

بررسی خواص پلاسمونیکی و ترموپلاسمونیکی نانوذرات دوتایی شش گوشی نامتقارن ناهمگن و نقاط ایزوسبستیک

فهيمه نوري^۱، عباس آذريان²

^{1*}مربی، فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم، قم، ایران ² دانشیار، فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه قم، قم، ایران

چکیدہ

اطلاعات مقاله

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۱/۱۲ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۹/۱ تاریخ چاپ: ۱۴۰۳/۹/۲۱

شاپای چاپی: 493x-2588-2588 شاپای الکترونیکی: 4921-2588

* نویسنده مسئول <u>f.noori3305@gmail.com</u>



در سال های اخیر، علاقهروزافزونی به استفاده از نانوذرات پلاسمونیک به عنوان نانومنابع

واژگان كليدى: ترموپلاسمونيك، نانوذرات دوتايى ناھمگن، انرژى كوپل شدگى، نقاط ايزوبستيك

مقدمه

هنگامی که سطح یک نانوذره فلزی تحت تابش نور قرار می گیرد، الکترونهای رسانایی روی سطح آن بهطور جمعی شروع به نوسان می کنند که پلاسمون نامیده می شود، این خواص پلاسمونیک منحصر به فرد نانوذرات فلزی در سالهای اخیر نانوذرات فلزی به دلیل خواص نوری و حرارتی مورد توجه زیادی قرار گرفتهاند.

نوسانات الکترونها در نانوذره ممکن است غیر انتشاری باشند که پلاسمون سطحی جایگزین (LSP) نامیده می شوند [۱] و اگر فرکانس نور تابیده شده با فرکانس پلاسمون سطحی نانوذره برابر

باشد، در این صورت پدیده تشدید پلاسمون سطحی (SPR) رخ میدهد که باعث افزایش پراکندگی و جذب نور توسط نانوذره می شود [۲].

جذب نور فرودی توسط نانوذرات منجر به تولید گرما در ابعاد نانومتری میشود که با تنظیم فرکانس و شدت نور فرودی میتوان گرمای تولید شده توسط نانوذرات را از راه دور کنترل کرد[۳]. این خاصیت نانوذرات کاربردهای مختلفی در زمینههایی مانند فیزیک [۴]، سلولهای خورشیدی/ترموفوولتائیک و ترموالکتریک [۵]، ضبط

مغناطیسی با کمک گرما برای ذخیره سازی داده های با چگالی بالا [۶]، شیمی [۷–۹]، زیستشناسی [۱۰،۱۱]، حسگرهای زیستی [۱۲]، پزشکی [۱۳–۱۶] و فتوتراپی در درمان سرطان [۱۹–۱۹] دارد. لازم به ذکر است که این فرآیند تنها به تولید گرما ختم نمی شود، بلکه شامل انتقال گرما از نانوذرات به محیط اطراف نیز می باشد [۲۰].

نانوذرات فلزی بیشترین نور را در حالت تشدید پلاسمونیک جذب خواهند کرد و بنابراین میتوان انتظار داشت که گرمای تولید شده در فرکانس تشدید پلاسمونیک بالاترین مقدار ممکن را داشته باشد. طول موج تشدید پلاسمونیک به عوامل مختلفی مانند نوع نانوذرات و محیط اطراف، شکل و اندازه نانوذرات، ماده تشکیل دهنده نانوذرات تأثیر پارامترهای فوق را بر روی خواص ترموپلاسمونیک نانوذرات بررسی کردهاند. نتایج اخیر نشان میدهد که داشتن گوشهها و لبههای تیز در مورفولوژی نانوذرات باعث افزایش حداکثر میدان الکتریکی و همچنین گرمای تولید شده توسط نانوذرات می شود [1]. از سوی دیگر، قرار دادن نانوذرات در نزدیکی یکدیگر به دلیل برهمکنش میدانهای الکتریکی موضعی هر نانوذره با نانوذرات دیگر

فلزات نجیب به ویژه طلا، نقره و مس در مقایسه با مواد دیگر در پلاسمونیک کاربرد فراوان تری دارند. از آنجایی که بخش موهومی تابع دیالکتریک این فلزات در نواحی مادون قرمز (NIR)، مرئی و فرابنفش (UV) قرار دارد، در نتیجه طول موج تشدید پلاسمونیک در این نواحی و مقدار جذب در این مناطق افزایش می یابد و اگر از مجموعه دادههای جانسون و کریستی استفاده شود [۲۲]، شبیه سازیهای نوری آنها با نتایج تجربی مطابقت بسیار خوبی دارند [۳۲]. از میان فلزات نجیب، طلا در بسیاری از کاربردهای پلاسمونیک، انتخاب می شود. زیرا تشدید پلاسمونی آن نه تنها در محدوده مرئی، بلکه در NIR قرار دارد و بافتهای انسانی جذب ضعیفی در این رنج طبف دارند و مدای یانده همچنین

طیفی دارند و برای کاربردهای پزشکی مناسب هستند، همچنین زیست سازگار است و سمیت سلولی کمی دارد، در شیمی طلا کاربرد فراوانی دارد زیرا طلا در حضور اکسیژن اکسید نمی شود و

شبیهسازیهای نوری مربوط به نانوذرات طلا، معمولاً با نتایج تجربی مطابقت بسیار خوبی دارند ، به شرطی که از مجموعه دادههای جانسون و کریستی استفاده شود [۲۴].

