بیست و هشتمین کنفرانس اپتیک و
فوتونیک ایران و چهاردهمین کنفرانس
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،
دانشگاه شهید چمران اهواز،
خوزستان، ایران.
۱۲-۱۴ بهمن ۱۴۰۰

بررسی تحلیلی خواص اپتیکی جفت نانوذره فلزی در تقریب دوقطبی

مهدی سیمیاری[۱] ، ناصر سپهری جوان[۲*] و آصف خیراندیش[۲]

[۱]دانشگاه امام علی (ع)، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک

ایمیل: Mahdi.Simiari@gmail.com

[۲,*]دانشگاه محقق اردبیلی، دانشکده علوم، گروه فیزیک، ایمیل:

ایمیل: Asef.kheirandish@gmail.com و sepehri_javan@uma.ac.ir

چکیده – در این مطالعه، با ا ستفاد از مدل تعمیم یافته دورود و در تقریب دوقطبی، به برر سی تحلیلی خواص اپتیکی جفت نانوذره کروی طلا در اندرکنش با یک باریکه لیزر با قطبش موازی نســبت به ســمت‌گیری جفت نانوذره پرداخته‌ایم. تاثیر اندرکنش بین نانوذرات بر بازده خاموشی بررسی شده و نشان داده شده است که اندرکنش بین نانوذرات سبب افزایش بازده خاموشی و انتقال به قرمز در ناحیه طول موجی تشدید پلا سمون می شود. گذردهی الکتریکی مختلط برای جفت نانوذره طلا برای فوا صل جدایی مختلف ر سم شده ا ست. همچنین، ملاحظه شده ا ست که در مقایسه با یک نانو ذره تنها، اندرکنش بین نانوذرات سبب کاهش در مقدار قدرمطلق ق سمت حقیقی و نیز ق سمت موهومی گذردهی می شود. در نهایت ن شان داده شده ا ست که برای جابه‌جایی طول موج تشدید پلاسمون، یک رابطه درجه سوم و یا نمایی بر حسب شعاع و فاصله جدایی می‌توان برازش کرد.

کلید واژه- انتقال به قرمز، اندرکنش دوقطبی-دوقطبی، پلاسمون ، لیزر، نانوذرات طلا، دوتایی

Analytical Study of Optical Properties of Metallic Nanoparticle Dimer in The Dipole Approximation

Mahdi Simiari[۱], Nasser Sepehri Javan[۲*], and Asef Kheirandish[۲]

[۱]□□□□□□□□□□□□ □□ □□□□□□□□, □□□□□□□□ □□ □□□□□ □□□□□□□□, □□□□□□□□□□□□ □□ □□□□ □□□,

Email: Mahdi.Simiari@gmail.com

[۲*]□□□□□□□□□□□□ □□ □□□□□□□□, □□□□□□□□ □□ □□□□□ □□□□□□□□, □□□□□□□□□□□□ □□ □□□□□□□□□□, □□□□□□□□□,

Email: Sepehri_javan@uma.ac.ir and Asef.kheirandish@gmail.com

Abstract- In this study, using a modified Drude model, in the dipole approximation, we have analytically investigated the optical properties of spherical gold nanoparticle dimer in the interaction with a laser beam whose polarization is parallel to the orientation of the dimer. Effect of the nanoparticles interaction on the extinction efficiency is studied and it is shown that the interparticle interaction causes an increase in the extinction efficiency and the red-shift of the plasmon resonance wavelength area. Complex permittivity of the gold nanoparticle dimer is presented for different values of nanoparticles separation. Comparing with an individual nanoparticle, it is noticed that the interaction of nanoparticles leads to the decrease in the absolute value of the real part of the permittivity and decrease in its imaginary part as well. Finally, it is shown that a cubic or an exponential relation with respect to the radius separation of nanoparticles can be fitted for the displacement of plasmon resonance wavelength.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-27]

Keywords: red-shift, dipole-dipole interaction, plasmon, laser, gold nanoparticle, dimer.

