

مطالعه عددی تأثیر نور قطبیده بر نانوآرایه‌های آلومینیومی مکعبی یک بعدی

الهه رشنو^۱، نسرين سپهوند^۲، محسن بهرامی^{۱*}

^۱ گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه لرستان، خرم آباد، ایران، bahrani.m@lu.ac.ir

^۲ گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران، N-Sepanvand@stu.scu.ac.ir

چکیده: در این پژوهش تأثیر تغییر ضخامت نانوذرات آلومینیومی مکعبی شکل یک بعدی با آرایشی مستطیلی بر روی سطح دی‌الکتریک (SiO_2) مورد بررسی قرار گرفته است. برای بررسی خواص اپتیکی و توزیع میدان الکتریکی با ضخامت‌های مختلف ۱۰، ۵۰، ۱۰۰ نانومتر در سه مرحله از روش عددی تفاضلات متناهی حوزه زمان (FDTD) استفاده شده است. نتایج شبیه‌سازی نشان داد که در ضخامت‌های ۱۰ و ۱۰۰ nm انعکاس نور از سطح نانوذرات نسبت به ضخامت ۵۰ nm به ترتیب کاهش و افزایش می‌یابد. با توجه به مقدار نور جذب شده مشاهده گردید که تحت اثر تشدیدهای پلاسمونیک جایگزیده ایجاد شده بین نانوذرات آلومینیومی توزیع میدان الکتریکی در ضخامت ۵۰ nm بیشتر از دو ضخامت دیگر می‌باشد.

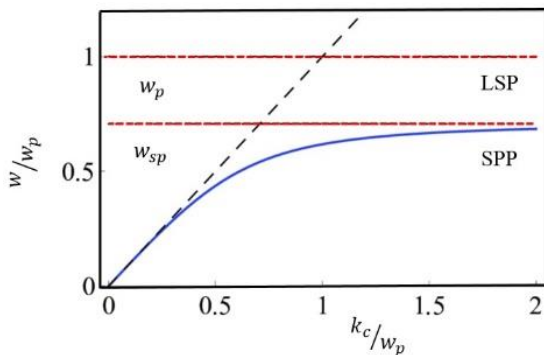
کلمات کلیدی: پلاسمونیک، تفاضلات متناهی حوزه زمان، نانوذرات آلومینیومی.

۱. مقدمه

به تشکیل تشدید پلاسمون سطحی جایگزیده (LSPR) می‌شود [۵]. در نتیجه LSPR، بارالکتریکی بر روی سطح نانوذرات به عنوان یک دوقطبی عمل می‌کند. این تشدیدها معمولاً در نواحی طیفی مرئی تا مادون قرمز نزدیک برای نانو ساختارهای فلزات نجیب و آلومینیوم روی می‌دهند [۳]. ساده‌ترین مدل که برای توصیف نانوذرات فلزی، در نظر گرفته می‌شود مدل درود است که گذردهی فلز در آن به صورت زیر محاسبه می‌گردد [۱]:

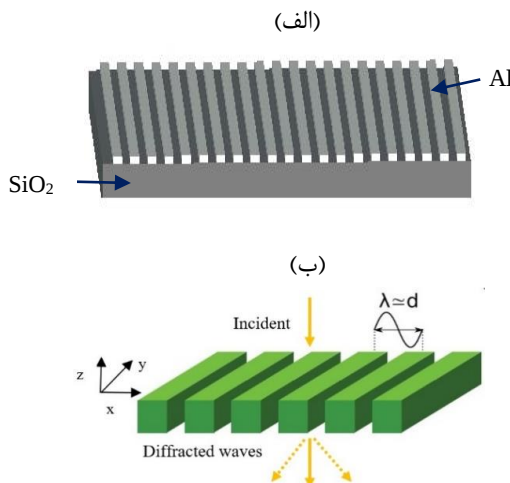
$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \quad (1)$$

که در آن ω_p فرکانس پلازما و γ ثابت میرایی درود است.



