

شبیه سازی و تحلیل نتایج تجربی تاثیر اندازه نانو ذرات طلا و نقره بر میزان جذب

محمدجواد آزر^۱، *، علیرضا کشاورز^۱

^۱ دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شیراز، شیراز، ایران

چکیده: با توجه به کاربرد وسیع نانو ذرات فلزی در صنعت، تولید بهینه نانو ذرات اهمیت بسزایی پیدا می کند در این راستا ابتدا با استفاده از نظریه مای سطح مقطع جذب برای نانو ذرات طلا و نقره در بازه طول موجی مشخص محاسبه شد برای این منظور به کمک نرم افزار کامسول برای شعاع های مشخص از نانو ذرات محلول در آب میزان جذب بررسی شد تا تغییرات جذب متناسب با اندازه ی ذرات مشخص گردد سپس نانو ذرات فلزی در شرایط آزمایشگاهی تولید و میزان جذب آنها توسط طیف سنج در بازه طول موجی مرئی اندازه گیری شد و در ادامه نتایج حاصل شبیه سازی با مقادیر تجربی بدست آمده در آزمایشگاه مقایسه شدند. این مقایسه بیان می کند که برای نانو ذرات فلزی طلا و نقره با شعاع بزرگتر طول موج بیشینه جذبی بزرگتری خواهیم داشت که این بیشینه جذب برای نانو ذرات طلا مقداری نزدیک به طول موج ۵۳۰ نانومتر و برای نقره ۴۰۰ نانومتر به خود اختصاص می دهد. پس می توان به صراحت بیان کرد که میزان جذب در نانو ذرات فلزی طلا و نقره تابع مستقیمی از اندازه ذرات است.

کلید واژگان: نانو ذرات فلزی طلا و نقره؛ نظریه مای؛ سطح مقطع جذب؛ خواص پلاسمونیک.

Simulation and characterization of experimental result on size effect in absorption for gold and silver nanoparticles

Mohamadjavad Azarm, Alireza Keshavarz

Dept. of Photonics, Faculty of Physics, Shiraz University of Technology, Shiraz, Iran

Abstract- Considering the wide application of metal nanoparticles in industry, the optimum synthesis is going to be significant. in this way with help of Mie theory the cross-section of adsorption was calculated for gold and silver nanoparticles in the specified wavelength range, for this purpose, the absorption rate was investigated with the help of COMSOL for specific radii of water-soluble nanoparticles. then Metal nanoparticles were produced and their adsorption was measured by a spectrometer in the visible wavelength range so the simulation results were compared with the experimental values obtained in the laboratory. It shows that larger radius will have larger absorption wavelength for silver about 400nm and for gold is about 530nm. Therefore, it can be cleared that the adsorption rate of gold and silver metal nanoparticles is a direct function of the particle size.

Keywords: gold and silver nanoparticles, Mie theory, absorption cross section, plasmonic properties

* m.azarm@sutech.ac.ir

مقدمه

با در نظر داشتن کاربرد وسیع نانو ذرات فلزی طلا و نقره در ادوات الکترونیک نوری، خواص نوری آن‌ها مورد توجه قرار گرفته‌است. در این میان تشدید الکترومغناطیسی به عنوان یکی از مهمترین خواص نوری نانوذرات فلزی در نظر گرفته می‌شود که مطابق با میزان جذب و پراکندگی موج الکترومغناطیسی از ذرات متغیر خواهد بود [۱]. برای بررسی این خاصیت نظریه‌های گوناگونی ارائه و بررسی شدند منجمله مدل نیمه کلاسیکی (RPA^۱) که اغلب برای شعاع‌های محدودی کاربرد دارند اما در این میان نظریه مای به دلیل پاسخ‌گویی مناسب و نزدیک به مقادیر تجربی برای ذرات با اندازه‌های بزرگتر مورد استفاده قرار می‌گیرد [۲].

