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 گرما پلاسمونی نانوذرات طلا

رضا محمدی، عبدالرسول قرائتی، صادق بستام
دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور

چکیده – در این تحقیق خواص گرما پلاسمونی نانوذرات طلا با شکل‌های کروی، هسته – پوسته و میله‌ای شکل بررسی شده‌اند. به منظور بررسی این خواص، برهمکنش نور با نانوذرات طلا به روش المان محدود و در حالت سه بعدی شبیه‌سازی شده‌اند. ابتدا سطح مقطع جذب و خاموشی برای هر مورد محاسبه شده است. سپس با حل معادله‌ی گرما میزان افزایش دما به دلیل جذب نور در نانوذرات طلا محاسبه شده‌اند. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که نانومیله‌های طلا می‌توانند گزینه‌های مناسب‌تری برای استفاده در روش درمانی گرمانوری باشند.

کلید واژه- گرما پلاسمونی، گرمانوری، نانوذرات طلا

Investigation of thermoplasmonic properties of gold nanoparticles

Reza Mohammadi, Abdolrasoul Gharaati, Sadegh Bastam

Faculty of science, Department of physics, Payame Noor University

Abstract- In this current research, thermoplasmonic properties of gold nanoparticles with different shapes such as sphere, core-shell and rod are studied. Here, the interaction of light with gold nanoparticles are modeled using 3D finite element method simulations. First, absorption and extinction cross sections are calculated. Then, the corresponding temperature rise as a result of the absorption of light in gold nanoparticles is calculated by solving the thermal equation simultaneously. The results show that gold nanorods are more appropriate candidates for the potential optothermal applications.

Keywords: thermoplasmonics, optothermal, gold nanoparticle

[Downloaded from opsi.ir on 2026-01-31]

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

۱- مقدمه

در یک دهه‌ی اخیر، نانوذرات فلزی به دلیل خاصیت‌های جالب اپتیکی بسیار مورد توجه بوده‌اند. تشدید پلاسمون سطحی در این نانوذرات موجب افزایش پراکندگی و جذب نور در بسامد مربوط می‌باشد. مدت‌ها جذب نور و به دنبال آن گرمای تولید شده در نانوذره یک اثر جانبی در کاربردهای پلاسمونی به حساب می‌آمد. اخیراً، دانشمندان دریافته‌اند که خاصیت گرماپلاسمونی می‌تواند کابردهای فراوانی در درمان گرما نوری سرطان، نانوشاره‌ها و فونونیک داشته باشد [۱]. در درمان گرما نوری سرطان، پرتو لیزر فرودی موجب برانگیخته شدن تشدید پلاسمون سطحی نانوذره فلزی می‌شود که در نتیجه‌ی این فرآیند، انرژی جذب شده‌ی نور فرودی در نانوذره به گرما تبدیل می‌شود. گرمای تولید شده موجب نابودی بافت‌های تومور که در نزدیکی نانوذره قرار دارند، می‌شود بدون این که به بافت‌های سالم بدن آسیبی وارد شود. با توجه به سهولت اتصال لیگاندها به نانوذرات طلا برای هدف قرار دادن سلول‌های سرطانی، این نانوذرات برای به کارگیری در درمان گرما نوری مناسب‌تر به نظر می‌رسند [2] . در این مقاله خواص گرما پلاسمونی نانوذرات کروی، هسته – پوسته و نانومیله‌های طلا مورد مطالعه قرار می‌گیرند.

۲- تولید گرما در برهمکنش نور و نانوذره طلا

هنگامی که نانوذره‌ی طلا در معرض نور فرودی قرار می‌گیرد بخشی از نور پراکنده (فرآیند تابشی) و بخش دیگر جذب (فرآیند غیر تابشی) می‌شود. میزان اتلاف انرژی در فرآیند غیرتابشی عمدتاً به جنس و حجم نانوذره وابسته است و با سطح مقطع جذب (σ_{abs}) مشخص می‌شود. از طرف دیگر فرآیند تابشی که خصوصیات آن به حجم، شکل و خواص سطحی نانوذرات بستگی دارد با سطح مقطع پراکندگی (σ_{sca}) بیان می‌شود. مجموع فرآیندهای جذب و پراکندگی را که منجر به تضعیف نور می‌شود، سطح مقطع خاموشی (σ_{ext}) می‌نامند.