شکل ۱. منحنی‌های پراکندگی پلاسمون پلاریتون سطحی و تشدید سطحی جایگزیده در نانوذرات فلزی.

یک روش مناسب برای ایجاد پلاسمون سطحی جایگزیده با تشدید مناسب، استفاده از آرایه‌های تناوبی از نانوذرات است. مطابق شکل (۲-الف) برای انجام شبیه‌سازی، آرایه‌ای از نانوذرات آلومینیومی مکعبی شکل یک بعدی را در یک الگوی مستطیلی که بر روی سطح دی‌الکتریک (SiO_2) قرار دارند، با نرم افزار لومریکال طراحی کرده‌ایم. در این ساختار مطابق شکل (۲-ب) تابش نور فرودی در راستای محور z و طول موج نور تابشی با دوره تناوب یا فاصله بین نانوذرات یکسان در نظر شده است.



شکل ۲. الف) الگوی قرارگیری آرایه نانوذرات آلومینیوم بر روی بستر SiO_2 ، ب) جهت تابش نور فرودی و نور خروجی از آرایه.

پلاسمونیک با کنترل برهمکنش نور-ماده در ناحیه‌ای کوچک‌تر از طول موج (مقیاس نانو) در نزدیکی نانوذرات فلزی در سال‌های اخیر بسیار مورد توجه قرار گرفته است. پلاسمونیک برای انواع کاربردهای جدید در نانوالکترونیک، تصویربرداری نوری، پزشکی، مخابرات فوتولتائیک، فتوکاتالیزورها و... کاربرد دارد [۱]. ساختارهای مختلفی در بحث پلاسمونیک قرار می‌گیرد، که در میان آن‌ها آرایه‌های نانوذرات فلزی به دلیل توانایی در جذب نور و محصور کردن انرژی الکترومغناطیسی قوی در ابعاد زیر موج، ابزاری مؤثر در به دام انداختن نور هستند که در طیف گسترده‌ای از دستگاه‌های اپتوالکترونیک و کاربردهای مختلف پلاسمونیک مورد استفاده قرار می‌گیرند [۲]. در برهمکنش نور فرودی به دلیل محدودیت سطح و حجم نانوذرات، آرایه‌های نانوذرات فلزی با جذب نور در فرکانس‌های خاصی برانگیخته می‌شوند و تشدید پلاسمون سطحی جایگزیده را ایجاد می‌کنند [۳-۴]. با توجه به وابستگی تشدید پلاسمون سطحی جایگزیده به الگوهایی که براساس آن‌ها طراحی می‌شوند (بعد، دوره تناوب، هندسه و...) آرایه‌های نانوذرات فلزی پاسخ‌های نوری متفاوتی نسبت به نوع قطبش و طول موج نور فرودی دارند [۵].

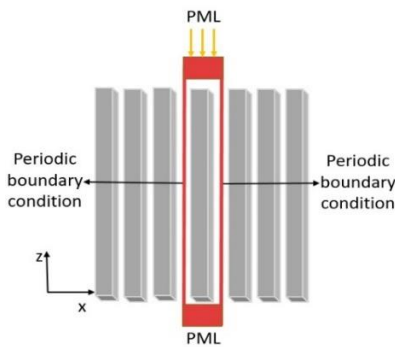
در پژوهش حاضر آرایه‌ای یک بعدی از نانوذرات آلومینیومی مکعبی شکل را در الگویی مستطیلی با استفاده از روش عددی تفاضلات متناهی حوزه زمان (FDTD) تحت تابش امواج الکترومغناطیسی با استفاده از نرم‌افزار لومریکال مورد بررسی قرار می‌دهیم.

