



بیست و پنجمین کنفرانس اپتیک و  
فوتونیک ایران و یازدهمین کنفرانس  
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،  
دانشگاه شیراز،  
شیراز، ایران.  
۹-۱۱ بهمن ۱۳۹۷



## بررسی نظری استفاده از نانو لوله‌های نقره به عنوان زیر لایه در پراکندگی رامان تقویت شده سطحی

فرزاد شیرزادی تبار<sup>۱</sup>، مریم سلیمی نسب<sup>۱</sup>

<sup>۱</sup> گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه رازی، کرمانشاه، ایران f.shirzadi@razi.ac.ir , saliminasabm@gmail.com

چکیده - نانو لوله فلزی نقره در ناحیه مرئی دارای یک طول موج تشدید پلاسمون سطحی موضعی است. با حل معادله لاپلاس در مختصات استوانه‌ای، میدان الکتریکی موضعی در همه نواحی نانو لوله بدست آمده که با استفاده از آن می‌توان میدان الکتریکی تقویت شده در هر ناحیه را محاسبه کرد. تقویت میدان الکتریکی موضعی یکی از فاکتورهای مهم در تعیین فاکتور تقویت SERS است. نتایج محاسبات نظری نشان می‌دهد، فاکتور SERS در نزدیکی دیواره داخلی نقره حدود  $4.36 \times 10^{12}$  و در نزدیکی دیواره خارجی نانولوله حدود  $2.57 \times 10^{10}$  است. بنابراین، سیستم نانو لوله نقره می‌تواند به عنوان زیر لایه در پراکندگی رامان تقویت شده سطحی استفاده شود.

کلید واژه- پراکندگی رامان، تشدید پلاسمون سطحی، نانو لوله

### Theoretical study of using silver metallic nanotube as a substrate in surface enhanced Raman scattering

Farzad Shirzaditabar<sup>1</sup>, Maryam Saliminasab<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Physics, Razi University, Kermanshah, Iran. e-mail: [f.shirzadi@razi.ac.ir](mailto:f.shirzadi@razi.ac.ir) , [saliminasabm@gmail.com](mailto:saliminasabm@gmail.com)

**Abstract-** A silver metallic nanotube has a localized surface plasmon resonance in visible region. By solving Laplace's equation in cylindrical coordinates, the local electric field in all regions of nanotube is taken which can be used to calculate enhanced electric field in any region. The enhancement of local electric field is one of the important factors in determining the SERS factor. Theoretical results show that the SERS factor near the inner wall of silver tube is about  $4.36 \times 10^{12}$  whereas near the outer wall of nanotube is about  $2.57 \times 10^{10}$ . So, the silver nanotube system can be used as SERS substrate.

Keywords: Raman Scattering, Surface Plasmon, Nanotube

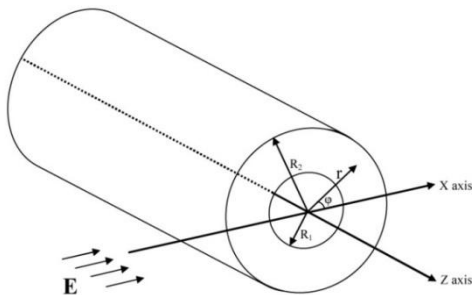
$$\varepsilon(l, \omega) = \varepsilon_{JC} + \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma_{bulk}} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\Gamma} \quad (1)$$

$\varepsilon_{JC}$  داده‌های تجربی اندازه‌گیری شده توسط جانسون کریستی [۲] برای توده فلزی است که با استفاده از روش برازش منحنی، مقدار ثابت دی‌الکتریک در هر بسامد قابل تعیین است. فرکانس پلاسمون توده نقره،  $\omega = 2\pi c/\lambda$  فرکانس زاویه‌ای نور ورودی لیزر و  $\gamma_{bulk} = 3.23 \times 10^{13}$  Hz میرایی در اثر برخورد الکترون‌ها است.  $\Gamma$  مربوط به دیگر میرایی‌ها است و به صورت زیر تعریف می‌شود [۳]:

$$\Gamma = \gamma_{bulk} + A \frac{V_F}{a} + (k_3 R_2)^3 \quad (2)$$

که  $A \approx 1$  ضریب سرعت فرمی،  $V_F = 1.4 \times 10^6$  m/s سرعت فرمی،  $a = R_2 - R_1$  و  $k_3 = \varepsilon_3^{1/2} \omega/c$  عدد موج در محیط بیرون است. عبارت‌های دوم و سوم در رابطه (۲)، به ترتیب ثابت‌های میرایی مربوط به پراکندگی الکترون در مرز فلز و میرایی تابشی هستند.