مس و نقره رسانایی بالاتری نسبت به طلا از خود نشان میدهند و میتوانند مواد پلاسمونیک عالی باشند[۲۵]. استفاده از نقره در پلاسمونیک رایج است [۲۶]. اما تشدید پلاسمونی آن معمولاً از آنچه که به صورت تجربی مشاهده شده، بیشتر تخمین زده می شود. این اختلاف ناشی از اکسیداسیون نقره است. [۲۷ و ۲۸] درنتیجه کنترل آن سخت است و به شدت رزونانس پلاسمونی را تخریب میکند. به این دلیل، استفاده از خصوصیات برجسته پلاسمونی نقره در عمل سخت است [۲۹].

اعداد بدون بعد فارادی و ژول پارامترهای توصیف کننده توانایی نانوذره در افزایش میدان الکتریکی و توانایی نانوذره برای تولید گرما به ترتیب هستند. روابط توصیف کننده این کمیتهای بدون بعد به این صورت هستند:

$$Fa = |E_{max}/E_0|^2 \tag{1}$$

$$Jo = \frac{e\varepsilon''}{n_s} \left| \frac{E_{in}}{E_0} \right|^2 \tag{7}$$

که در آنها E_{max} بیشینه میدان موضعی، E_0 میدان الکتریکی موج الکترومغناطیسی فرودی، e بار الکتریکی، $*^{n}$ قسمت موهومی تابع دی الکتریک ماده، n_s ضریب شکست محیط و E_i میدان الکتریکی در قسمت مورد بررسی است[۱]

در جدول (۱) عدد ژول و فارادی برای فلزات طلا، نقره و مس آورده شده است. با توجه به اینکه عدد ژول و فارادی طلا و مس نزدیک به هم هستند و انتظار رفتاری مشابه در آنها داریم.

جدول ۱: اعداد بدون بعد ژول (<i>Jo⁰) و</i> فارادی (<i>Fa⁰) د</i> ر طول								
[۱] $\lambda_{res}(nm)$ موجهای تشدید								
$T_s(^{\circ}C)$	Jo ⁰	Fa ⁰	$\lambda_{res}(nm)$					
1064	6.32	19.6	528	gold				

961	52.0	118	355	silver
1085	2.65	15.2	585	copper

بنابراین بر اساس جدول (۱) کاملا طبیعی به نظر میرسد که در میان مواد و هندسههای مختلف نانوذرات، به دنبال شرایطی باشیم که منجر به وقوع قله تشدید پلاسمونی در ناحیه مادون قرمز گردد[۳۰].

سادهترین توصیف حالتهای پلاسمون جمعی، برهمکنش دوقطبی-دوقطبی در طول جفتشدن دو نوسانگر مجاور است. برای دو کرهی فلزی مجاور، یک تشدید انرژی پایین تر مربوط به دو دوقطبی هم تراز طولی است که منجر به یک پیک جذب قوی در طیف نوری می شود. برای رزونانس انرژی بالاتر، دوقطبیهای جفت شده یکدیگر را خنثی می کنند، در نتیجه تشدید با یک گشتاور دوقطبی خالص صفر ایجاد می شود که با نور فرودی برهمکنش نمی کند و در طیف جذب نوری مفتربهای مرتبه بالاتر نیز می توانند نقش مهمی در حالتهای بلاسمون جمعی ایفا کنند[۲۱] که کاربردهای متعددی مانند رزونانسهای فانو [۳۲]، نانودیود نوری [۳۳] دارا می باشد که توسط تشدید پلاسمونیک نامتقارن در آرایههای مختلف از نانوذرات دوتایی مانند نانو نوارهای دوتایی فلزی [۴۳ و ۲۵]، نانودیسک دوتایی [۳۶

از آنجا که قرار دادن این نانوذرات در کنار یکدیگر با مواد مختلف می تواند به تنظیم طول موج تشدید در ناحیه دلخواه کمک نماید و در کارهای تجربی ممکن است از نانوذرات با ترکیب مختلف از مواد استفاده شود بنابراین در مقاله حاضر به بررسی تاثیر جنس نانوذرات بر روی اندازه تغییرات میدان الکتریکی و دمای موضعی که توسط نانوذرات ایجاد می شود، پرداخته شده است.

بررسی پدیدههای ترموپلاسمونیک نیازمند یک چارچوب تئوری است که در آن از اپتیک و ترمودینامیک استفاده می شود در ادامه مبانی نظری تولید گرما توسط نانوذرات به اختصار بیان می گردد.

۱- روش تحقیق

(٣)

مقدار نور جذب شده توسط نانوذرات به سطح مقطع جذب([.]] آن وابسته است که با رابطه زیر بیان می شود] ۱

$$\sigma_{abs} = \frac{k}{\varepsilon_0 |E_0|^{\mathsf{r}}} \int Im(\varepsilon_\omega) |E(r)|^{\mathsf{r}} dr$$

در این رابطه $\frac{n\omega}{c}$ بردار موج، n ضریب شکست محیط اطراف، ω تابع دی الکتریک ماده نانوذره، E_0 دامنه میدان الکتریکی نور فرودی و (r) میدان الکتریکی کل است. ضمن آنکه انتگرال بر روی حجم نانوذره گرفته می شود. زمانی که نانوذرات فلزی در معرض میدان الکترومغناطیسی قرار می گیرند، بارهای آزاد نانوذرات با فرکانس میدان الکتریکی تابانده شده، نوسان می کنند. این نوسان الکتریکی که چیزی جز یک جریان الکتریکی در یک فلز نیست، باعث اتلاف انرژی می شود که به اثر گرمایش ژول معروف است. از این رو، چگالی توان گرمایی کل در نانوذرات فلزی در هر زمان

$$Q = \frac{\omega}{\tau} \varepsilon_0 Im(\varepsilon) \int |E(r)|^{\tau} dr \qquad (f)$$