۲. مبانی نظری و روش

محدود کردن نور در سطح نانوذرات فلزی با نوسانات جمعی الکترون‌های نوار رسانش فلز یا پلاسمون ایجاد می‌شود. با تابش نور به این پلاسمون‌ها، نوسانات جمعی الکترون‌ها در سطح مشترک فلز-دی‌الکتریک تولید می‌شوند که به آن پلاسمون سطحی می‌گویند. با برهمکنش تشدید بین فوتون‌های فرودی و پلاسمون سطحی امواج الکترومغناطیسی سطحی به نام پلاسمون پلاریتون‌های سطحی (SPP) شکل می‌گیرد که در امتداد سطح خارجی فلز انتشار می‌یابند [۱]. علت با اهمیت بودن پلاسمون پلاریتون سطحی توانایی آن‌ها در محدود کردن میدان الکترومغناطیسی است که در مقیاس نانومتر حدود پراکندگی را در موج‌های اپتیکی کاهش می‌دهند و گسترش میدان‌های جایگزیده را تا چندین مرتبه بهبود می‌بخشند. تحریک پلاسمون‌های سطحی توسط تابش میدان الکترومغناطیسی خارجی را نیز پلاسمون سطحی جایگزیده (LSP) می‌نامند (شکل ۱). اگر فرکانس نور فرودی با نوسان‌های الکترون‌های نوار رسانش فلز برابر باشد، منجر

در این روابط ϵ_r ضریب گذردهی نسبی محیط و ϵ_0 ضریب گذردهی خلأ می باشد E ، میدان الکتریکی، H ، میدان مغناطیسی، D جابه‌جایی و ω فرکانس زاویه‌ای است.

به هنگام استفاده از روش FDTD، برای انجام محاسبات، در نرم‌افزار لومریکال مطابق با شکل ۳ در مرزهای بالا و پایین ناحیه شبیه‌سازی یعنی راستای z و y ، به منظور جلوگیری از ایجاد بازتاب‌های غیرواقعی از مرزها، شرط مرزی لایه انطباق کامل (PML) و در راستای محور x چون ساختار شبیه‌سازی مورد نظر در این راستا متناوب است، یک سلول واحد با شرایط مرزی تناوبی به کار گرفته می‌شود تا بتوانیم کل ساختار را شبیه‌سازی نمائیم.



شکل ۴. نمای جانبی سلول واحد مدل شبیه‌سازی ما در صفحه x - z ، شامل PML و شرایط مرزی تناوبی.

۳. نتایج و بحث

در این پژوهش، مطابق با شکل (۲-الف) نانوذرات فلزی مکعبی از جنس آلومینیوم در الگویی مستطیلی بر روی بستر SiO_2 قرار گرفته‌اند. ثابت دی‌الکتریک وابسته به طول موج آلومینیوم از جانسون کریستی گرفته شده است. ما در این شبیه‌سازی با استفاده از نرم‌افزار لومریکال با قرار دادن چهار مونیتور مختلف در اطراف و بین نانوذرات ویژگی‌های نوری (بازتابش، عبور،...) و توزیع میدان الکتریکی در نانوذرات فلزی بررسی کرده‌ایم.

همان‌طور که بیان شد آرایه‌های نانوذرات فلزی تحت اثر تابش نور فرودی و ابعاد مختلف دارای پاسخ‌های نوری متفاوتی هستند، بنابراین نور قطبیده TE (مد الکتریکی عرضی) را که راستای قطبش نور آن در امتداد دوره تناوب آرایه است با طول موجی در ناحیه مرئی برابر با فاصله بین نانوذرات به کار گرفته‌ایم و پاسخ نوری آرایه را در سه مرحله با ضخامت‌های مختلف مورد بررسی قرار داده‌ایم.

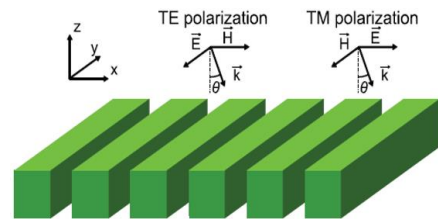
در اولین مرحله از شبیه‌سازی ابعاد نانوذرات آلومینیومی را با طول 150 nm ، ارتفاع 50 nm ، ضخامت 50 nm و دوره تناوب برابر با 400 nm در نظر گرفته‌ایم. این نانوذرات به طور عمودی در راستای محور z تحت تابش موج تخت با فاصله 180 nm از آرایه و طول موج 400 nm قرار دارند.