مقدمه

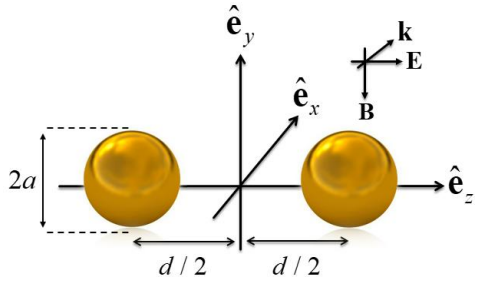
نانوذرات فلزی مخصوصا نانوذرات طلا و نقره به سبب رابطه غیرخطی پاسخ آن‌ها به میدان الکتریکی موج الکترومغناطیسی فرودی که در منطقه تشدید پلاسمونی اتفاق می‌افتد، دارای کاربردهای زیادی در حوزه‌های پژوهشی مانند اپتوالکتریک، الکترونیک، اپتیک خطی و غیر خطی هستند [۱-۲]. در این میان دینامیک غیرخطی نانوذرات در اندرکنش با میدان‌های قوی لیزر توجهات زیادی را به خود جلب کرده است [۳-۵]. در تمامی این حوزه‌ها، تعیین گذردهی الکتریکی مختلط وابسته به اندازه نانوذره دارای اهمیت اساسی می‌باشد. در این مقاله با استفاده از مدل درود تعمیم یافته ارائه شده توسط خیراندیش و همکاران [۶] برای نانوذرات منفرد طلا که در آن تاثیر محدودشدگی کلاسیکی در تطابق با داده‌های تجربی وارد شده است، به مطالعه تحلیلی اندرکنش میدان-های الکترومغناطیسی لیزر با جفت نانوذره طلا پرداخته‌ایم. در تقریب دوقطبی، با لحاظ کردن اندرکنش نانوذرات با یکدیگر، نحوه حرکت ابر الکترونی نانوذرات با استفاده از حل تحلیلی معادلات دیفرانسیل جفت شده حاصل شده است.

اندرکنش نانوذرات

در شکل (۱)، هندسی مسئله نشان داده شده است که در آن a شعاع و d فاصله بین نانوذرات است و میدان الکتریکی لیزر موازی با جهت‌گیری جفت نانوذره و به صورت موج تخت در نظر گرفته شده است:

$$\mathbf{E}_L = \frac{1}{2} E e^{i(kx-\omega t)} \hat{\mathbf{e}}_z + c.c., \qquad (۱)$$

که ω, k و E به ترتیب عدد موج ، فرکانس و دامنه میدان الکتریکی باریکه لیزر هستند. برای توصیف اندرکنش میدان‌های الکترومغناطیسی لیزر با نانوذرات، معادله حرکت برای ابرالکترونی را به صورت



شکل ۱: شکل هندسی مسئله

زیر می‌نویسیم

$$m_e \frac{d\mathbf{r}_j^2}{dt^2} + m_e \gamma \frac{d\mathbf{r}_j}{dt} + m_e \xi \omega_p^2 \mathbf{r}_j = -e\mathbf{E}_j,\ j = 1,2, \qquad (۲)$$

که $\omega_p = \sqrt{n_0 e^2 / m_e \varepsilon_0}$ فرکانس پلاسمایی نانوذره، n_0 چگالی الکترونهای هدایت، ε_0 گذردهی خلاء، $\mathbf{r}_j$ جابجایی ابر الکترونی از حالت تعادل، m_e جرم الکترون، γ فاکتور میرایی مربوط به پراکندگی الکترون [۵]، e بار الکترون، ξ تابعی از شعاع نانو ذره است که مقدار آن از مرجع [۵] منظور می‌شود و $\mathbf{E}_j$ جمع میدان الکتریکی لیزر و میدان الکتریکی ناشی از نانوذره همسایه است که برابر است با

$$E_{n\neq j} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{3\hat{\mathbf{e}}_n(\mathbf{p}_n.\hat{\mathbf{e}}_n) - \mathbf{p}_n}{d^3} - ik\frac{3\hat{\mathbf{e}}_n(\mathbf{p}_n.\hat{\mathbf{e}}_n) - \mathbf{p}_n}{d^2} + k^2\frac{\mathbf{p}_n - \hat{\mathbf{e}}_n(\mathbf{p}_n.\hat{\mathbf{e}}_n)}{d}\right], \qquad (۳)$$