مبانی نظری

خواص پلاسمونیک مواد حاصل برهمکنش مواد با موج الکترومغناطیسی است که برای بررسی آن‌ها کنش‌های نور با ماده بررسی می‌شود. این نکته قابل اهمیت است که برای طلا و نقره تشدید پلاسمون سطحی در ناحیه مرئی روی خواهد داد [۲]. در شرایط شبه ایستا برای ذره کروی موجود در محیط دی‌الکتریک از حل معادله لاپلاس در فضای کروی بهره می‌گیریم. با حل معادله لاپلاس مقدار زیر را برای پتانسیل خواهیم داشت که شامل چند جمله‌ای‌های لژاندر با ضرایب A_l و B_l می‌باشد.

$$\varphi(r, t) = \sum_{l=0}^{\infty} [A_l r^l + B_l r^{-(l+1)}] p_l(\cos\theta) \quad (۱)$$

برای کره‌ی فلزی با ضریب دی‌الکتریک (ϵ) متناسب با طول موج، درون محیط دی‌الکتریک (ϵ_m) و در نظر گرفتن شرایط مرزی مسئله، میدان برای دو ناحیه درون و خارج ذره تعیین می‌گردد که با محاسبه‌ی میدان مغناطیسی و جایگذاری در بردار پوینتینگ ضرایب جذب و پراکندگی را بدست خواهند آمد. مای در سال ۱۹۰۸ نیز به طور مشابه با بررسی امواج تخت مسئله پراکندگی نور را برای کره‌های فلزی مقادیر زیر را برای سطح مقطع جذب (۵) و پراکندگی (۴) تعریف کرد که در شبیه‌سازی‌ها از آنها بهره برده می‌شود [۲].

$$C_{sca} = \frac{4}{\sqrt{\epsilon_0/\epsilon_0^2 \mu_0}} \int S \cdot \hat{n} d\Omega \quad (۲)$$

$$C_{abs} = \frac{4}{\sqrt{\epsilon_0/\epsilon_0^2 \mu_0}} \int U_V dV \quad (۳)$$

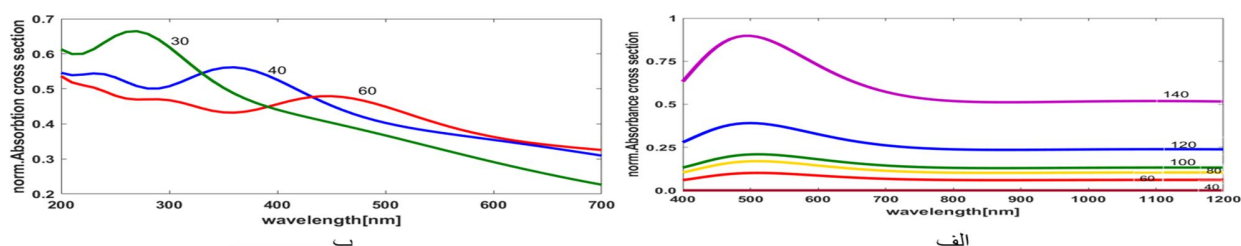
در روابط فوق Ω زاویه فضایی و U_V میزان تلفات گرمای مهمی ذره است. انتگرال‌گیری برای مقدار جذبی روی حجم نانو ذره انجام می‌شود.

شبیه سازی و محاسبات

در شبیه سازی مقدار ضریب دی‌الکتریک نانوذره فلزی متناسب با طول موج تغییر می‌کند که مقادیر آن مطابق نتایج جانسون و کریستی (۱۹۷۲) تعیین شده‌اند [۳]. برای تعیین هندسه ساختار از یک لایه (PML)^۲ با تقارن کروی بهره گرفته شد تا میدان در این لایه جذب شود. علاوه بر محاسبات معمول برای بررسی تغییرات جذب متناسب با اندازه ذرات، شعاع ذرات تعریف شده در محیط آب نیز به عنوان پارامتر متغیر انتخاب شد. در شکل ۱ برای اندازه ذرات معلوم از نانوذرات کروی طلا و نقره در محیط آب مقدار جذب رسم شد که مقدار بیشینه جذب برای ذرات طلا در حدود ۵۳۰ نانومتر اتفاق افتاد. با متغیر دانستن اندازه‌ی ذرات هدف بدست آوردن میزان جذب در بازه‌ی طول موجی معلوم بود که در این راستا شاهد افزایش میزان جذب برای اندازه‌های بزرگتر بودیم در حالی که میزان جابه‌جایی به قرمز برای تغییرات اندازه‌های ذرات طلا ۲۰ نانومتر در طیف بدست آمد. برای نقره جابه‌جایی به قرمز برای اندازه ذرات بزرگتر به طور واضح‌تری نسبت به ذرات طلا قابل مشاهده است.

