

Study of optical properties of a plasmonic nanoparticle on a dielectric substrate

N. Daneshfar^{1*}, M. Tabrizi¹, S. Amini-javid¹

Submit Date: ...

Revise Date: ...

Accept Date: 2019.02.16

Abstract

By studying the polarizability of a spherical metallic nanoparticle on a dielectric substrate, the optical properties of the system are investigated. Since the size of the nanoparticle is much smaller than the wavelength of incident light, by solving the Laplace equation, the electric potential at different regions is expanded in terms of multipoles. By using the polarizability tensor, expressions for the parallel and normal polarizability are derived and then the numerical results are discussed. In addition to the impact of the size of plasmonic nanoparticle, by defining a geometrical parameter called the truncation parameter, the impact of this parameter on the parallel and normal components of polarizability tensor is shown. It is demonstrated that the optical dispersion and absorption depends strongly on the particle size, the type of metal particle and the truncation parameter. The nanoparticle is made of gold and silver, because these noble metals have predominately been the materials of choice for plasmonic applications in optical frequency range.

Keywords: Plasmonic nanoparticle, Polarizability, Dielectric substrate.

¹ Department of physics, Razi University, Kermanshah, Iran.

* Corresponding author: ndaneshfar@razi.ac.ir

<https://jap.alzahra.ac.ir/>

مطالعه خواص نوری نانوذره پلاسمونیک بر روی لایه دی الکتریک^۱

نادر دانش فر^{۲*}، مهدی تبریزی^۱، سمیه امینی جاوید^۲

تاریخ ارسال: ۱۳۹۷/۰۳/۱۴

تاریخ بازنگری: ۱۳۹۷/۱۰/۲۷

تاریخ تصویب: ۱۳۹۷/۱۱/۲۷

چکیده

با مطالعه قطبش پذیری یک نانو ذره فلزی کروی بر روی لایه دی الکتریک، خواص نوری سیستم بررسی می شود. از آنجا که اندازه نانوذره خیلی کوچکتر از طول موج نور فرودی است، با حل معادله لاپلاس، پتانسیل الکتریکی در نواحی مختلف برحسب چند قطبی ها بسط داده می شود. با استفاده از تانسور قطبش پذیری، عباراتی برای قطبش پذیری های موازی و عمود به دست آمده و سپس درباره نتایج عددی بحث شده است. علاوه بر اثر اندازه نانوذره پلاسمونیک در خواص نوری، با تعریف پارامتری هندسی به نام پارامتر برش، اثر این پارامتر در مؤلفه های موازی و عمودی تانسور قطبش پذیری بررسی می شود. نشان داده شده می شود که جذب و پاشندگی نوری به شدت به پارامترهایی همچون اندازه ذره، جنس نانوذره و پارامتر برش وابسته است. فرض می شود که

^۱ شناسه دیجیتال (DOI): 10.22051/jap.2019.20668.1098

^۲ گروه فیزیک، دانشگاه رازی، کرمانشاه

* نویسنده مسئول: ndaneshfar@gmail.com

جنس نانوذره طلا و نقره باشد، زیرا این فلزات گزینه‌های مناسبی برای کاربردهای پلاسمونیک در فرکانس‌های نوری هستند.

کلمات کلیدی: نانوذره پلاسمونیک، قطبش‌پذیری، زیرلایه دی الکتریک.