از سوی دیگر گرما را میتوان به صورت تابعی از سطح مقطع جذب بیان کرد :

$$Q(r) = \sigma_{abs} I \qquad (\Delta)$$

که در این رابطه $I = nc \varepsilon_0 E_0^2 / \tau$ شدت تابش موج فرودی است. نانوذرات را در محیطی با رسانندگی گرمایی \mathcal{K} چگالی ρ و ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت c_p در نظر می گیریم که این پارامترها ممکن است به مکان نیز وابسته $\delta T(t,r)$ باشند. در چنین محیطی، یک تغییر دمای موضعی $\delta T(t,r)$ منجر به تغییر موضعی تراکم انرژی گرمایی $\delta u_{th}(t,r)$

(انرژی در واحد حجم) میشود. این کمیتها توسط رابطه زیر به هم مربوط هستند:

$$u_{th}(r,t) = \rho c_p \delta T \tag{9}$$

علاوه بر این، مطابق با قانون فوریه بردار چگالی شار گرمایی $J_{th}(r,t)$ متناسب با گرادیان دما است:

$$J_{th}(r,t) = -\kappa \nabla T \tag{Y}$$

به کمک روابط بالا و پایستگی انرژی، رابطه تغییرات فضا-زمانی دما به صورت زیر بدست خواهد آمد[۱]:

$$\rho c_P \delta_t T - \kappa \nabla^{\mathsf{Y}} T = q \tag{A}$$

می توان این معادله را برای نانوذرات مختلف حل کرد و معادله توزیع دما در اطراف نانوذرات را به دست آورد. لازم به ذکر است که چگالی توان حرارتی *q* فقط در داخل نانوذرات فلزی غیر صفر در نظر گرفته شده و در خارج از نانوذرات فلزی (محیط اطراف) معادله همگن انتشار گرما حل می گردد [۲۵].

اگر نانوذرات در یک نانوذره دوتایی ۱ که نا متقارن است، به اندازه کافی کوچک فرض شوند، بارهای الکتریکی آنها یک دوقطبی الکتریکی تشکیل میدهند. میدانیم که میدان الکترومغناطیسی نیروی لورنتس را بر دوقطبیهای الکتریکی اعمال میکند. از این رو، هر الکترون با بار e- در فاصله r از تعادل خود حرکت میکند.

اگر میدان محلی دوقطبیها نادیده گرفته شود، معادله حرکت الکترونها در نانوذرات دوتایی که توسط میدان الکتریکی خارجی نوسانی E(r, t) به نواسان واداشته میشوند، برابر است با:

$$\begin{cases} m\left(\frac{d^{2}r_{1}}{dt^{2}}\right) + \gamma_{1}\frac{dr_{1}}{dt} + m\omega_{1}^{2}r_{1} + m\omega_{c}^{2}(r_{1} - r_{2}) = -eE\left(r_{1}, t\right) & (\mathbf{9})\\ m\left(\frac{d^{2}r_{2}}{dt^{2}}\right) + \gamma_{2}\frac{dr_{2}}{dt} + m\omega_{2}^{2}r_{2} + m\omega_{c}^{2}(r_{2} - r_{1}) = -eE\left(r_{2}, t\right) \end{cases}$$

معادله اول مربوط به الکترونها در نانوذره سمت راست و معادله دوم مربوط به الکترونهای نانوذره سمت چپ است و به علت اینکه نانوذرات دارای ارتفاعهای متفاوت هستند. الکترونهای آنها با بسامد زاویهای متفاوت (01 و 02) نوسان میکنند. در این معادلات m

حال با فرض اینکه میدان الکترومغناطیسی اعمال شده مطابق با عامل (e^(-iwt) تغییر کند. از آنجایی که جابهجایی الکترون در مقایسه با طول موج کوچک است، حرکت الکترون وابستگی زمانی یکسانی با میدان دارد، با حل مستقیم معادلات روابط زیر برای 11 و 12 استخراج می گردد:

$$\begin{cases} r_{01} = \frac{e}{m} E_0 \frac{(\omega_c^2 + \beta_2)}{(\beta_1 \beta_2 - \omega_c^4)} \\ r_{02} = r_{01} \frac{\beta_1}{\omega_c^2} - \frac{e}{m\omega_c^2} E_0 \end{cases}$$
(1.)

که در آنها مقادیر
$$eta_1$$
 و eta_2 به صورت زیر است:

$$\begin{cases} \beta_1 = \left(\omega^2 + \omega_1^2 + \omega_c^2 - \frac{\gamma}{m}(i\omega)\right) & (11) \\ \beta_2 = \left(\omega^2 + \omega_2^2 + \omega_c^2 - \frac{\gamma}{m}(i\omega)\right) & \end{cases}$$

چگالی پلاریزاسیون ماکروسکوپی **P** از رابطه زیر بدست می آید:

$$P = -\frac{N}{V}e(r_1 + r_2) = \alpha E_0 \tag{11}$$

که در آن α ، N و V به ترتیب تعداد دوقطبی ها، قطبش پذیری و حجم هستند و مقدار قطبش پذیری از رابطهی (۱۳) بدست میآید:

$$\begin{aligned} \alpha &= -\frac{N}{V} \frac{e^2}{m} \Biggl[-\frac{1}{\omega_c^2} + \frac{(\omega_c^2 + \beta_2) \left(\frac{\beta_1}{\omega_c^2} + 1\right)}{(\beta_1 \beta_2 - \omega_c^4)} \Biggr] \end{aligned}$$
(1)
$$= -\frac{N}{V} \frac{e^2}{m\omega_c^2} \Biggl[\frac{\omega_c^2 (\beta_1 + \beta_2) + 2\omega_c^4}{(\beta_1 \beta_2 - \omega_c^4)} \Biggr]$$

