همایش نانوفوتونیک ایران ۱۳۹۹- ۱ و ۲ آبان
Iranian Nano-Photonic Conference 2020
October 23 and 24

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

محمدجواد آزرم[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 می‌کند در این راستا ابتدا با استفاده از نظریه مای سطح مقطع جذب برای نانو ذرات طلا و نقره در بازه‌ی طول موجی مشخص محاسبه شد برای این منظور به کمک نرم‌افزار کامسول برای شعاع‌های مشخص از نانو ذرات محلول در آب میزان جذب بررسی شد تا تغییرات جذب متناسب با اندازه‌ی ذرات مشخص گردد سپس نانو ذرات فلزی در شرایط آزمایشگاهی تولید و میزان جذب آن‌ها توسط طیف سنج در بازه‌ی طول موجی مرئی اندازه‌گیری شد و در ادامه نتایج حاصل شبیه سازی با مقادیر تجربی بدست آمده در آزمایشگاه مقایسه شدند. این مقایسه بیان می‌کند 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 می‌دهد. پس می‌توان 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 پلاسمونیکی.

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

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

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-08-22]

مقدمه

با در نظر داشتن کاربرد وسیع نانو ذرات فلزی طلا و نقره درادوات 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[1]) که اغلب برای شعاع‌های محدودی کاربرد دارند اما در این میان نظریه مائ به دلیل پاسخ‌گویی مناسب و نزدیک به مقادیر تجربی برای ذرات با اندازه‌های بزرگتر مورد استفاده قرار می‌گیرد[۲].

مبانی نظری

خواص پلاسمونیکی 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 جمله‌ای های لژاندربا ضرایب A_l و B_l می‌باشد.

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

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

$$C_{sca} = \frac{4}{\sqrt{\varepsilon_0/{E_0}^2\mu_0}}\int S.\hat{n}\, d\Omega \qquad (۲)$$

$$C_{abs} = \frac{4}{\sqrt{\varepsilon_0/{E_0}^2\mu_0}}\int U_V dV \qquad (۳)$$

در روابط فوق Ωزاویه فضایی و U_V میزان تلفات گرمای اهمی ذره است. انتگرال‌گیری برای مقدار جذبی روی حجم نانو ذره انجام می شود.

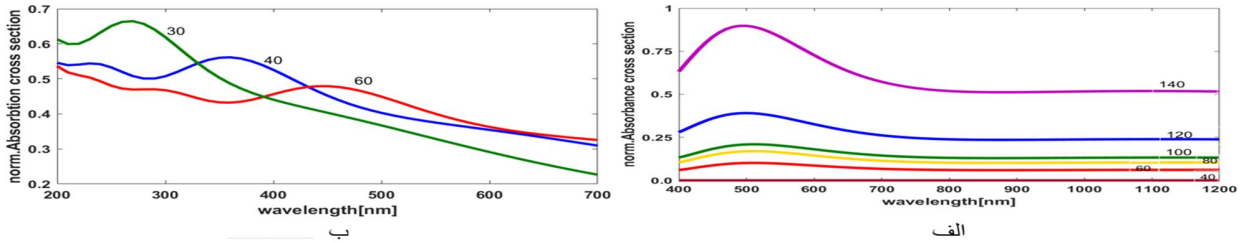
شبیه سازی و محاسبات

در شبیه سازی مقدار ضریب دی‌الکتریک نانوذره فلزی متناسب با طول موج تغییر می‌کند کـه مقـادیر آن مطـابق نتـایج جانسـون‌وکریسـتی (۱۹۷۲) تعیین شده‌اند[۳]. برای تعیین هندسه ساختار از یک لایه (PML)[2] با تقارن کروی بهره‌گرفته‌شد تا میدان در این لایـه جـذب‌شـود. علاوه بر محاسبات معمول برای بررسی تغییرات جذب متناسب با اندازه ذرات، شعاع ذرات تعریف شده در محیط آب نیـز بـه عنـوان پـارامتر متغیر انتخاب‌شد. در شکل۱ برای اندازه ذرات معلوم از نانوذرات کروی طلا و نقره در محیط آب مقدار جـذب رسـم شـد کـه مقـدار بیشـینه جذب برای ذرات طلا درحدود ۵۳۰ نـانومتر اتفـاق افتـاد. بـا متغیـر دانسـتن انـدازه‌ی ذرات هـدف بدسـت آوردن میـزان جـذب در بـازه‌ی طول‌موجی معلوم بود که در این راستا شاهد افزایش میزان جذب برای اندازه‌ذرات بزرگتر بودیم درحالی که میزان جابه‌جایی بـه قرمـز بـرای تغییرات اندازه‌ذرات طلا ۲۰نانومتر در طیف بدست‌آمد. برای نقره جابه‌جایی به قرمز برای اندازه ذرات بزرگتر بـه طـور واضـح‌تـری نسـبت بـه ذرات طلا قابل مشاهده است.

[1] Random Phase Approximation
[2] Perfectly matched layer

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

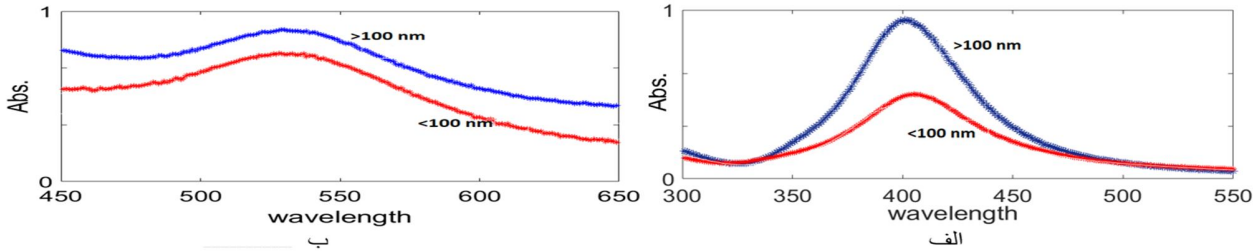
[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-08-22]



شکل۱- میزان بهنجارشده 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 تری‌سدیم سیترات برای طلا و از سدیم بور هیدرات برای سنتز نانو ذرات نقره استفاده شد. برای برسی طیف جذبی حاصل از نانو ذرات سنتز شده از ذرات طیف سنجی ماوراءبنفش-مرئی گرفته شد.در شکل۲ میزان جذب نانوذرات طلا و نقره را مشاهده خواهید کرد. در مراحل سنتز از حجم‌های مختلف تری‌سدیم‌سیترات برای بدست‌آوردن اندازه‌ی ذرات متفاوت، استفاده شد. بدین صورت برای مشاهده ذرات فلزی کوچک‌تر از حجم بیشتری تری‌سدیم‌سیترات



استفاده شد.

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

نتیجه گیری

برای بررسی تاثیر اندازه نانو ذرات فلزی در میزان جذب آن‌ها 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، می‌توان میزان جابه‌جایی 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 دی‌الکتریک را به ترتیب برای طلا ۵۳۰ و برای نقره ۴۰۰ نانومتر دانست. لذا میزان جذب نانو ذرات کروی طلا و نقره متناسب با اندازه‌ی آن‌ها تغییر می‌کند به طوری که برای ذرات با اندازه بزرگتر میزان جذب بیشتر و متمایل به طول موج های بزرگتر خواهیم داشت. لذا پیشنهاد می‌شود برای استفاده از خواص جذبی ذرات فلزی طلا و نقره این ذرات در ابعاد بزرگتر سنتز شوند.

مرجع‌ها

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-WJPrB Christy. *Physical review B* 6, no. 12 (1972): 4370.

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

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-08-22]