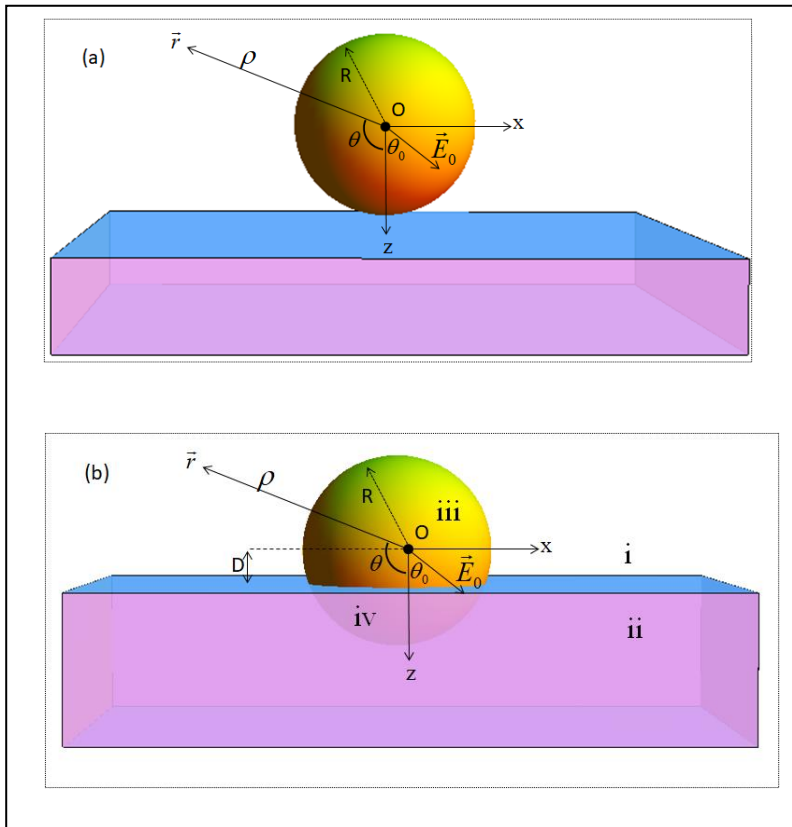
۱. مقدمه

ذرات در مقیاس نانو، رفتار متفاوتی از خود نشان می‌دهند. بدین معنی که با کوچک شدن ابعاد آن‌ها، خواص فیزیکی و شیمیایی و اپتیکی متناظر با آن‌ها نیز تغییر می‌کند. این خواص عمدتاً به شکل و اندازه ذرات، فاصله بین آن‌ها و محیط اطراف بستگی دارد [۱]. از طرفی، کاربردهای گوناگون نانوذرات فلزی و استفاده از خواص نوری آن‌ها در ناحیه مرئی تا مادون قرمز سبب شده است که در سال‌های اخیر این ذرات توجه محققان را به خود جلب کند. همچنین، قطبش‌پذیری این نانوذرات و جذب و پراکندگی نور توسط آن‌ها به پارامترهای هندسی و فیزیکی آن‌ها از قبیل: اندازه، شکل، ساختار، موقعیت، محیط اطراف و لایه‌ای که بر روی آن قرار گرفته، بستگی دارند. بررسی این وابستگی‌ها در طراحی نانو حسگرهای زیستی و پلاسمونیک در محدوده نور مرئی و مادون قرمز طیف الکترومغناطیسی بسیار مهم است [۲].

در سال ۱۹۸۷، ویند و همکارانش قطبش‌پذیری ذره‌ای کروی را بر روی زیرلایه با استفاده از مدل جانسون و کریستی بررسی کردند [۳، ۴]. نویسندگان همچنین در سال ۱۹۸۸، قطبش‌پذیری ذرات کروی برش‌یافته و شبه کروی را بر روی یک زیرلایه سافایر مطالعه کردند و برای یک شبکه مربعی از نانوذرات طلا بر روی زیرلایه سافایر، ضریب عبور را به دست آورده و با نتایج تجربی مقایسه کردند [۵]. در سال ۱۹۹۳، قطبش‌پذیری و خواص نوری توزیع‌های کاتوره‌ای و شبکه‌ای از ذرات کروی بر روی زیرلایه بررسی شد [۶]. در مقاله حاضر، خواص اپتیکی سیستمی متشکل از یک نانوذره پلاسمونیک که در فاصله‌ای از یک زیرلایه دی الکتریک قرار دارد مطالعه می‌شود. به عبارت دیگر، جذب و پاشندگی این سیستم در حالتی که نانوذره از فلز پلاسمونیک (طلا یا نقره) باشد، با استفاده از مدل درود بررسی می‌شود. اثر پارامترهایی همچون فاصله نانوذره از سطح زیرلایه که پارامتر برش نامیده می‌شود، اندازه نانوذره و جنس نانوذره پلاسمونیک در جذب و پاشندگی بررسی شده و وابستگی خواص نوری این سیستم به پارامترهای هندسی آن نشان داده می‌شود.