با قرار دادن مقادیر eta_1 و eta_2 در رابطه بالا خواهیم داشت:

3)

(14)

$$\alpha = -\frac{N}{V} \frac{e^2}{m\omega_c^2} \times \frac{\omega_c^2 (2(\omega^2 + \omega_c^2 - \frac{Y}{m}(i\omega)) + \omega_1^2 + \omega_2^2) + 2\omega_c^4}{(\omega_c^2)^2 + (\frac{Y}{m}(i\omega))^2 + (\omega^2 + \omega_c^2)(\omega_1^2 + \omega_2^2) + (\omega_1^2\omega_2^2) + i[-2(\frac{Y}{m}(\omega))(\omega^2 + \omega_c^2) - \frac{Y}{m}(\omega)(\omega_1^2 + \omega_2^2)}$$

از طرف دیگر میدانیم رابطه قطبش پذیری و سطح مقطع جذب به این صورت است:

$$C_{\rm abs} = \frac{K}{\varepsilon_0} {\rm Im}(\alpha) \tag{10}$$

با توجه به معادله فوق، زمانی که مخرج قسمت موهومی قطبش پذیری حداقل باشد، شرط تشدید برآورده می شود، از این رو در سه فرکانس انتظار جذب بیشتری داریم که یکی از آنها نسبت به بقیه مقدار کمتری دارد:

(17)

$$\omega_{\pm} = \sqrt{-((\omega_c^2 - \frac{\gamma^2}{2m^2} + \frac{\omega_1^2 + \omega_2^2}{2})) \pm \sqrt{(\omega_{min}^2 + \frac{\gamma^2}{2m^2})^2 - (\omega_c^2 \omega_2^2 + \omega_c^2 \omega_1^2 + (\omega_1^2 \omega_2^2) + \omega_c^4)}}$$

 $\omega_{min} = \int \omega_c^2 + \frac{\omega_1^2 + \omega_2^2}{2}$

لذا انتظار داریم که یک شکاف در مد پلاسمونی بدلیل کوپلشدگی میان نانوذرات نامتقارن رخ دهد. همچنین مقدار انرژی کوپلشدگی با رابطه زیر بدست می آید:

$$\Delta E = \frac{\hbar c}{\lambda^2} \Delta \lambda \tag{11}$$

توزیع میدان نزدیک نوری برخی از نانوساختارهای فلزی نامتقارن به شدت به قطبش نور فرودی وابسته است، در حالی که توان جذب شده و در نتیجه افزایش دما وابسته به قطبش نیست. این نوع نانوساختارها در سال ۲۰۱۷م معرفی شدند و آنها را نانوساختار ایزوبستی۲ فتوترمال (PIN) نامیدند[۴۰]. ایزوبستیک مفهومی است که میتواند کاربردهای متعددی در پلاسمونیک داشته باشد. استفاده در نانوشیمی، ضبط مغناطیسی به کمک گرما و یا تشکیل ریزحبابها، تنها برخی از موارد کاربرد نقاط ایزوبستیک هستند[۴۱]. در این مقاله به نقاط ایزوبستیک ساختار پرداخته میشود.

۲- یافته ها

در این مقاله سطح مقطع جذب نانوذرات به روش المان محدود در حوزه زمان(FDTD) محاسبه و سپس توزیع دما بر روی سطوح و محیط اطراف نانوذرات به ازای طول موج تشدید پلاسمونی طیف جذب نانوذرات محاسبه شده است[

در تمام شبیهسازیها از تابش موج تخت با طول موج بین در تمام شبیهسازیها از تابش موج تخت با طول موج بین 200 تا 200 با شدت $\frac{kW}{m^2}$ استفاده شدهاست زیرا در فلزات نجیب مانند نقره طول موج تشدید پلاسمون سطحی در محدوده مرئی و مادون قرمز نزدیک واقع میشود، ضمن آنکه نانوذرات بر روی زیرلایه ای از جنس آلومینا و در محیط هوا در قرار دارند.

نانوذرات شبیه سازی شده به صورت دوتایی (دایمر) و متشکل از دو نانوذره شش ضلعی با شعاع محاطی $L_1 = 60 \text{ nm}$ و ضخامت t = 12 nm مستند و درون نانوذرات حفرهای با شعاع محاطی $L_T = 40 \text{ nm}$ قرار دارند که فاصله مرکز حفره از مرکز نانوذره R = 18 nm است. همچنین قطبش میدان الکتریکی در جهت محور x ها مطابق با شکل(۱) در نظر گرفته شده است.



54

شکل ۱: تصویر شماتیک پارامترهای هندسی نانوذرات شبیه سازی شده، جهت تابش و قطبش نور فرودی.

یکی از شرایط یا پارامترهایی که میتوان در نانوذرات دوتایی تغییر داد و میدان و دما را بررسی کرد جنس یا ماده نانوذرات است. ممکن است نانوذرات هر دو از یک ماده تشکیل شده باشند که به این نانوذره دوتایی نانوذره دوتایی همگن^۳ گفته میشود و یا جنس نانوذرات متفاوت باشد که به این نانوذرات دوتایی ناهمگن^۴ گفته میشود. ما در اینجا به بررسی نانوذرات دوتایی ناهمگن از جنس طلا، نقره و مس میپردازیم.