با در نظر گرفتن شرایط $\lambda = d$ ، هنگام تابش نور بر روی نانوذرات فلزی، نانوساختار همانند توری پراش عمل می‌کند و رابطه پراش براگ به صورت زیر برای امواج پراکنده شده بیان می‌شود:

$$n\lambda = 2d \cdot \sin \theta \quad (2)$$

که n مرتبه پراش، λ طول موج فرودی، d فاصله بین نانوذرات مکعبی و θ زاویه نور انعکاس یافته با بیشترین دامنه است.

پاسخ نوری و طول موج LSPR در آرایه‌های تناوبی نانوساختار علاوه بر دوره تناوب و طول موج نور فرودی به نوع قطبش نور فرودی (TE و TM) بستگی دارد. قطبش نور تابیده شده به یک نانوساختار با جهت‌گیری میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی آن نسبت به صفحه تابش تعریف می‌شود. نور قطبیده TE (مد الکتریکی عرضی) با عمود بودن میدان الکتریکی بر صفحه تابش و نور قطبیده TM (مد مغناطیسی عرضی) با عمود بودن میدان مغناطیسی بر صفحه تابش مشخص می‌شود، به عبارت دیگر در حالت انتشار TE و TM مؤلفه‌های میدان الکتریکی و مغناطیسی در جهت انتشار نور وجود ندارد. در این ساختار (شکل ۱)، در قطبش الکتریکی TE راستای قطبش در امتداد دوره تناوب نانوذرات و در قطبش TM راستای قطبش در امتداد عمود بر دوره تناوب آرایه است (شکل ۳).



شکل ۳. نمایی از یک آرایه یک بعدی از نانومیله‌های مکعبی و راستای قطبش نور.

در این شبیه‌سازی، برای بررسی خواص انتشار نورفرودی آرایه‌های تناوبی روش عددی تفاضلات متناهی حوزه زمان (FDTD) را به کار گرفته‌ایم. این روش به‌طور مستقیم چهار معادله دیفرانسیل جزئی یعنی معادلات ماکسول (۳-۶) را به‌طور مستقیم در سه بعد حل می‌کند که توزیع میدان الکتریکی و مغناطیسی درون سلول را توصیف می‌کنند [۶]:

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\mu_0 \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad (3)$$

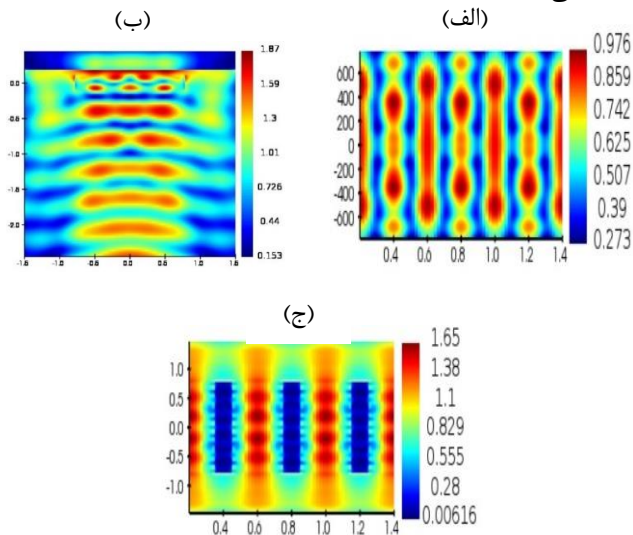
$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \epsilon_0 \epsilon_r \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (4)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (5)$$

$$\vec{D}(\omega) = \epsilon_0 \epsilon_r(\omega) \vec{E}(\omega) \quad (6)$$

نانوذرات و همچنین روی نانوذرات به صورت صفحه‌ای عمودی قرار دادیم. مطابق شکل اثرات تشدید پلاسمون‌های سطحی در بین نانوذرات کاملاً قابل مشاهده است که این اثرات می‌تواند میدان الکترومغناطیسی نزدیک را در فاصله‌های بین نانو ذرات و در سطح مقطع جانبی و سطحی آن‌ها افزایش دهد.