۲. مدل فیزیکی و تئوری مسئله

مطابق شکل ۱، یک نانوذره کروی پلاسمونیک با شعاع R ، ثابت دی‌الکتریک وابسته به فرکانس ϵ_3 (ناحیه iii) بر روی لایه تخت زیرین با ثابت دی‌الکتریک ϵ_2 (ناحیه ii) قرار گرفته و با محیطی با ثابت دی‌الکتریک ϵ_1 (ناحیه i) احاطه شده است. فرض می‌شود که لایه زیرین در ناحیه iv با ماده‌ای متفاوت با ثابت دی‌الکتریک ϵ_4 پر شده باشد. مرکز مختصات بر مرکز کره منطبق است و فاصله آن تا سطح لایه زیرین D است، به طوری که، وقتی مرکز کره بالای سطح لایه است، داریم $D > 0$ و هنگامی که مرکز زیر سطح لایه قرار دارد، $D < 0$ است.



شکل ۱. یک نانوذره کروی فلزی بر روی لایه دی‌الکتریک. الف) نانوذره بر روی زیرلایه ($D=R$)
و ب) نانوذره فرورفته در زیرلایه ($D < R$).

از آنجا که، ابعاد نانوذره در مقایسه با طول موج تابشی کوچک است، می‌توانیم از تقریب شبه استاتیکی استفاده کنیم و معادله لاپلاس، $\vec{\nabla}^2 j(\vec{r}) = 0$ ، را برای پتانسیل در نواحی مختلف به کار

بریم. در اینجا میدان الکتریکی تابشی به صورت $\vec{E} = E_0(\sin \theta_0 \hat{i} + \cos \theta_0 \hat{k})$ است. با حل معادله لاپلاس در دستگاه مختصات کروی (r, q, f) ، پتانسیل را در نواحی مختلف به دست می آوریم [۷-۴]. پتانسیل در ناحیه اول عبارت است از

$$y_1 = y_0 + \hat{a}_1 r^{-(l+1)}(A_{1l} P_l^0(\cos q) + B_{1l} P_l^1(\cos q) \cos f) + \hat{a}_1 (A_{1l}' V_l^0(r, \cos q) + B_{1l}' V_l^1(r, \cos q) \cos f) \quad (1)$$

که در آن، $y_0 = r(\cos q \cos q_0 + \sin q \sin q_0 \cos f)$ پتانسیل در ناحیه دوم می شود

$$y_2 = y_2' + r(a \cos q \cos q_0 + b \sin q \sin q_0 \cos f) + \hat{a}_1 r^{-(l+1)}(A_{2l} P_l^0(\cos q) + B_{2l} P_l^1(\cos q) \cos f) \quad (2)$$

پتانسیل در ناحیه سوم برابر است با

$$y_3 = y_3' + \hat{a}_1 r^l(A_{3l} P_l^0(\cos q) + B_{3l} P_l^1(\cos q) \cos f) + \hat{a}_1 (A_{3l}' W_l^0(r, \cos q) + B_{3l}' W_l^1(r, \cos q) \cos f) \quad (3)$$

پتانسیل در ناحیه چهارم به صورت زیر است

$$y_4 = y_4' + \hat{a}_1 r^l(A_{4l} P_l^0(\cos q) + B_{4l} P_l^1(\cos q) \cos f) \quad (4)$$

که در آن، $r^0 = r/R = |\vec{r}|/R$ است و y_2' و y_3' و y_4' ثوابت غیر صفر است، a و b

ضرایب ثابت است و توابع W_j^m و V_j^m به شکل زیر تعریف می شوند،

$$V_l^m(r, \cos q) \propto x^{-(l+1/2)} P_l^m((r \cos q - 2r_0)x^{-1/2}), x = r^2 - 4rr_0 \cos q + 4r_0^2; m = 0, 1 \quad (5)$$

$$W_l^m(r, \cos q) \propto x^{l/2} P_l^m((r \cos q - 2r_0)x^{-1/2}), x = r^2 - 4rr_0 \cos q + 4r_0^2; m = 0, 1 \quad (6)$$