Au- مطلع جذب نانوذرات دوتایی ناهمگن از جنس -Au Ag و Ag-Cu و Au-Cu را نمایش می دهد. سه مد پلاسمونی عمده در طیف جذب مشاهده می شود. در مد اول و دوم، قله طیف Ag-Cu ارتفاع بیشتری نسبت به بقیه دارد و جابه جایی آبی در طیف نانوذرات دوتایی ناهمگن که دارای نقره هستند دیده می شود. اگر چه رفتار مد دوم شبیه به مد اول است ولی قله جذب نانوذرات دوتایی ناهمگن Au-Ag نسبت به بقیه بلندتر است. در مد سوم ترتیب ارتفاع قله ها شبیه به مد دوم است و جابه جایی آبی خاصی دیده نمی شود. پهنای پیک در نانوذرات دوتایی ناهمگن در مدهای مختلف تقریبا شبیه هم است و مقدار کمی نانوذرات دوتایی ناهمگن دارای نقره تیزتر و باریکتر هستند.



شکل ۲: مدهای مختلف سطح مقطع جذب نانوذرات دوتایی ناهمگن از جنس Au-Ag و Ag-Cu و Au-Ag.

با تغییر قطبش نور می توان میدان الکتریکی و تغییرات دما را در این نانوذرات دوتایی ناهمگن مطالعه کرد. شکل (۳) طیف جذب این نانوذرات دوتایی ناهمگن را در قطبش صفر (جهت میدان الکتریکی موازی با محور نانوذرات دوتایی ناهمگن، L) و قطبش ۹۰ درجه (جهت میدان الکتریکی عمود بر محور نانوذرات دوتایی ناهمگن، T) نشان می دهد. شکل (۳-۵) سطح مقطع طیف جذبی نانوذرات دوتایی ناهمگن Ag-Cu را در قطبش L و T نشان می دهد. در قطبش L سه پیک یا سه حالت پلاسمون به ترتیب در طول موج های ۱۸۵۰، ۱۱۵۰ و ۲۹۲ نانومتر و در قطبش T دو حالت در طول موج های

در مورد نانوذرات دوتایی ناهمگن Au-Ag (۳-b) در قطبش L، سه قله یا سه حالت پلاسمون به ترتیب در طول موج های ۲، ۱۸۵۰، ۱۸۵۰ و ۸۰۶ نانومتر ظاهر می شوند و در قطبش T، دو حالت در طول موج های ۱۳۴۰ دیده می شود و ۸۳۵ نانومتر در نهایت، در نانوذرات دوتایی ناهمگن Au-Cu مانند دیگر نانوذرات دوتایی ناهمگن، شاهد سه قله در قطبش L و دو قله در قطبش T هستیم که در شکل(c-3) مشخص شده است.

در بررسی طیف سطح مقطع جذب دایمرهای مختلف، طول موجهایی را میتوان مشاهده کرد که در آنها با تغییر قطبش نور، میزان جذب تغییر نمی کند. شکل (۳) با نقاط زرد، نقاط ایزوسبستی نانوذرات دوتایی ناهمگن نشان داده شده است. به دلیل مورفولوژی و عدم تقارن منحصر به فرد در نانوذرات دوتایی مورد بررسی در این کار، تعداد نقاط ایزوبستیکی نسبتا زیادی است.

اتفاق جالب دیگری که در طیف جذب نانوذرات دوتایی ناهمگن رخ داد، شکاف کوپل شدگی است. در طیف جذب با تغییر قطبش از حالت عمودی به موازی دو قله به سه قله شکافته شده است و حداقل انرژی کوپلینگ در نانوذرات

⁴ Hetrodimer

دوتایی Ag-Cu برابر با Ag-Cu، برای نانوذرات دوتایی دوتایی Ag-Cu برابر با Ag-Cu و نهایتا برای نانوذرات دوتایی Au-Ag و نهایتا برای انوذرات دوتایی Au-Ag برابر با Au-Cu مطابق با رابطه (۱۸) بهدست آمده



Ag- ،Au-Ag شكل ۳: سطح مقطع طيف جذب نانوذرات دوتايي ناهمگن Ag- ،Au-Ag و Cu
 و Cu
 و Cu
 مطح مقطع جذب نانوذرات دوتايي ناهمگن Ag- سطح مقطع جذب نانوذرات دوتايي ناهمگن Cu
 Cu در قطبش L و T. - سطح مقطع جذب نانوذرات دوتايي ناهمگن Au-Ag
 Au-Ag در قطبش L و T.

شکل (۴) نسبت میدان الکتریکی موضعی به میدان الکتریکی اولیه برای سه مد نانوذرات دوتایی ناهمگن در پلاریزاسیون L و T نمایش میدهد. همانگونه که از نمودار مشخص است مقدار میدان الکتریکی نسبی در قطبش L مقدار بیشتری نسبت به میدان در قطبش T دارد. بیشترین مقدار میدان نسبت به میدان در قطبش T دارد. بیشترین مقدار میدان نسبت به میدان در قطبش T مادد. بیشترین مقدار میدان نسبت به میدان در قطبش T دارد. بیشترین مقدار میدان نسبت به میدان در قطبش T دارد. بیشترین مقدار میدان مقدار تغییرات انرژی کمتری نسبت به بقیه مدها دارند.



شکل ۴: نمودار تغییرات میدان $\left|rac{E}{F_0}
ight|_{max}$ در مدهای نانوذرات دوتایی ناهمگن در قطبشهای L و T.

همچنین شکل (۵) توزیع بیشینه میدان الکتریکی نسبی مد اول نانوذرات دوتایی ناهمگن Ag-Cu در پلاریزاسیون L و T نمایش میدهد. همان گونه که در نمودار شکل (۴) دیده میشود در این مد نانوذرات دوتایی ناهمگن بیشترین تغییرات میدان را دارند و توزیع میدان در نانوذرات دوتایی کاملا با میدان را دارند و توزیع میدان در نانوذرات دوتایی کاملا با جهت قطبش مطابقت دارد. بیشترین تغییرات میدان در قطبش L در گپ و در قطبش T در نقاط تیز بالا و پایین نانوذرات دوتایی اتفاق می افتد.