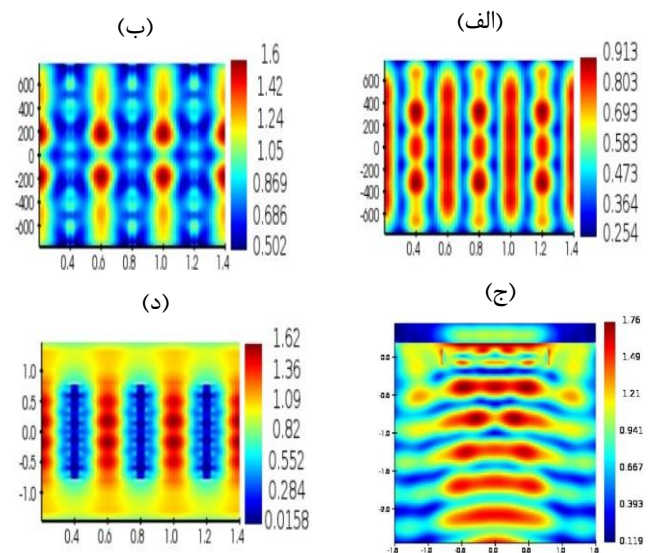
در مرحله دوم شبیه‌سازی برای بررسی اثرات ضخامت نانوذرات بر روی توزیع میدان الکتریکی در طول موج و دوره تناوب ثابت (برابر با مرحله اول)، ضخامت نانوذرات را به 100 nm افزایش دادیم و نتایج توزیع میدان الکتریکی را در مونیتهورهای مختلف با مرحله قبل مقایسه کرده‌ایم. با مشاهده نتایج مونیتهور قرار گرفته بر روی نانوذرات میزان نور منعکس شده مطابق شکل (۶-الف) با افزایش ضخامت نانوذرات نسبت به مرحله قبل افزایش می‌یابد که این می‌تواند به این دلیل باشد که سطح براق نانو ذرات در این طول موج همانند آینه‌ای برای نور فرودی عمل می‌کنند و با انعکاس نور به بیرون، از ورود نور به اندازه کافی به جلوگیری می‌کنند و توزیع میدان عبوری را تا حدی تضعیف می‌کند



شکل ۶. محاسبه توزیع شدت میدان الکتریکی نانوذرات آلومینیومی با ضخامت 100 nm از مونیتهورهای قرار گرفته (الف) در بالای نانوذرات، (ب) به صورت صفحه‌ای عمودی بین نانوذرات، (ج) با عبور از روی نانوذرات.

با افزایش ضخامت نانوذرات به 100 nm همان‌طور که از شکل (۶-ب و ج) کاملاً مشخص است اثرات تشدید پلاسمون سطحی جایگزیده به دلیل دوقطبی‌های تشکیل شده در سطح مشترک فلز-دی الکتریک افزایش می‌یابد و اثرات میدان نزدیک بین سطح نانوذرات را در تعامل با نور فرودی تقویت می‌کند. بنابراین اثرات پلاسمونیک و توزیع میدان ضعیف‌تر نسبت به مرحله قبل را می‌توان از حجم بزرگتر نانوذرات و همچنین تداخل مخرب نور پراکنده شده توسط نانومیل‌ها و نور فرودی دانست.