در این روابط، توابع لژاندر وابسته و $r_0 = D/R$ پارامتر برش (بدون بعد) است. با اعمال شرایط مرزی مناسب، پیوستگی پتانسیل و مؤلفه عمودی بردار جابه جایی دستگاه معادلات خطی حاصل می شوند، که با حل این دستگاه معادلات ضرایب چند قطبی، کمیت های A_{kl} ، A_{kl}' ، B_{kl} و B_{kl}' به دست می آید. علاوه بر این، تانسور قطبش پذیری بدین شکل تعریف می شود: $\vec{I} = \hat{x}\hat{x} + \hat{y}\hat{y} + \hat{z}\hat{z}$ در حالی که تانسور واحد عبارت است از $\vec{\alpha} = \alpha_{||}(\hat{x}\hat{x} + \hat{y}\hat{y}) + \alpha_{\perp}\hat{z}\hat{z}$. پس از انجام عملیات جبری، مؤلفه های a یعنی $a_{||}$ و a_{\perp} به دست می آیند. برای مثال، هنگامی که نانوکره بر روی (یا بالای) لایه زیرین قرار دارد $e_2 = e_4$ و ضرایب چند قطبی مستقل از e_4 هستند. در این وضعیت، هنگامی که $D > 0$ است، مؤلفه های قطبش پذیری با استفاده از تقریب دوقطبی به شکل زیر محاسبه می شوند،

$$\begin{aligned} a_{||} &= \frac{e_1(e_3 - e_1)\mathcal{V}}{e_1 + \frac{1}{3}(e_3 - e_1)(1 - \frac{1}{8} \frac{e_2 - e_1}{e_2 + e_1})} \\ a_{\perp} &= \frac{e_1(e_3 - e_1)\mathcal{V}}{e_1 + \frac{1}{3}(e_3 - e_1)(1 - \frac{1}{4} \frac{e_2 - e_1}{e_2 + e_1})} \end{aligned} \quad (7)$$

که در آن، V حجم کره و برابر با $\frac{4}{3}pR^3$ است. از آنجا که نانوذره کرومی فلز است، تابع دی‌الکتریک فلز در تقریب درود عبارتست از [۷]

$$\epsilon(w) = \epsilon_{\infty} - \frac{w_p^2}{w^2 + igw} \quad (8)$$

که در آن، w_p فرکانس پلاسما، g فرکانس برخورد، ϵ_{∞} تابع دی‌الکتریک در فرکانس‌های زیاد است. در این مقاله، نانوذرات فلزی را از جنس طلا و نقره در نظر گرفته‌ایم. یکی از دلایل استفاده از آن‌ها اتلاف اندک در محدوده مرئی و فروسرخ نزدیک (NIR) است [۸]. از طرفی، نانوذرات طلا و نقره به دلیل اهمیت‌های زیستی و کاربردهای پزشکی بیشتر مورد توجه قرار گرفته‌اند. از دیگر دلایل انتخاب نانوذرات طلا و نقره، به این نکته‌ها اشاره می‌کنیم: نانوذره طلا به دلیل پایداری شیمیایی عالی، مقاومت در برابر اکسایش و سازگاری با محیط، کاربردهای وسیعی در زمینه‌های الکترونیک، فوتونیک، حسگرها و نانویزشکی دارد. همچنین، نانوذره نقره یکی از موادی است که امروزه به وفور در صنعت و تکنولوژی استفاده می‌شود و قابلیت از بین بردن میکروب‌ها و باکتری‌ها را دارد. علاوه بر این‌ها، از نانوذرات نقره یا طلا که بیشترین قابلیت را در پدیده تشدید پلاسمون سطحی موضعی دارند، می‌توان در تولید امواج الکترونیکی سطحی موسوم به «پلاسمون سطحی» استفاده کرد [۹].