شکل ۵: توزیع میدان الکتریکی نسبی در نانوذرات دوتایی ناهمگن -Ag Cu در قطبش موازی L و عمودی T.

جدول (۲) مقدار بیشینه تغییرات دما در سه مد پلاسمونی نانوذرات Au-Cu و Ag-Cu ، Au-Ag در قطبش J و دوتایی ناهمگن Au-Cu و Ag-Cu ، Au-Ag و X و X در قطبش J و T و همچنین در طول موج ۲۸۵ نانومتر که یک لیز پرکاربرد در پلاسمونیک است، آورده شده است. بیشینه مقدار تغییرات دما ΔT_{max} مربوط به نانوذرات دوتایی ناهمگن Au-Ag با مقدار $= X_{max}$ مربوط به نانوذرات دوتایی ناهمگن Au-Ag با مقدار ΔT_{max} است و البته به علت جذب نور بالای مدهای پلاسمونی انتظار دماهای بالاتر در این مدها می رود که کاملا داده های بدست آمده مطابق با انتظارات است و در طول موج ۲۸۵ نانومتر تغییرات دمایی کمتری را شاهد هستیم.

جدول ۲: تغییرات دما در نانوذرات دوتایی ناهمگن Ag-C -Ag-Cu ،Au و Au-Cu در قطبش L و T. A*T_{max}* .**a**

$\lambda = 785 nm$	M	ode	Mode	Moc	le		
		3	2	1			
	15	67		163	417	A	Au-Ag
	40	55		100	147	A	Ag-Cu
	47	3	39	107	165	A	Au-Cu
T در قطبش ΔT _{max} . b							
-	$\lambda = 785 n$		Mode	Мо	de		-
		ım	2	1			
	1	7	123	160	A	u-Ag	-
	2	8	172	213	A	Ag-Cu	
	1	3	90	155	A	u-Cu	
							-

۳- نتیجه گیری و بحث

در این مقاله، خواص پلاسمونیک و ترموپلاسمونیک نانوذرات دوتایی شش ضلعی با یک حفره نامتقارن بین آنها به صورت ناهمگن با ترکیبهای Cu-Ag ، Ag-Au و Cu-Au مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان میدهد که نانوذرات با مواد مختلف طلا، نقره و مس در حالتهای چند قطبی الكتريكي مختلف در نواحي مرئي و نزديك به فروسرخ تحريك می شوند. از آنجایی که تابع دی الکتریک مواد مختلف متفاوت است، خواص حرارتی و الکتریکی دایمرها متفاوت است. همچنین جهت قطبش نور تابشی بر این خواص تأثیر دارد و با تغییر قطبش نور، نقاط ایزوبستیک به دست میآید که محل این نقاط به نوع ماده بستگی دارد. برای بررسی این خواص، میدان الکتریکی بر روی سطح و در مجاورت نانوذرات دوتایی مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج بهدستآمده نشاندهنده افزایش شدید نسبت میدان الکتریکی موضعی به میدان الکتریکی نور فرودی در حدود ۲۹۳ برابر در مد اول نانوذرات دوتایی ناهمگن Ag-Cu در قطبش L و بالاترین تغییر دما $\Delta T_{max} = \Delta T_{max}$ در نانوذرات دوتایی ناهمگن Ag-Au با مقدار [8] Linic, Suljo, Phillip Christopher, and David B. Ingram. "Plasmonic-metal nanostructures for efficient conversion of solar to chemical energy." *Nature materials* 10, no. 12, 911-921 (2011).

[9] Richardson, Hugh H., Michael T. Carlson, Peter J. Tandler, Pedro Hernandez, and Alexander O. Govorov. "Experimental and theoretical studies of light-to-heat conversion and collective heating effects in metal nanoparticle solutions." *Nano letters* 9, no. 3, 1139-1146 (2009).

[10] Cognet, Laurent, Catherine Tardin, David Boyer, Daniel Choquet, Philippe Tamarat, and Brahim Lounis. "Single metallic nanoparticle imaging for protein detection in cells." *Proceedings of the National Academy of Sciences* 100, no. 20, 11350-11355 (2003).

[11] Assanov, Gani S., Z. Zh Zhanabaev, Alexander O. Govorov, and Alexander B. Neiman. "Modelling of photo-thermal control of biological cellular oscillators." *The European Physical Journal Special Topics* 222, 2697-2704 (2013).

[12] Wang, Mingsong, Chenglong Zhao, Xiaoyu Miao, Yanhui Zhao, Joseph Rufo, Yan Jun Liu, Tony Jun Huang, and Yuebing Zheng. "Plasmofluidics: Merging Light and Fluids at the Micro-/Nanoscale." *small* 11, no. 35, 4423-4444 (2015).

[13] Hirsch, Leon R., R. Jason Stafford, J. A. Bankson, Scott R. Sershen, B. Rivera, R. E. Price, John D. Hazle, Naomi J. Halas, and Jennifer L. West. "Nanoshell-mediated near-infrared thermal therapy of tumors under magnetic resonance guidance." *Proceedings of the National Academy of Sciences* 100, no. 23, 13549-13554 (2003).

[14] Stern, Joshua M., Jennifer Stanfield, Wareef Kabbani, Jer-Tsong Hsieh, and Jeffrey A. Cadeddu. "Selective prostate cancer thermal ablation with laser activated gold nanoshells." *The Journal of urology* 179, no. 2, 748-753 (2008).