نانوذره‌ی طلا انرژی نور فرودی را جذب می‌کند و درون ذره گرما تولید می‌کند. گرمای تولید شده به محیط اطراف منتقل می‌شود و دمای نقاط نزدیک نانوذره را افزایش می‌دهد. تغییرات دما را می‌توان با معادله‌ی انتقال گرما (معادله ۱) به دست آورد [۳].

$$\rho(\vec{r})c(\vec{r})\frac{\partial T(\vec{r},t)}{\partial t} = \nabla k(\vec{r})\nabla T(\vec{r},t) + Q(\vec{r},t) \quad (۱)$$

که در آن $T(\vec{r},t)$ دما، $\rho(\vec{r})$ چگالی جرمی، $c(\vec{r})$ گرمای ویژه و $k(\vec{r})$ رسانندگی گرمایی می‌باشد. چشمه گرما، $Q(\vec{r},t)$، همان اتلاف انرژی در نانوذره‌ی طلا می‌باشد که به سطح مقطع جذب مرتبط است.

۳- شبیه‌سازی

برای محاسبه گرمای تولید شده در نانوذره‌های طلا از نرم‌افزار کامسول (COMSOL) که بر اساس روش عددی المان محدود (FEM) کار می‌کند، استفاده کرده‌ایم. همه‌ی شبیه‌سازی‌ها به صورت سه بعدی انجام شده است. ابتدا سطح مقطع جذب و پراکندگی با استفاده از بخش اپتیکی نرم‌افزار محاسبه شده‌اند، سپس با به کارگیری بخش گرما، تغییرات دمای نانوذره و محیط اطراف آن با کمک داده‌های بخش اپتیکی و معادله (۲) محاسبه شده است. در همه‌ی موارد، نانوذره‌های طلا در محیط آب با ضریب شکست ۱٫۳۳ قرار دارند و تحت تابش موج تختی با قطبش خطی قرار دارند. شدت نور فرودی ۱ $mW/\mu m^2$ در نظر گرفته شده است. ثابت دی‌الکتریک طلا وابسته به اندازه ذره می‌باشد و از رابطه‌ی (۲) برای بسامدهای مختلف به دست می‌آید [۴].

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{bulk}(\omega) + \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\Gamma_\infty\omega} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\Gamma(t)\omega} \quad (۲)$$

که در آن ε_{bulk} تابع دی‌الکتریک توده طلا است که از داده‌های تجربی جانسون و کریستی استفاده شده است. ω بسامد زاویه‌ای نور فرودی، $\Gamma(t)$ $(\Gamma_\infty + v_F/t)$ ثابت میرایی و تابعی از اندازه نانوذره می‌باشد. Γ_∞ ثابت میرایی برای حالت توده طلا با مقدار Hz ۱۱×۱۰^۱۳ و v_F سرعت فرمی با مقدار m/s ۱٫۴×۱۰^۶ است. بسامد پلاسمون طلا(ω_p) نیز Hz ۲π×۲٫۱۹۵×۱۰^۱۵ در نظر گرفته شده است. در معادله‌ی گرما نیز رسانندگی گرمایی طلا وابسته به اندازه نانوذره است که با رابطه (۳) توصیف می‌شود [۴].

$$k(t) = k_{bulk}/(1 + 3L/8t + 7\alpha/5) \quad (۳)$$

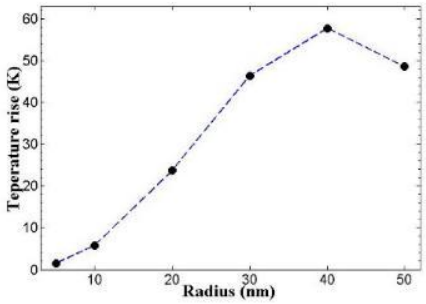
که k_{bulk} رسانندگی طلا در حالت توده و برابر با ۳۱۸ $W/(m\,K)$ و L پویش آزاد میانگین الکترون در حالت توده طلا با مقدار nm ۴۲ است.= α

[Downloaded from opsi.ir on 2026-01-31]

$(L/D)(R/1-R)$ که D متوسط اندازه و R ضریب بازتاب از مرز است که برابر با ۰/۱۷ می‌باشد. نسبت D/t مقدار ۰/۲ فرض شده است.

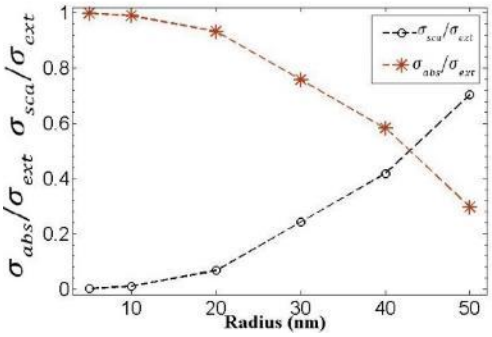
۳-۱- نانوکره‌های طلا

ابتدا محاسبات برای نانوکره‌های طلا با شعاع‌های مختلف ۵، ۱۰، ۲۰، ۳۰، ۴۰ و ۵۰ نانومتر انجام شده است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش اندازه‌ی نانوذره، سطح مقطع خاموشی افزایش می‌یابد و طول موج بیشینه نیز کمی به سمت طول موج‌های بلندتر جابه‌جا می‌شود. مقدار بیشینه‌ی افزایش دما در نانوکره‌ها و در بسامد پلاسمون سطحی در شکل ۱) ترسیم شده است.