که $\hat{\mathbf{e}}_n$ بردار یکه‌ای است که سمت‌گیری آن از مرکز نانوذره nام به سمت مرکز نانوذره j ام است. با استفاده از رابطه (۱) و (۳) معادله حرکت برای ابرالکترونی نانوذره اول به صورت زیر در می آید

$$\frac{d^2 z_1}{dt^2} + \gamma\frac{dz_1}{dt} + \xi\omega_p^2 z_1 = \frac{-eE}{2m_e}(e^{i(kx-\omega t)} + c.c.) + \frac{Ze^2}{2\pi\varepsilon_0 m_e}\left(\frac{1}{d^3} - \frac{ik}{d^2}\right)z_2, \qquad (۴)$$

که $Z = n_0 V$، V حجم نانوذره است و برای داشتن معادله حرکت ابر الکترونی ذره دوم کافیست در معادله بالا اندیسهای ۱ و ۲ جابجا شوند. با قرار دادن جواب‌هایی به

[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-27]

فرم $z_{1,2}=(1/2)\tilde{z}_{1,2}\exp[i(kx-\omega t)]+c.c.$ در معادلات حرکت، دامنه جابه‌جایی به صورت زیر حاصل می‌شود:

$$\tilde{z}_1=\tilde{z}_2=\frac{1}{1-\alpha}z_0 \qquad (۵)$$

$$z_0=\frac{eE}{m_e(\omega^2+i\omega\gamma-\xi\omega_p^2)}, \qquad (۶)$$

$$\alpha=\frac{-Ze^2}{2\pi\varepsilon_0 m_e(\omega^2+i\omega\gamma-\xi\omega_p^2)}\left(\frac{1}{d^3}-\frac{ik}{d^2}\right), \qquad (۷)$$

با تعریف قطبش به صورت $\mathbf{P}=\varepsilon_0\chi\mathbf{E}_L$، می‌توان پذیرفتاری الکتریکی را بصورت زیر نوشته

$$\chi=\left(\frac{1}{1-\alpha}\right)\frac{-\omega_p^2}{\omega^2+i\omega\gamma-\xi\omega_p^2}, \qquad (۸)$$

و گذردهی هر نانوذره اندرکنشی به شکل زیر می‌شود:

$$\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}=n^2=1+\chi=1-\frac{(1-\alpha)^{-1}\omega_p^2}{\omega^2+i\omega\gamma-\xi\omega_p^2}, \qquad (۹)$$

که n^2 ضریب شکست نانوذرات است. با توجه به مدل درود-لورنتس، برای در نظر گرفتن نقش الکترون‌های لایه ظرفیت، باید رابطه (۹) را به صورت زیر تصحیح کنیم

$$\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}=\varepsilon_\infty-\left(\frac{1}{1-\alpha}\right)\frac{\omega_p^2}{\omega^2+i\omega\gamma-\xi\omega_p^2}, \qquad (۱۰)$$

که ε_∞ از داده‌های تجربی محیط حجیم بدست می‌آید.

در ادامه به منظور بررسی اثر اندرکنش بین دونانوذره، محاسبات عددی انجام خواهیم داد. گذردهی الکتریکی در آزمایشگاه به صورت مستقیم اندازه‌گیری نمی‌شود و به جای آن سطح مقطع خاموشی نانوذره که به گذردهی الکتریکی نیز وابسته است مورد اندازه‌گیری قرار می‌گیرد. ما با قرار دادن گذردهی الکتریکی که در رابطه (۱۰) بدست آوردیم در رابطه مربوط به سطح مقطع خاموشی، می‌توانیم نتایج بدست آمده را با نتایج تجربی مورد مقایسه قرار دهیم. سطح مقطع خاموشی از رابطه زیر حاصل می‌شود [۷]:

$$C_{ext}=\frac{2\pi}{k^2}\sum_{n=1}^{\infty}(2n+1)\,\mathrm{Re}(a_n+b_n), \qquad (۱۱)$$

$$a_n=\frac{m\psi_n(mx)\psi_n'(x)-\psi_n(x)\psi_n'(mx)}{m\psi_n(mx)\xi_n'(x)-\xi_n(x)\psi_n'(mx)}, \qquad (۱۲)$$