[15] Ali-Khan, Sarah E., Liam W. Harris, and E. Richard Gold. "Motivating

²⁰°C در قطبش L مربوط میشود. به طور کلی، میدان الکتریکی نسبی و تغییرات دما در قطبش موازی به محور دایمر بیشتر از قطبش عمودی است. در نهایت با تغییر قطبش نور فرودی شکافی در حالت های پلاسمونیک از قطبش T به L ایجاد میشود که دو شکاف پلاریزاسیون عمودی به سه شکاف پلاریزاسیون موازی تبدیل **Ag-Cu** میشود. حداقل انرژی کوپلشدگی در نانوذرات دوتایی **Ag-Cu** میشود. حداقل انرژی کوپلشدگی در نانوذرات دوتایی **Au-Ag** برابر با برابر با **Au-Ag May در انوذرات دوتایی Au-Ag** برابر با **meV** میه مروزی دوتایی **Au-Cu** برابر با **Au-Cu** مرابر با **Au-Ag** مرابر با **Au-Ag** مرابر با **Au-Cu** دوتایی **Au-Cu** مرابر با **Au-Cu** دوتایی **Au-Cu** مرابر با **Au-Cu** مرابر با **Au-Cu** مرابر با **Au-Cu** دوتایی **Au-Cu** مرابر با **Au-Cu** دوتایی **Au-Cu** دوتایی **Au-Cu** مرابر با **Au-Cu** مرابر با **Au-Cu** مرابر با **Au-Cu** مرابر با **Au-Cu** دوتایی **Au-Cu** دوتایی **Au-Cu** دوتای

منابع

[1] Baffou, G. "Thermodynamics of metal nanoparticles." *Thermoplasmonics:* Heating Metal Nanoparticles Using Light; Cambridge University Press: Cambridge, UK, 36-80 (2017).

[2] Noguez, Cecilia. "Surface plasmons on metal nanoparticles: the influence of shape and physical environment." *The Journal of Physical Chemistry C* 111, no. 10, 3806-3819 (2007).

[3] Baffou, Guillaume, Frank Cichos, and Romain Quidant. "Applications and challenges of thermoplasmonics." *Nature Materials* 19, no. 9, 946-958 (2020).

[4] Govorov, Alexander O., and Hugh H. Richardson. "Generating heat with metal nanoparticles." *Nano today* 2, no. 1, 30-38 (2007).

[5] Lenert, Andrej, David M. Bierman, Youngsuk Nam, Walker R. Chan, Ivan Celanović, Marin Soljačić, and Evelyn N. Wang. "A nanophotonic solar thermophotovoltaic device." *Nature nanotechnology* 9, no. 2, 126-130 (2014).

[6] Challener, W. A., Chubing Peng, A. V. Itagi, D. Karns, Wei Peng, Yingguo Peng, XiaoMin Yang et al. "Heat-assisted magnetic recording by a near-field transducer with efficient optical energy transfer." *Nature photonics* 3, no. 4, 220-224 (2009).

[7] Brick, Thomas. "Hot-carriers and losses in plasmonic nanostructures." (2019).

[23] Johnson, Peter B., and R-WJPrB Christy. "Optical constants of the noble metals." *Physical review B* 6, no. 12, 4370 (1972).

[24] Baffou, Guillaume, and Romain Quidant. "Thermo-plasmonics: using metallic nanostructures as nano-sources of heat." *Laser & Photonics Reviews* 7, no. 2, 171-187 (2013).

[25] Bohren, Craig F., and Donald R. Huffman. *Absorption and scattering of light by small particles*. John Wiley & Sons, 2008.

[26] Palik, Edward D., ed. *Handbook of optical constants of solids*. Vol. 3. Academic press, 1998.

[27] Kravets, V. G., R. Jalil, Y-J. Kim, D. Ansell, D. E. Aznakayeva, B. Thackray, L. Britnell et al. "Graphene-protected copper and silver plasmonics." *Scientific reports* 4, no. 1, 5517 (2014).

[28] Lalisse, Adrien, Gilles Tessier, Jérome Plain, and Guillaume Baffou. "Quantifying the efficiency of plasmonic materials for near-field enhancement and photothermal conversion." *The Journal of Physical Chemistry C* 119, no. 45, 25518-25528 (2015).

[29] McMahon, M. D., R. Lopez, H. M. Meyer, L. C. Feldman, and R. F. Haglund. "Rapid tarnishing of silver nanoparticles in ambient laboratory air." *Applied Physics B* 80, 915-921 (2005).

[30] Guler, Urcan, and Rasit Turan. "Effect of particle properties and light polarization on the plasmonic resonances in metallic nanoparticles." *Optics express* 18, no. 16 17322-17338 (2010).

[31] Stockman, Mark I., Sergey V. Faleev, and David J. Bergman. "Localization versus delocalization of surface plasmons in nanosystems: can one state have both characteristics? "*Physical review letters* 87, no. 16, 167401 (2001).

[32] Fano, Ugo. "Effects of configuration interaction on intensities and phase

participation in open science by examining researcher incentives." *Elife* 6, e29319 (2017).

[16] Paithankar, Dilip Y., Fernanda H. Sakamoto, William A. Farinelli, Garuna Kositratna, Richard D. Blomgren, Todd J. Meyer, Linda J. Faupel et al. "Acne treatment based on selective photothermolysis of sebaceous follicles with topically delivered light-absorbing gold microparticles." *Journal of Investigative Dermatology* 135, no. 7, 1727-1734 (2015).

[17] Ali, Moustafa RK, Hala R. Ali, Carl R. Rankin, and Mostafa A. El-Sayed. "Targeting heat shock protein 70 using gold nanorods enhances cancer cell apoptosis in low dose plasmonic photothermal therapy." *Biomaterials* 102, 1-8 (2016).