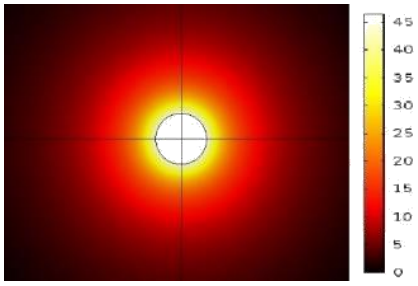
شکل ۱: بیشینه‌ی افزایش دما برای نانوکره‌های طلا.

با توجه به نمودار، مشاهده می‌شود که با افزایش اندازه نانوکره، دمای تولید شده نیز افزایش می‌یابد که در مورد نانوذره ۸۰ نانومتری (کره‌ای به شعاع ۴۰ nm) بیشترین افزایش دما (۵۸ K) مشاهده می‌شود. هنگامی که اندازه نانوذره به ۱۰۰ nm می‌رسد علی‌رغم افزایش ضریب خاموشی میزان افزایش دما کاهش می‌یابد. به منظور یافتن دلیل این امر نسبت میزان جذب به خاموشی را برای نانوکره‌های مختلف در بسامد پلاسمون محاسبه شده است که در شکل ۲) نتایج مشاهده می‌شود.



شکل ۲: تغییرات نسبت جذب به خاموشی ($\sigma_{abs}/\sigma_{ext}$) (*--) و پراکندگی به خاموشی ($\sigma_{sca}/\sigma_{ext}$) (o--) برای نانوکره‌های طلا با شعاع‌های مختلف.

شکل ۲ نشان می‌دهد که با افزایش اندازه‌ی نانوکره‌ها میزان جذب نور به کل انرژی نور فرودی کاهش می‌یابد به طوری که در نانوکره‌ی ۱۰۰ نانومتری میزان پراکندگی بر جذب غلبه می‌کند. به نظر می‌رسد که افزایش اندازه نانوذره اگر چه باعث اتلاف بیشتر نور فرودی می‌شود اما از حدی بالاتر این اتلاف به شکل پراکندگی غالب خواهد بود و در نتیجه نمی‌تواند در تولید گرما مؤثر باشد.

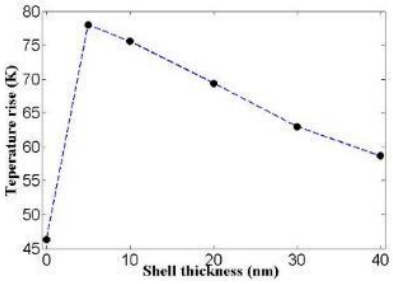


شکل ۳: بیشینه‌ی افزایش دما برای نانوذره‌ی کروی به شعاع ۳۰ نانومتر در طول موج پلاسمون ۵۲۶ nm.

نمودار توزیع گرما (شکل ۳) نشان می‌دهد که دما به طور یکنواخت در سراسر نانوذره توزیع شده است که این یکنواختی به دلیل رسانندگی گرمایی بالای طلا می‌باشد.

۳-۲- نانوذرات کروی هسته – پوسته

در این قسمت ساختار هسته – پوسته از جنس طلا و سیلیکا را انتخاب کردیم. هسته نانوکره‌ای با شعاع ۳۰ nm است و ضخامت لایه سیلیکا ۵، ۱۰، ۲۰، ۳۰ و ۴۰ نانومتر در نظر گرفته شده است. نتایج نشان می‌دهد که افزایش ضخامت پوسته‌ی سیلیکا باعث افزایش ضریب خاموشی و تا حدودی جابه‌جایی طول موج پلاسمون نانوذره می‌شود.

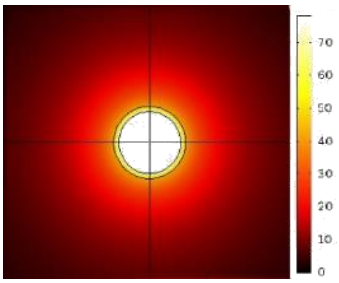


شکل ۴: بیشینه‌ی افزایش دما برای نانوذرات کروی هسته – پوسته طلا با ضخامت‌های مختلف پوسته سیلیکا.