میزان نور بازتاب‌شده و عبوری از سطح نانوذرات را مطابق شکل (۵-الف و ب) با مونیتهورهایی که در بالا و پایین آرایه نانوذرات قرار گرفته‌اند، محاسبه کرده‌ایم. همان‌طور که بیان شد هنگامی که الکترون‌های آزاد فلز تحت اثر میدان الکترومغناطیسی قرار می‌گیرند، تشدید پلاسمون سطحی ایجاد می‌شود. از آنجائی که جذب نور با شدت میدان الکتریکی $|E|^2$ که در آن E توزیع شدت نور در اطراف نانوذرات است متناسب می‌باشد، پلاسمون‌های سطحی باعث افزایش میدان الکتریکی در اطراف نانوذرات می‌شود. این میدان تقویت شده در نانوذرات در جهت نور قطبیده شده TE است. بنابراین با توجه به شکل در این ضخامت اثرات بازتابش نور از سطح نانوآرایه‌ها نسبت به عبور نور فرودی از میان آن‌ها بیشتر است لذا توزیع میدان شدیدتری را به دلیل انعکاس نور از مونیتهور قرار گرفته بر روی نانوآرایه‌ها مشاهده می‌کنیم. هم‌چنین حضور دی‌الکتریک موجود نیز باعث تشدید میدان الکتریکی در اطراف نانوذرات می‌شود. لازم به ذکر است از تفاوت این مقادیر به صورت تئوری می‌توان میزان نور جذب شده را نیز اندازه‌گیری کرد.



شکل ۵. محاسبه توزیع شدت میدان الکتریکی نانوذرات آلومینیومی با ضخامت 50 nm از مونیتهورهای قرار گرفته (الف) بالای نانوذرات، (ب) پایین نانوذرات، (ج) به صورت صفحه‌ای عمودی بین نانوذرات، (د) با عبور از روی نانوذرات.

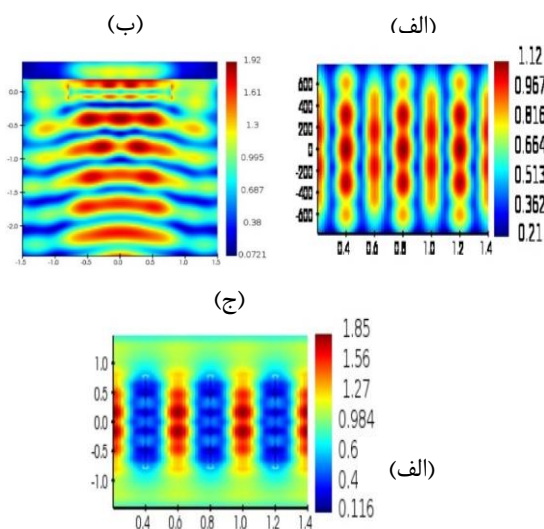
هنگامی که نانوذرات آلومینیومی در آرایه‌ها در مجاورت یکدیگر قرار می‌گیرند، از طریق جفت‌شدگی این نانوذرات میدان‌های الکتریکی مربوط به مد پلاسمون‌های سطحی جایگزیده یک نانوذره بر پاسخ نانوذرات مجاور تأثیر می‌گذارد، بنابراین اثرات میدان نزدیک بین آن‌ها تشدید می‌یابد. علاوه بر این، وجود میدان نزدیک در این فاصله نیز می‌تواند تا حد زیادی به دلیل جایگزیدگی بالا، انرژی نور را در این فضای کوچک افزایش دهد. بنابراین در شکل (۵-ج و د) برای درک ارتباط بین تشدید پلاسمون سطحی جایگزیده و توزیع میدان الکتریکی با فاصله بین نانوذرات مونیتهورها را به صورت عمودی در بین

پاسخ‌های اپتیکی (انعکاس، جذب، پراکندگی، عبور) به ابعاد نانوذرات (ضخامت) وابسته است.