محور اصلی نانولوله استوانه‌ای در راستای محور  $z$  است و طول آن بی‌نهایت فرض می‌شود. طبق شکل (۱)، بردار انتشار  $k$  در راستای محور  $y$  و بردار قطبش در راستای محور  $x$  در نظر گرفته شده است.



شکل ۱: هندسه نانو لوله فلزی

به دلیل کوچک بودن شعاع دیواره فلزی نسبت به طول موج فرودی، در این مدل نیز از تقریب شبه استاتیک استفاده می‌شود. بنابراین با حل معادله لاپلاس در مختصات استوانه‌ای، میدان الکتریکی در هر ناحیه (درون

## مقدمه

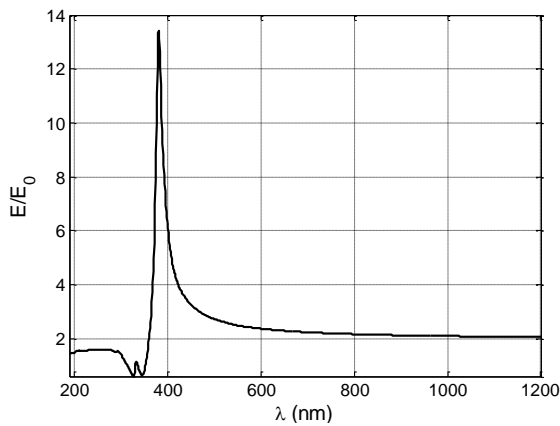
با پیشرفت‌های اخیر در زمینه نانو فناوری، دانشمندان قادر به طراحی نانو ساختارهایی با شکل‌های متفاوت مانند نانومنشور، نانومیله، نانوپوسته و غیره شده‌اند. خواص اپتیکی نانوذرات فلزی، مربوط به تشدید پلاسمون سطحی موضعی<sup>۱</sup> ( $LSPR$ )، شامل طیف جذبی و پراکنده تنظیم پذیر، فلوتورسنس تقویت سطحی، پراکندگی رامان تقویت شده سطحی<sup>۲</sup> ( $SERS$ ) است که توجه بسیاری از دانشمندان این حوزه را به خود جلب کرده است. در این مقاله، در بسامدی نزدیک بسامد  $LSPR$ ، میدان الکتریکی موضعی اطراف نانو لوله فلزی تا مرتبه بالایی تقویت شده که  $SERS$  را نتیجه می‌دهد. این افزایش میدان الکتریکی امکان شناسایی مولکول‌های چسبیده به سطح فلز به روش  $SERS$  را فراهم می‌کند.

## مدل تئوری

هندسه یک نانو لوله فلزی بلند در شکل (۱) نشان داده شده است. هسته دی‌الکتریک با شعاع  $R_1$  و ثابت دی‌الکتریک  $\varepsilon_1$ ، دیواره نقره با ضخامت  $R_2 - R_1$  و ثابت دی‌الکتریک  $\varepsilon_2$  و محیط اطراف با ثابت دی‌الکتریک  $\varepsilon_3$ . ثابت دی‌الکتریک فلز طبق مدل درود-لورنتس بصورت زیر در نظر گرفته می‌شود [۱]:

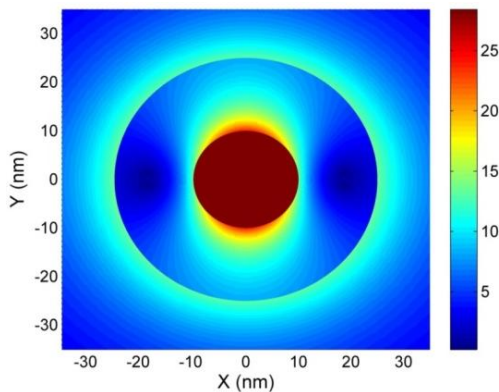
<sup>1</sup>Localized surface plasmon resonance

<sup>2</sup>Surface enhanced Raman scattering



شکل ۲: طیف میدان الکتریکی تقویت شده نانو لوله.