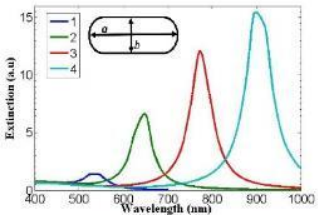
با توجه به نمودار شکل ۴، پوسته سیلیکا باعث افزایش قابل توجه دما در نانوذره‌ی طلا می‌شود اما با افزایش

[Downloaded from opsi.ir on 2026-01-31]

بیشتر ضخامت این لایه، شاهد کاهش اثرات آن هستیم. نمودار توزیع گرما (شکل ۵) نشان می‌دهد که دما به طور یکنواخت در سراسر هسته‌ی فلزی و همچنین پوسته‌ی سیلیکا توزیع شده است. اما دمای پوسته نسبت به هسته کاهش عمده‌ای دارد که به دلیل رسانندگی گرمایی کمتر آن می‌باشد. در واقع لایه سیلیکا به دلیل رسانندگی گرمایی کم، مانع انتقال گرما از فلز به محیط آبی اطراف می‌شود و در نتیجه دمای نانوذره افزایش بیشتری می‌یابد. افزایش ضخامت پوسته‌ی سیلیکا باعث افزایش رسانندگی گرمایی آن می‌شود که در نتیجه افت افزایش دمای نانوذره را در پی دارد [۴].

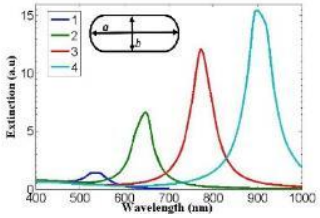


شکل ۵: بیشینه‌ی افزایش دما برای نانوذره‌ی هسته - پوسته به شعاع ۳۰ nm و ضخامت ۵ nm سیلیکا در طول موج پلاسمون ۵۴۲ nm.



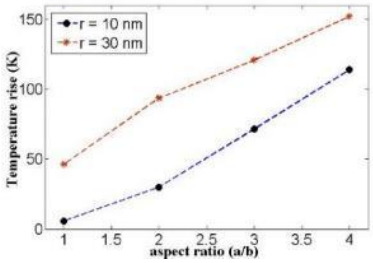
نانومیله‌های طلا

شکل ۶ ترسیم شده است.



شکل ۶: : سطح مقطع خاموشی برای نانومیله‌طلا با شعاع مؤثر ۳۰ nm و نسبت ابعاد (*a/b*) مختلف.

نمودار مربوط نشان می‌دهد که با تغییر نسبت ابعاد نانومیله، طول موج پلاسمون به طور چشم‌گیری جابه‌جا می‌شود. این امر قابلیت تنظیم بسامد پلاسمون را برای قرارگیری در ناحیه *NIR* فراهم می‌کند. جذب نور توسط بافت‌های بدن در این ناحیه از طیف کمتر است و در نتیجه نانومیله‌ها گزینه‌های مناسب‌تری برای درمان گرما نوری می‌توانند می‌باشند.



شکل ۷: بیشینه‌ی افزایش دما برای نانومیله‌های طلا با شعاع‌های مؤثر ۱۰ و ۳۰ نانومتر و نسبت ابعاد متفاوت.

تغییرات دما در نانومیله‌های طلا با دو شعاع مؤثر و نسبت ابعاد متفاوت در شکل ۷ ترسیم شده است. با افزایش نسبت طول (*a*) به شعاع نانومیله (b) دما افزایش می‌یابد.

۴- نتیجه‌گیری

محاسبات انجام شده نشان می‌دهد که نانوذرات طلا در بسامد پلاسمون به دلیل جذب نور باعث افزایش دمای محیط اطراف نانوذره می‌شوند. همچنین نشان داده شد که افزودن لایه‌ای نازک از جنس سیلیکا اطراف نانوکره-های طلا دمای نانوذره افزایش می‌یابد. محاسبات مربوط به نانومیله‌های طلا نشان می‌دهند که به دلیل قابلیت جابه‌جایی بسامد پلاسمون سطحی به سمت طول‌موج‌های بلندتر و همچنین افزایش بیشتر دما، این نانوساختارها گزینه‌های مناسب‌تری برای کاربردهای پزشکی نظیر روش درمانی گرمانوری می‌باشند.

مراجع

[1] Baffou, G., R. Quidant, and C. Girard, *Heat generation in plasmonic nanostructures: Influence of morphology*. Applied Physics Letters, 2009. **94**(15): p.- .

[2] Wang, S., H. Xu, and J. Ye, *Plasmonic rod-in-shell nanoparticles for photothermal therapy*. Physical Chemistry Chemical Physics, 2014. **16**(24): p. 12275-12281.

[3] Ba, H., *Plasmonic Heating of Gold Nanoparticles in an Optical Trap and on the Cell Membrane*, in Physics. 2012, Ludwig-Maximilians Universität: Munich.

[4] Li, Q., et al., *Photothermal Enhancement in Core-Shell Structured Plasmonic Nanoparticles*. Plasmonics, 2014. **9**(3): p. 623-630.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-01-31]