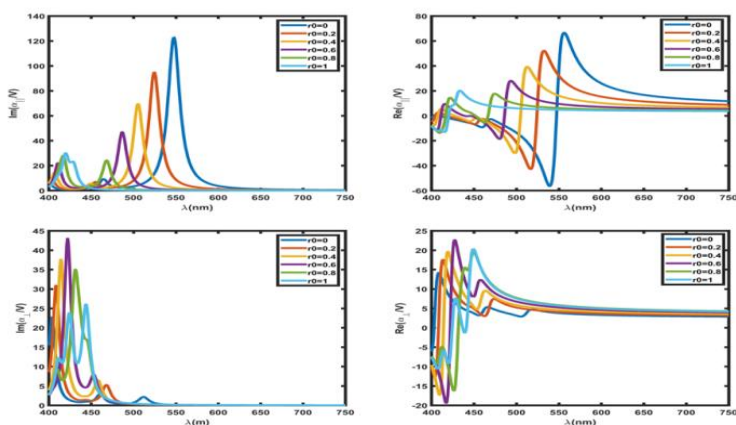
۳. نتایج و بحث

الف. اثر پارامتر برش بر روی قطبش‌پذیری

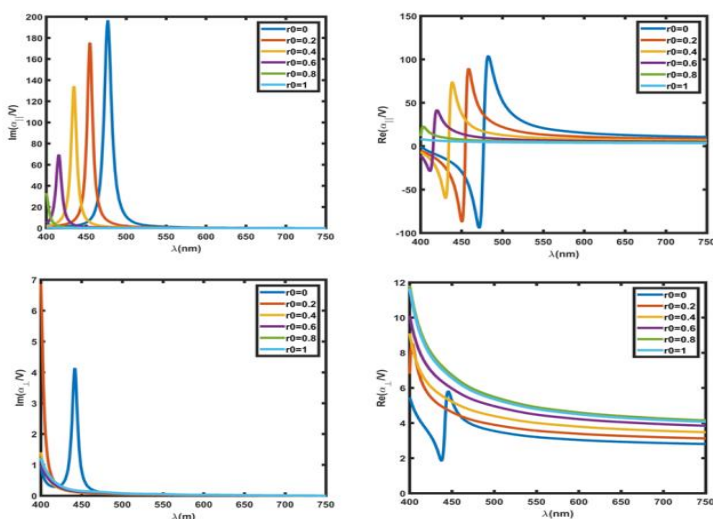
در این بخش اثر تغییر پارامتر (پارامتر برش) را در قطبش‌پذیری بررسی می‌کنیم. لازم است ذکر کنیم، $r_0 = 1 (D = R)$ مربوط به یک کره روی لایه و $r_0 = 0 (D = 0)$ مربوط به نیمکره روی لایه است. در محاسبات عددی، محیط اطراف هوا در نظر گرفته شده است که تابع دی‌الکتریک آن $\epsilon_1 = 1$ است و تابع دی‌الکتریک لایه تخت زیرین $\epsilon_2 = 3.13$ است. مقادیر عددی دیگر پارامترها با توجه به استفاده از طلا و نقره در این مقاله عبارتند از: $w_p^{Au} = 8.9 eV$ ، $w_p^{Ag} = 9.2 eV$ ، $\epsilon_{\infty}^{Au} = 6.9$ ، $\epsilon_{\infty}^{Ag} = 0.07 eV$ ، $g^{Au} = 0.02 eV$ و $g^{Ag} = 3.7$ [۸].

شکل‌های ۲ و ۳ مؤلفه‌های موازی و عمودی تانسور قطبش‌پذیری را بر حسب طول موج در بازه 400nm - 750nm برای مقادیر مختلف پارامتر r_0 به ترتیب برای نانوذره طلا و نقره بر روی زیرلایه نشان می‌دهد. در شکل‌های ۲ و ۳ قسمت موهومی $a (Im(a))$ بیانگر جذب و بخش حقیقی آن $(Re(a))$ نشان‌دهنده پاشندگی است. در محدوده طول مرئی هر دو مؤلفه موهومی و

حقیقی قطبش پذیری موازی و عمودی نانوذره رفتار تشدیدي دارند. نتایج به دست آمده حاکی از آن است که تغییر پارامتر r_0 (پارامتر برش) اثر قوی در قطبش پذیری دارد. با افزایش پارامتر برش، مؤلفه موازی قطبش پذیری، $\text{Re}(a_{\parallel})$ و $\text{Im}(a_{\parallel})$ ، کاهش یافته و قله تشدید به سمت طول موج های کوتاه تر جابه جا می شود و بنابراین انتقال آبی اتفاق می افتد. این رفتار بیانگر آن است که هر گونه تغییر در پارامتر برش به جابجایی طول موج می انجامد.