توزیع میدان الکتریکی در نانولوله نقره با مشخصات هندسی  $R_{1,2} = [10, 25]$  nm و  $\epsilon_{1,3} = [1, 1.77]$  در طول موج تشدید  $\lambda = 381$  nm، در شکل (۳) رسم شده است. همان طور که در شکل دیده می شود، میدان الکتریکی در فضای خالی داخلی نانولوله بیشترین مقدار را داراست. شدت میدان الکتریکی در دیواره داخلی نانولوله بیشتر از دیواره خارجی تقویت شده است. توزیع میدان الکتریکی در دیواره داخلی نانولوله به صورت پلاسمون دو قطبی است در حالی که در خارج از نانولوله به صورت یکنواخت به حالت تشدید درآمده است. میدان الکتریکی موضعی در فضای خالی داخلی نانولوله  $28/41$  برابر میدان فرودی، در دیواره داخلی  $23/71$  برابر میدان فرودی و در خارج از نانولوله  $13/51$  برابر میدان فرودی است.



شکل ۳: توزیع تقویت میدان الکتریکی نانولوله.

هسته، درون دیواره و محیط اطراف) طبق روابط زیر قابل محاسبه است:

$$\vec{E}_1 = -\left(\frac{A_1}{E_0} - 1\right)\vec{E}_0 \quad (3)$$

$$\vec{E}_2 = \left(1 - \frac{A'_1}{E_0}\right)\vec{E}_0 + \frac{C'_1}{r^2}(\cos\varphi\hat{e}_r + \sin\varphi\hat{e}_\varphi) \quad (4)$$

$$\vec{E}_3 = \vec{E}_0 + \frac{C_1}{r^2}(\cos\varphi\vec{e}_r + \sin\varphi\vec{e}_\varphi) \quad (5)$$

که ضرایب عبارتند از:

$$A_1 = \frac{E_0(\epsilon_1 - \epsilon_2)(\epsilon_2 - \epsilon_3)R_1^2 + E_0[\epsilon_2(\epsilon_2 - 3\epsilon_3) + \epsilon_1(\epsilon_2 + \epsilon_3)]R_2^2}{(\epsilon_1 - \epsilon_2)(\epsilon_2 - \epsilon_3)R_1^2 + (\epsilon_1 + \epsilon_2)(\epsilon_2 + \epsilon_3)R_2^2} \quad (6)$$

$$A'_1 = -\frac{E_0(\epsilon_2 - \epsilon_3)[(-\epsilon_1 + \epsilon_2)R_1^2 - (\epsilon_2 + \epsilon_3)R_2^2]}{(\epsilon_1 - \epsilon_2)(\epsilon_2 - \epsilon_3)R_1^2 + (\epsilon_1 + \epsilon_2)(\epsilon_2 + \epsilon_3)R_2^2} \quad (7)$$

$$C_1 = \frac{E_0(\epsilon_1 - \epsilon_2)(\epsilon_2 + \epsilon_3)R_1^2R_2^2 + E_0(\epsilon_1 + \epsilon_2)(\epsilon_2 - \epsilon_3)R_2^4}{(\epsilon_1 - \epsilon_2)(\epsilon_2 - \epsilon_3)R_1^2 + (\epsilon_1 + \epsilon_2)(\epsilon_2 + \epsilon_3)R_2^2} \quad (8)$$

$$C'_1 = \frac{2E_0(\epsilon_1 - \epsilon_2)\epsilon_3R_1^2R_2^2}{(\epsilon_1 - \epsilon_2)(\epsilon_2 - \epsilon_3)R_1^2 + (\epsilon_1 + \epsilon_2)(\epsilon_2 + \epsilon_3)R_2^2} \quad (9)$$