¹ Random Phase Approximation

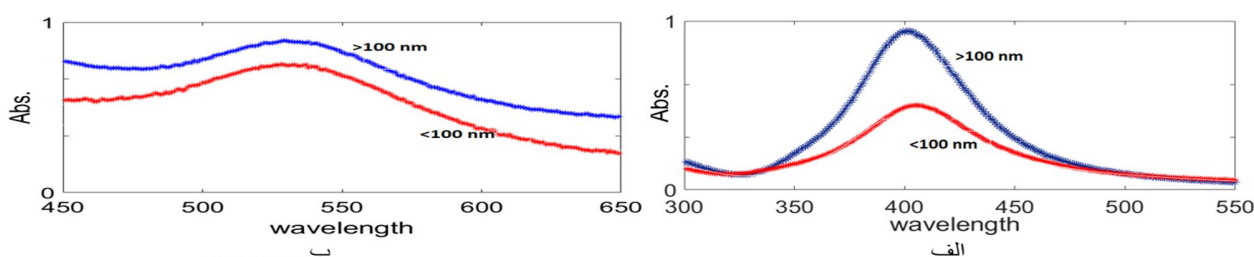
² Perfectly matched layer



شکل ۱- میزان بهنجار شده ضریب جذب نانوذرات کروی (الف) طلا و (ب) نقره در آب

نتایج تجربی

ساده ترین و کم هزینه ترین روش سنتز نانو ذرات فلزی کاهش شیمیایی است. در این مسیر از تری سدیم سیترات برای طلا و از سدیم بور هیدرات برای سنتز نانو ذرات نقره استفاده شد. برای بررسی طیف جذبی حاصل از نانو ذرات سنتز شده از ذرات طیف سنجی ماوراءبنفش - مرئی گرفته شد. در شکل ۲ میزان جذب نانوذرات طلا و نقره را مشاهده خواهید کرد. در مراحل سنتز از حجم های مختلف تری سدیم سیترات برای بدست آوردن اندازه ی ذرات متفاوت، استفاده شد. بدین صورت برای مشاهده ذرات فلزی کوچک تر از حجم بیشتری تری سدیم سیترات



استفاده شد.

شکل ۲- میزان جذب حاصل نانو ذرات برای میانگین اندازه ذرات کوچکتر از ۱۰۰ نانومتر و بزرگتر از ۱۰۰ نانومتر (الف) نقره با بیشینه در حدود ۴۰۰ نانومتر و (ب) طلا با بیشینه حدود ۵۳۰ نانومتر

نتیجه گیری

برای بررسی تاثیر اندازه نانو ذرات فلزی در میزان جذب آن ها دو فرایند به صورت تجربی و نظری انجام شد و مقادیر بهنجار شده ضریب جذب نانو ذرات کروی متناسب با طول موج رسم شد. با توجه به مقادیر شبیه سازی شده با نرم افزار کامسول و مقایسه با مقادیر تجربی حاصل، می توان میزان جابه جایی به قرمز نمودار جذبی برای نانو ذرات طلا و نقره را در نظر گرفت و محل تشدید پلاسمون های سطحی جایگزیده را در نانوذرات فلزی در محیط دی الکتریک را به ترتیب برای طلا ۵۳۰ و نقره ۴۰۰ نانومتر دانست. لذا میزان جذب نانو ذرات کروی طلا و نقره متناسب با اندازه ی آن ها تغییر می کند به طوری که برای ذرات با اندازه بزرگتر میزان جذب بیشتر و متمایل به طول موج های بزرگتر خواهیم داشت. لذا پیشنهاد می شود برای استفاده از خواص جذبی ذرات فلزی طلا و نقره این ذرات در ابعاد بزرگتر سنتز شوند.

مراجع ها

1. Kluczyk, K., and W. Jacak. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 168 (2016): 78-88.
2. Jacak, J., J. Krasnyj, W. Jacak, R. Gonczarek, A. Chepok, and L. Jacak. *Physical Review B* 82, no. 3 (2010): 035418
3. Maier, Stefan Alexander. *Plasmonics: fundamentals and applications*. Springer Science & Business Media, 2007.
4. Johnson, Peter B., and R-WJPB Christy. *Physical review B* 6, no. 12 (1972): 4370.