شکل ۲. اثر پارامتر برش بر روی قطبش پذیری برای یک نانوذره طلا بر روی یک لایه دی الکتریک.

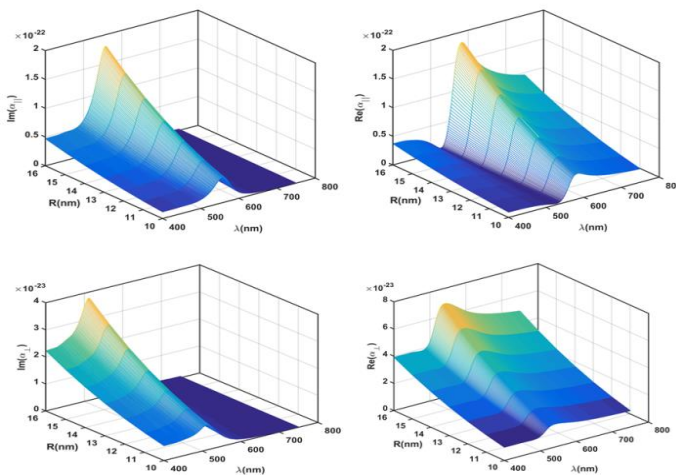


شکل ۳. اثر پارامتر برش بر روی قطبش پذیری برای یک نانوذره کروم نقره بر روی یک لایه دی الکتریک.

همانگونه که نتایج نشان می‌دهد این رفتار برای مؤلفه عمودی قطبش پذیری متفاوت است. با افزایش پارامتر r_0 ، قله تشدید مؤلفه عمودی قطبش پذیری جابه‌جایی کمتری نسبت به مؤلفه موازی دارد، به طوری که قله تشدید پلاسمونی به سمت طول موج‌های کوتاه‌تر جابه‌جا شده و انتقال قرمز برای مؤلفه عمودی اتفاق می‌افتد. در همه موارد با افزایش پارامتر r_0 که به برش نانوذره و در نتیجه کاهش تعداد الکترون‌های رسانش در نانوذره فلزی دارای تقارن کروی می‌انجامد، شدت قله تشدید کاهش می‌یابد. به دلیل آنکه نانوذرات نقره و طلا طیف جذبی در ناحیه مرئی دارند، اهمیت فوق‌العاده‌ای در کاربردهای اپتیک پلاسمونیک به علت اتلاف ناچیز و تنظیم‌پذیری طول موج تشدید دارند. به عبارت دیگر، فرکانس نوسان پلاسمون برای نانوذرات طلا (در ناحیه بالای طیف) و نقره (در ناحیه پایین طیف) در ناحیه مرئی رخ می‌دهد، که به ظهور طیف جذبی قوی در این ناحیه می‌انجامد. همچنین، نانوذرات نقره و طلا که قله تشدید پلاسمونی آن‌ها در بازه طول موجی 400nm - 750nm واقع است، گزینه مناسبی برای طراحی و ساخت حسگرها و ادوات نوری بر پایه پلاسمونیک هستند [۱۰، ۱۱]. در واقع به این دلیل که فرکانس پلاسمونیک نقره از طلا بیشتر است، وقتی که جنس نانوذره نقره است، جذب بیشینه و پاشندگی کمینه است.

ب. اثر اندازه نانوذره فلزی بر روی قطبش پذیری

شکل ۴ قطبش‌پذیری را بر حسب طول موج و شعاع نانوذره نشان می‌دهد.