### فاکتور تقویت پراکندگی رامان

نسبت میدان الکتریکی موضعی در خارج از نانو لوله به میدان الکتریکی فرودی طبق رابطه  $FE = |\vec{E}_{loc}|/|\vec{E}_0|$  داده می شود. شکل (۲)، طیف میدان الکتریکی تقویت شده در خارج از سطح نانو لوله نقره، بر حسب طول موج با مشخصات هندسی  $R_{1,2} = [10, 25]$  و  $\epsilon_{1,3} = [1, 1.77]$  را نشان می دهد. طبق شکل (۲)، طیف جذبی نانو لوله در طول موج  $\lambda = 381$  nm، دارای یک قله تشدید پلاسمون است که ناشی از برهم کنش مدهای پلاسمون حفره داخلی و پوسته خارجی نقره است.

خارجی نقره تا مرتبه بالایی تقویت شده است. فاکتور بالای *SERS* نانولوله نشان می‌دهد، این نانو ذره گزینه مناسبی برای زیرلایه‌های *SERS* در شناسایی مولکول‌ها به شمار می‌رود.

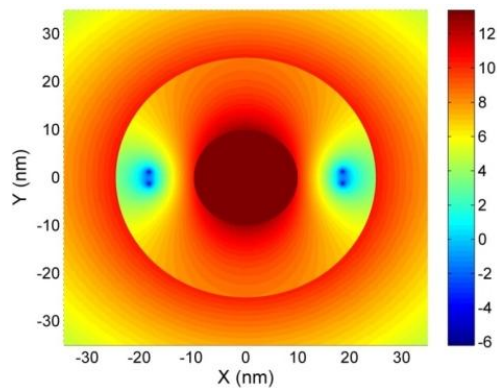
### مرجع‌ها

- [1] R.D. Averitt, S.L. Westcott, N.J. Halas, "Linear optical properties of gold nanoshells". J Opt Soc Am B, Vol. 16, No. 10, pp.1824-1832, 1999.
- [2] P. B. Johnson, R.W. Christy, "Optical constants of noble metals", Phys Rev B, Vol. 6, No. 12, pp. 4370-4379, 1972.
- [3] V.B. Gildenburg, V.A. Kostin, I.A. Pavlichenko, "Resonances of surface and volume plasmons in atomic clusters", Physics of Plasmas, Vol.18, No. 9, pp. 092101-092106, 2011.

فاکتور تقویت پراکندگی رامان طبق رابطه زیر داده می‌شود:

$$G_{SERS} = \left| \frac{E_{loc}}{E_0} \right|^4 \quad (10)$$

شکل (۴) مقدار لگارتیم فاکتور تقویت *SERS* نانولوله فلزی را در طول موج ۳۸۱ نانومتر نشان می‌دهد. فاکتور *SERS* در شکل با رنگ‌های مختلف نشان داده شده است. نتایج محاسبات نشان می‌دهد، فاکتور تقویت *SERS* نانولوله فلزی در درون فضای خالی حدود  $2.45 \times 10^{13}$  و در نزدیکی دیواره داخلی نقره حدود  $4.36 \times 10^{12}$  و در نزدیکی دیواره خارجی نانولوله در حدود  $2.57 \times 10^{10}$  است. در مقایسه با دیگر نانوساختارها، نانولوله تقویت میدان الکتریکی بیشتر و در نتیجه فاکتور تقویت *SERS* بالاتری را نشان می‌دهد.



شکل ۴: فاکتور کیفیت *SERS* نانولوله.

### نتیجه‌گیری

نانو لوله فلزی نقره در ناحیه مرئی دارای یک طول موج تشدید پلاسمون سطحی موضعی است. تقویت میدان الکتریکی موضعی یکی از فاکتورهای مهم تاثیرگذار در حسگری به روش *SERS* است. نتایج محاسبات نشان می‌دهند که میدان الکتریکی در دیواره داخلی و دیواره