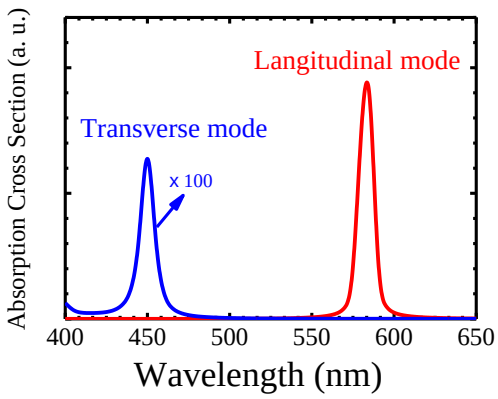
این مقاله درصورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-03]

شکل ۴: الف) نمودار طیف بازتابی و ب) طیف ضریب جذب لایه نازکی از نانولوله‌های تیتانیوم دی‌اکسید حاوی نقره. شعاع خارجی نانولوله‌ها ۴۰ نانومتر و شعاع داخلی آنها به ترتیب ۵ نانومتر (نمودار سیاه)، ۲۰ نانومتر (نمودار قرمز) و ۳۵ نانومتر (نمودار سبز) در نظر گرفته شده است. ضخامت لایه ۱ میکرون و کسر حجمی نقره ۰/۱ درصد لحاظ شده است.

سطح مقطع جذب

جهت بررسی اثرات ریخت شناسی و ریزساختار نمونه روی خواص نوری، سطح مقطع جذب چنین ساختاری با توجه به مدل ارائه شده در بخش قبل، به دست آمد. شکل (۵) طیف سطح مقطع جذب از ساختار چند نانولوله‌ای، در مدهای طولی و عرضی را نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که طیف مربوط به سطح مقطع جذب در مد طولی بسیار بزرگ‌تر از مد عرضی است. به علاوه مشاهده می‌شود که در مد طولی، جذب در ناحیه‌ی طول‌موج‌های بزرگتری رخ داده است. علت این رفتار به دلیل ایجاد دوقطبی‌های بزرگ‌تر در مد طولی نسبت به مد عرضی و همچنین اثرات چندقطبی می‌باشد [۱۱].



شکل ۵: طیف سطح مقطع جذب، در دو مد طولی (منحنی قرمز) و عرضی (منحنی سیاه)، ساختار هسته-پوسته‌ی استوانه‌ای $Ag@TiO_2$ برای مقایسه‌ی بهتر طیف مربوط به مد عرضی ۱۰۰ برابر شده است.

نتیجه‌گیری

در این مقاله خواص نوری لایه نازکی از نانولوله‌های تیتانیوم دی‌اکسید آلائیده به نقره، مورد توجه قرار گرفت. بدین منظور ابتدا مدلی بر اساس تداخل بس‌پرتویی ارائه شد. نشان داده‌شد، که خواص نوری چنین ساختاری ممکن است با کنترل ابعاد نانولوله‌های TiO_2 کنترل شود. به گونه‌ای که با افزایش ضخامت جداره نانولوله‌ها، طول‌موج تشدید پلاسمون سطحی به سمت قرمز جابه‌جا می‌شود. این نتایج به خصوص در طراحی سلول‌های خورشیدی می‌تواند اهمیت داشته باشد [۱۲]. همچنین اثرات ریخت شناسی به کمک بسته نرم‌افزاری کامسول به دست آمد.

مرجع‌ها

[1] O. Carp, C. L. Huisman, A. Reller, *Photoinduced reactivity of titanium dioxide*, Progress in solid state chemistry, Vol. 32, No. 1-2, pp: 33-177, 2004.

[2] L. Wang, *Titania Nanostructures for Optoelectronics Applications* (Ph.D. thesis), Northeastern University, 2015.

[3] P. M. Hosseinpour, *Structure–Magnetic Property Correlations in TiO_2 Nanotube Arrays*: (Ph.D. thesis), Northeastern University, 2014.

[4] G. K. Mor, O. K. Varghese, M. Paulose, K. Shankar, C. A. Grimes, *A review on highly ordered, vertically oriented TiO_2 nanotube arrays: Fabrication, material properties, and solar energy applications*, Solar Energy Materials and Solar Cells, Vol. 90, No. 14, pp: 2011-2075, 2006.

[5] C. Yu, *Optical properties of small metal clusters*, (Ph.D. thesis), ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE 2015.

[۶] ک، طاهریان، م، رشیدی، *نانولوله‌های تیتانیوم دی‌اکسید آلاییده شده با نقره: تهیه و بررسی ساختاری*، بیست و پنجمین نشست ماده چگال ایران، دانشگاه تحصیلات تکمیلی زنجان، ۱۳۹۸.

[7] M. Born, and E. Wolf. *Principle of Optics*, 7th Ed. Cambridge University Press. (1999).

[8] T. C. Choy, *Effective medium theory: principles and applications*, 2nd ed. Oxford University Press, 2015.

[9] P. B. Johnson, and R. W. Christy, *Optical constants of the noble metals*, Physical review B, Vol 6, 4370, 1972.

[10] T, Siefke, S, Kroker, K, Pfeiffer, O, Puffky, K, Dietrich, D, Franta, I, Ohlídal, A, Szeghalmi, E. B. Kley, and A, Tünnermann, *Materials pushing the application limits of wire grid polarizers further into the deep ultraviolet spectral range*, Advanced Optical Materials, Vol 4, 1780-1786, 2016.

[11] C. F. Bohren, D. R. Huffman, *Absorption and scattering of light by small particles*: John Wiley & Sons. 2008.

[12] C. A. Grimes, G. K. Mor, *Dye-Sensitized and Bulk-Heterojunctions Solar Cells: TiO_2 Nanotube Arrays as a Base Material*, in: *TiO_2 Nanotube Arrays*, pp: 217-283: Springer, 2009.

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

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-03]