منابع

- [1] S. Collin, "Nanostructure arrays in free-space: optical properties and applications." *Reports on Progress in Physics*, vol 77, no. 12, pp. 126402, 2014.
- [2] S. Kasani, K. Curtin and N. Wu, "A review of 2D and 3D plasmonic nanostructure array patterns: fabrication, light management and sensing applications." *Nanophotonics*, vol 8, no. 12, pp. 2065-2089, 2019.
- [3] M. B. Ross, C. A. Mirkin and G. C. Schatz, "Optical properties of one-, two-, and three-dimensional arrays of plasmonic nanostructures." *The journal of physical chemistry C*, vol 120, no. 2 pp. 816-830, 2016.
- [4] W. Wang, M. Ramezani, A. I. Väkeväinen, P. Törmä, J. G. Rivas and T. W. Odom, "The rich photonic world of plasmonic nanoparticle arrays." *Materials today*, vol. 21, no. 3, pp. 303-314, 2018.
- [5] Yang, Kang, Xu Yao, Bowen Liu, and Bin Ren. "Metallic plasmonic array structures: Principles, fabrications, properties, and applications." *Advanced Materials*, vol. 33, no. 50, pp. 2007988, 2021.
- [6] G. Singh, S. Verma, "Design and analysis of thin film GaAs solar cells using silver nanoparticle plasmons." *Photonics and Nanostructures-Fundamentals and Applications*, vol. 37, pp. 100731, 2019.

برای محاسبه دقیق و واقعی‌تر در مرحله پایانی شبیه‌سازی ضخامت نانوذرات را تا 10 nm کاهش دادیم. مطابق شکل (۷-الف) در این ضخامت می‌توان بیان کرد که انعکاس فوتون‌ها به دلیل ضخامت کم نانوذرات نسبت به مرحله‌های قبل کاهش یافته است. مطابق با شکل (۷-ب و ج) همان‌طور که بیان شد با قرارگیری نانوذرات به صورت آرایه‌ای در کنار یکدیگر، تشدید پلاسمون یک ذره از نظر طیفی با تشدید نانوذره دیگر همپوشانی دارد. این جفت‌شدگی به طور سازنده در نهایت منجر به توزیع میدان قوی‌تر و جذب بیشتر خواهد شد. بنابراین در اینجا با دوره تناوب ثابت و کاهش ضخامت ساختار، تشدید پلاسمون سطحی آن‌ها نمی‌تواند به طور کامل و موثر بین نانوذرات جفت شود ولی شدت میدان الکتریکی را در بین آن‌ها متمرکز می‌کند. برخلاف این که با وجود انعکاس کمتر، انرژی فوتون بیشتری به نانوذرات تزریق می‌شود ولی به دلیل اثرات پلاسمونیک و جفت‌شدگی میدان نزدیک ضعیف‌تر مقدار افزایش جذب و توزیع میدان نسبت به مراحل قبل در این ضخامت کاهش می‌یابد. همچنین اثرات پراکندگی را نیز نباید نادیده گرفت زیرا نور بیشتری در اثر آن از بین نانوذرات عبور کرده و میدان عبوری در این حالت افزایش می‌یابد.



شکل ۷. محاسبه توزیع شدت میدان الکتریکی نانوذرات آلومینیومی با ضخامت 10 nm از مونیتورهای قرار گرفته (الف) بالای نانوذرات، (ب) به صورت صفحه‌ای عمودی بین نانوذرات، (ج) با عبور از روی نانوذرات.

۴. نتیجه‌گیری

در این پژوهش با استفاده از روش عددی FDTD اثرات ضخامت نانوذرات مکعبی آلومینیومی بر روی توزیع میدان الکتریکی و خواص نوری آن‌ها مطالعه شد. محاسبات انجام شده نشان داد که حضور نانوذرات آلومینیومی با ضخامت‌های مختلف باعث تغییر در اثرات پلاسمونیک می‌شود که به طور قابل توجهی در توزیع میدان‌های الکتریکی تأثیرگذار است. نتایج شبیه‌سازی نشان داد که میزان تغییر