شکل ۴. قطبش‌پذیری یک نانوذره فلزی قرار گرفته بر روی یک زیرلایه دی‌الکتریک

بر حسب طول موج و شعاع نانوذره فلزی

نتایج به دست آمده حاکی از آن است که با افزایش شعاع نانوذره طلا، قله تشدید بلندتر می‌شود. علت آن است که با افزایش اندازه نانوذره فلزی، الکترون‌های بیشتری در هیبریداسیون پلاسمون مشارکت می‌کنند که سبب افزایش قله تشدید می‌شود. همچنین با افزایش شعاع ذره، قله تشدید به سمت طول موج‌های بلندتر جابه‌جا می‌شود که انتقال قرمز نام دارد. علاوه بر این، پهنای باند تشدید با تغییر شعاع نانوذره پلاسمونیک قرار گرفته بر روی زیرلایه دی‌الکتریک نیز تغییر می‌کند. همانگونه که نتایج نشان می‌دهد جابه‌جایی فرکانسی رخ می‌دهد، که از این خاصیت می‌توان برای ساخت نانوحسگر استفاده کرد.

۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله، قطبش‌پذیری یک نانوذره پلاسمونیک بر روی زیرلایه دی‌الکتریک مسطح برای مؤلفه‌های موازی و عمودی تانسور قطبش‌پذیری بررسی شد. نتایج عددی در نمودارها حاکی از آن است که با افزایش اندازه نانوذره فلزی، قله تشدید افزایش می‌یابد و جابه‌جایی فرکانسی اتفاق می‌افتد. علاوه بر این نشان داده شده است که پارامتر برش نقش مهمی در خواص نوری نانوذرات پلاسمونیک دارد و باعث تغییر شدت قله تشدید و جابه‌جایی طول موج تشدید آن می‌شود. همچنین پهنای کامل در نصف ماکزیمم نیز به شدت تحت تأثیر تغییر شعاع ذره و پارامتر برش قرار می‌گیرد. از آنجا که فلزات پلاسمونیک همچون طلا و نقره کاربردهای مختلفی دارند، اثر آن‌ها در خواص نوری نانوذره فلزی در زیرلایه دی‌الکتریک نیز بررسی شد.

مراجع

- [1] K. L. Kelly, E. Coronado, L. L. Zhao, and G. C. Schatz, "The Optical Properties of Metal Nanoparticles: The Influence of Size, Shape, and Dielectric Environment," *J. Phys. Chem. B*, **107** (2003) 668-677.
- [2] G. Doria, J. Conde, B. Veigas, L. Giestas, C. Almeida, M. Assuncao, J. Rosa and P. V. Baptista, "Noble Metal Nanoparticles for Biosensing Applications". *Sensors*, **12** (2012) 1657-1687.
- [3] M. M. Wind, J. Vliieger and D. Bedeaux, "The polarizability of a truncated sphere on a substrate I", *Physica*, **141A** (1987) 33-57.
- [4] M. M. Wind, J. Vliieger and D. Bedeaux, "The polarizability of a truncated sphere on a substrate II", *Physica*, **143A** (1987) 164-182.
- [5] M. M. Wind, J. Vliieger and D. Bedeaux, "The polarizability of truncated spheres and oblate spheroids on a substrate: comparison with experimental results", *Thin Solid Films* **164** (1988) 57-62.

- [6] M. Haarmans and D. Bedeaux, The polarizability and the optical properties of lattices and random distributions of small metal spheres on a substrate, *Thin Solid Films* **224** (1993) 117-131.
- [7] I. Simonsen, R. Lazzari, J. Jupille and S. Roux, "Numerical modeling of the optical response of supported metallic particles", *Phys. Rev. B*, **61** (2000) 7722.
- [8] P. R. West, S. Ishii, G. V. Naik, N. K. Emani, V. M. Shalaev, and A. Boltasseva, "Searching for better plasmonic materials", *Laser Photonics Rev*, **4** (2010) 795-808.
- [9] Y. Wanga, E. W. Plummerb and K. Kempa, "Foundations of Plasmonics", *Advances in Physics*, **60** (2011) 799–898.
- [10] K. S. Lee and M. A. El-Sayed, "Gold and Silver Nanoparticles in Sensing and Imaging: Sensitivity of Plasmon Response to Size, Shape, and Metal Composition", *J. Phys. Chem. B*, **110** (2006) 19220-19225.
- [11] S. Lal, S. Link and N. J. Halas , "Nano-optics from sensing to waveguiding", *Nature photonics*, **1** (2007) 641-648.