[18] Cheheltani, Rabee, Rami M. Ezzibdeh, Peter Chhour, Kumidini Pulaparthi, Johoon Kim, Martina Jurcova, Jessica C. Hsu et al. "Tunable, biodegradable gold nanoparticles as contrast agents for computed tomography and photoacoustic imaging." *Biomaterials* 102, 87-97 (2016).

[19] Tang, Janika, Vaibhav Thakore, and Tapio Ala-Nissila. "Plasmonically enhanced reflectance of heat radiation from low-bandgap semiconductor microinclusions." *Scientific Reports* 7, no. 1, 1-20 (2017).

[20] Baffou, G., R. Quidant, and Ch Girard. "Heat generation in plasmonic nanostructures: Influence of morphology." *Applied Physics Letters* 94, no. 15, 153109 (2009).

[21] Chen, Fuyi, Negash Alemu, and Roy L. Johnston. "Collective plasmon modes in a compositionally asymmetric nanoparticle dimer." *Aip Advances* 1, no. 3, 032134 (2011).

[22] Alabastri, Alessandro, Salvatore Tuccio, Andrea Giugni, Andrea Toma, Carlo Liberale, Gobind Das, Francesco De Angelis, Enzo Di Fabrizio, and Remo Proietti Zaccaria. "Molding of plasmonic resonances in metallic nanostructures: Dependence of the non-linear electric permittivity on system size and temperature." *Materials* 6, no. 11, 4879-4910 (2013). nanostructures." *ACS Photonics* 4, no. 6, 1544-1551 (2017).

[41] Agranovich, Vladimir M., M. Litinskaia, and David G. Lidzey. "Cavity polaritons in microcavities containing disordered organic semiconductors." *Physical Review B* 67, no. 8, 085311 (2003).

[42] Peterson, Andrew F., Scott L. Ray, Raj Mittra, and Institute of Electrical and Electronics Engineers. *Computational methods for electromagnetics*. Vol. 351. New York: IEEE press, 1998. shifts." Physical review 124, no. 6, 1866 (1961).

[33] Pakizeh, Tavakol, and Mikael Kall. "Unidirectional ultracompact optical nanoantennas." *Nano letters* 9, no. 6, 2343-2349 (2009).

[34] Yuan, Hsiao-Kuan, Uday K. Chettiar, Wenshan Cai, Alexander V. Kildishev, Alexandra Boltasseva, Vladimir P. Drachev, and Vladimir M. Shalaev. "A negative permeability material at red light." *Optics Express* 15, no. 3, 1076-1083 (2007).

[35] Cai, Wenshan, Uday K. Chettiar, Hsiao-Kuan Yuan, Vashista C. de Silva, Alexander V. Kildishev, Vladimir P. Drachev, and Vladimir M. Shalaev. "Metamagnetics with rainbow colors." *Optics express* 15, no. 6, 3333-3341 (2007).

[36] Feth, Nils, Christian Enkrich, Martin Wegener, and Stefan Linden. "Large-area magnetic metamaterials via compact interference lithography." *Optics Express* 15, no. 2, 501-507 (2007).

[37] Pakizeh, Tavakol, M. S. Abrishamian, N. Granpayeh, Alexandre Dmitriev, and Mikael Käll. "Magnetic-field enhancement in gold nanosandwiches." *Optics Express* 14, no. 18, 8240-8246 (2006).

[38] Li, T., H. Liu, F. M. Wang, Z. G. Dong, S. N. Zhu, and X. Zhang. "Coupling effect of magnetic polariton in perforated metal/dielectric layered metamaterials and its influence on negative refraction transmission." *Optics Express* 14, no. 23, 11155-11163 (2006).

[39] Jeyaram, Yogesh, Shankar K. Jha, Mario Agio, Jörg F. Löffler, and Yasin Ekinci. "Magnetic metamaterials in the blue range using aluminum nanostructures." *Optics letters* 35, no. 10, 1656-1658 (2010).

[40] Metwally, Khaled, Serge Mensah, and Guillaume Baffou. "Isosbestic thermoplasmonic



Investigating plasmonic and Thermoplasmonics properties of asymmetric hexagonal heterodimer nanoparticles and isosbestic points

¹ Fahimeh Noori, ² Abass Azarian

^{1*} Qom University, Qom, Qom, Iran

² Qom University, Qom, Qom, Iran

Article details

Abstract

Received: 2023/04/1 Accepted: 2024/11/21 Published: 2024/12/11

ISSN: 2588-493x eSSN: 2588-4821

Correspondence email: <u>f.noori3305@gmail.com</u>



In recent years, there has been an increasing interest in using plasmonic nanoparticles as thermal nano sources with the ability to be controlled remotely by light, which has led to the emergence of thermoplasmonics science. In this regard, nanoparticles with different shapes, compositions, and materials can create limited heat generation at the nanoscale. Therefore, in this article, the plasmonic and thermoplasmonic properties of asymmetric hexagonal heterodimer nanoparticles of Ag-Au, Cu-Ag, and Cu-Au compositions have been investigated. The isosbestic points and the coupling energy due to the gap created in the plasmonic modes of the absorption spectrum due to the change in the polarization of the light have been investigated and calculated. The obtained results show that with the combination of heterogeneous binary nanoparticles of silver and copper in light polarization parallel to the dimer axis, the electric field can be strengthened up to 293 times, and the highest temperature change in Ag-Au heterogeneous binary nanoparticles with a value of $\Delta T_{max} = 417$ °C in L polarization is related.

Keywords: Thermoplasmonics, Heterodimer nanoparticles, coupling energy, isosbestic points.