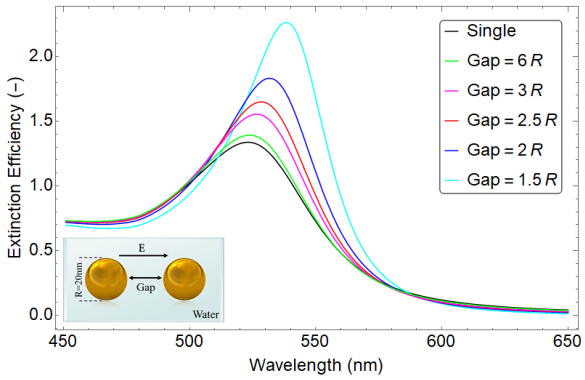
$$b_n=\frac{\psi_n(mx)\psi_n'(x)-m\psi_n(x)\psi_n'(mx)}{\psi_n(mx)\xi_n'(x)-m\xi_n(x)\psi_n'(mx)}. \qquad (۱۳)$$

که $x=2\pi Na/\lambda$ پارامتر اندازه، $m=N_1/N$ ضریب شکست نسبی، $N_1=\sqrt{\varepsilon}$ ضریب شکست ذره، $N=\sqrt{\varepsilon_m}$ ضریب شکست محیط و $\psi_n(x),\xi_n(x)$ توابع ریکاتی–بسل است.

بحث عددی

در محاسبات عددی، یک جفت نانوذره طلا با قطر $R=4nm$ نشانده درشیشه را در نظر می‌گیریم.

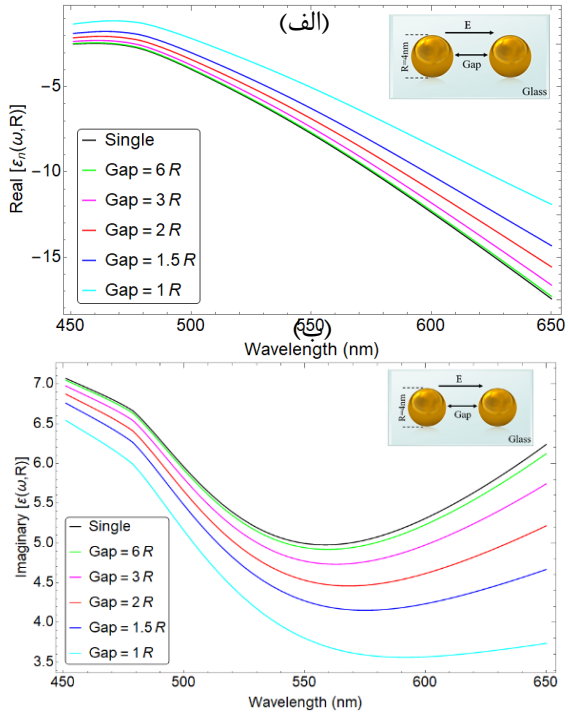
در شکل (۲) بازده خاموشی $(C_{ext}/\pi a^2)$ برای فواصل مختلف بین ذرات $(Gap=d-R)$ رسم شده است. برای مقایسه، بازده خاموشی نانوذره منفرد هم آورده شده‌است. مشاهده می‌شود که اندرکنش بین ذرات، علاوه بر افزایش بازده خاموشی در ناحیه تشدید پلاسمون، منجر به انتقال به قرمز هم می‌شود.



شکل ۲: طیف بازده خاموشی جفت نانوذره طلا با قطر ۴ نانومتر برای فواصل مختلف بین نانوذرات $Gap=d-R$

[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-27]

در شکل (۳) قسمت حقیقی و موهومی تغییرات گذردهی نسبت به طول موج برای فواصل مختلف بین نانوذرات رسم شده است. همچنین برای مقایسه، گذردهی نانوذره منفرد هم رسم شده است. مشاهده می‌کنیم، در مقایسه با نسبت حالت ذرات منزوی، اندرکنش بین نانوذرات سبب کاهش در مقدار موهومی و نیز قدرمطلق قسمت حقیقی شده است.



شکل ۳: تغییرات قسمت حقیقی و موهومی گذردهی نسبت به طول موج برای فواصل مختلف بین نانوذرات

در شکل (۴) نمودار جابه‌جایی طول موج تشدید پلاسمون نسبت به a/d آورده شده است و ملاحظه می‌شود که خیلی خوب توسط دو تابع مختلف زیر قابل برازش است:

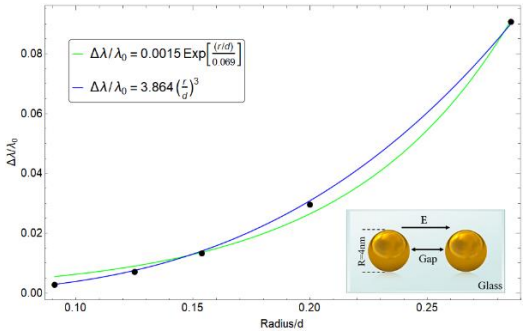
$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} = 0.0015\,\exp\left(\frac{a/d}{0.069}\right), \qquad (۱۴)$$

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} = 3.864\left(\frac{a}{d}\right)^3, \qquad (۱۵)$$

که $\Delta\lambda = \lambda_{max} - \lambda_0$ است، λ_0 طول موج تشدید پلاسمونی نانوذره منفرد و λ_{max} طول موج تشدید پلاسمونی جفت نانوذره طلای اندرکنشی است.

نتیجه‌گیری

در تقریب دوقطبی و با یک مدل تعمیم یافته درود، بصورت تحلیلی، تاثیر اندرکنش بین جفت نانوذره طلا بر خواص اپتیکی آن مورد مطالعه قرار گرفت. نشان داده شد که در مقایسه با حالت غیر اندرکنشی، ناحیه تشدید پلاسمون جابجایی به قرمز دارد. همچنین ملاحظه شد که اندرکنش ذرات سبب کاهش مقدار قدر مطلق قسمت حقیقی و موهومی گذردهی الکتریکی می‌شود. در نهایت برای جابجایی طول موج تشدید پلاسمون یک رابطه درجه سوم و یک رابطه نمایی برازش شد.



شکل ۴: جابه‌جایی طول موج رزونانس پلاسمون جفت نانوذره طلا نسبت به (a/d).

مرجع‌ها

[۱] M. Ohtsu, Progressin *Nano-Electro-Optics III: Industrial Applications and Dynamics of the Nano-Optical System*, Springer, Berlin, ۲۰۰۵.

[۲] Q. Wang, J. Xu, and R. H. Xie, Nonlinear Optics of Nanoparticles and Nanocomposites, Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology , Vol. ۸. ۲۰۰٤.

[۳] K.-H. Su, Q.-H. Wei, Interparticle Coupling Effects on Plasmon Resonances of Nanogold Particles, NANO LETTERS, Vol. ۳, No. ۸, ۲۰۰۳

[٤] W. Rechberger, A. Hohenau, Optical properties of two interacting gold nanoparticles, Optics Communications ۲۲۰ (۲۰۰۳)

[٥] E. Hao. G. C. Schatz, Electromagnetic fields around silver nanoparticles and dimers, J. Chem. Phys. ۱۲۰ (۲۰۰٤)

[٦] A. Kheirandish, N. S. Javan, and H. Mohammadzadeh, Scientific Reports (Nature Publisher Group) ۱۰, ٦٥۱۷ (۲۰۲۰).

[۷] C. F. Bohren, D. R. Huffman, “Absorption and Scattering of Light by Small Particles”, Wiley, ۱۹۹۸.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-27]