

## بررسی افزایش نرخ گسیل خودبه خودی در کنار نانوذره های بیضوی با روش انتگرال مرزی

آیدا فیروزی<sup>۱</sup>، احمد محمدی<sup>۲</sup>

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد دانشگاه خلیج فارس، بوشهر، بوشهر، دانشگاه خلیج فارس، بخش فیزیک، ۷۵۱۶۹

۲- استادیار دانشگاه خلیج فارس، بوشهر، بوشهر، دانشگاه خلیج فارس، بخش فیزیک، ۷۵۱۶۹

آدرس رایانامه نویسنده مسئول: mohammadi@pgu.ac.ir

### چکیده

با به کارگیری روش انتگرال مرزی به بررسی چگونگی افزایش نرخ گسیل خودبه خودی به کمک نانوذره های پلاسمونیک با سطح مقطع بیضوی شکل می پردازیم. این نوع از نانوذرات می توانند نرخ واپاشی را به میزان قابل توجهی افزایش دهند. پیک نرخ گسیل خودبه خودی برای نانوذرات بیضوی به ابعاد بیضی و ضریب شکست محیط بستگی دارد. نشان داده می شود که با کاهش فاصله مولکول از نانوذره به کمتر از ده نانومتر نرخ گسیل خودبه خودی به چندده یا چندصد برابر افزایش می یابد. همچنین با تغییر نسبت شعاع ها یا ضریب شکست محیط زمینه بیشینه افزایش در کل محدوده طیفی مورد مطالعه (۴۰۰ تا ۱۰۰۰ نانومتر) قابل جابه جایی است.

کلمات کلیدی: افزایش نرخ گسیل خودبه خودی، نانوذره های پلاسمونیک، روش انتگرال مرزی

### Investigating Spontaneous Emission Rate Enhancement Close to Elliptical Nanoparticles by Boundary Integral Method

Aida Firoozi<sup>1</sup>, Ahmad Mohammadi<sup>2</sup>

1. Master student, Bushehr, Bushehr, Persian Gulf University, Physics Department of Persian Gulf University
2. Assistant Professor, Bushehr, Bushehr, Persian Gulf University, Physics Department of Persian Gulf University

email address of corresponding author: mohammadi@pgu.ac.ir

### Abstract

Utilizing Boundary Integral Method (BIM), we investigate the spontaneous emission enhancement rate in the vicinity of plasmonic nanoparticles of elliptical cross section. These types of nanoparticles can considerably enhance molecules decay rate. One can easily adjust the spontaneous emission rate of the elliptical nanoparticle by altering the aspect ratio and the background refractive index. It is shown that the decay rate can be enhanced by two or three orders of magnitude for dipole distances below 10 nanometers. Also, the position of enhancement peaks is adjusted in the investigated spectral range (400-1000 nm) by changing the aspect ratio of the nanoparticle or the refractive index of background medium.

**Key Words:** Spontaneous emission rate enhancement, Plasmonic nanoparticles, Boundary integral method

## ۱. مقدمه

در سال‌های اخیر نانو فناوری به یکی از زمینه‌های پیشرو در علم فیزیک، شیمی و مهندسی تبدیل شده است. از این رو مطالعه نانوذرات فلزی در شکل‌ها و اندازه‌های مختلف، به علت کاربردهای فراوان آن‌ها هر چه بیشتر مورد مطالعه قرار گرفته است. یکی از کاربردهای نانوذرات پلاسمونیک، توانایی در کنترل گسیل خودبه‌خودی مولکول‌ها با بهره‌گیری از پلاسمون سطحی جایگزیده می‌باشد [۱]. هنگامی که موج الکترومغناطیسی بر سطح فلزی تابیده شود، میدان ناشی از موج تابشی، الکترون‌های نوار هدایت فلز را به نوسان وا می‌دارد. به برانگیختگی نوسانات تجمعی بار در فصل مشترک فلز و دی‌الکتریک، پلاسمون سطحی گفته می‌شود [۲]. پلاسمون سطحی جایگزیده در نانوذرات فلزی به شکل، اندازه و محیطی که نانوذرات در آن قرار دارند بستگی دارد. بنابراین با انتخاب مناسب این پارامترها می‌توان به طور قابل ملاحظه‌ای نرخ گسیل خودبه‌خودی مولکول‌ها در کنار نانوذرات پلاسمونیک را افزایش داد [۳،۴].

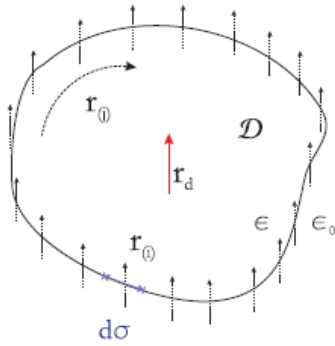
توانایی کنترل گسیل خودبه‌خودی مولکول‌ها به کمک نانوساختارها هم از نظر پژوهشی و هم از نظر کاربردهای عملی از اهمیت به‌سزایی برخوردار می‌باشد و تحقیقات بسیاری در این زمینه در حال انجام است. گرچه در ابتدا این پدیده را به‌عنوان یک پدیده غیرقابل کنترل می‌شناختند، پورسل نشان داد که امکان تغییر آن با تغییر در محیط اطراف گسیل‌کننده وجود دارد [۵].

یکی از راه‌های افزایش گسیل خودبه‌خودی، قراردادن گسیل‌کننده در نزدیکی نانوذرات پلاسمونیک است. برای دستیابی به بالاترین میزان نرخ گسیل خودبه‌خودی، انجام این کار مستلزم محاسبه نرخ گسیل خودبه‌خودی مولکول در کنار نانوذره با استفاده از حل تمام برداری معادلات ماکسول برای نانوذراتی با هندسه‌های مختلف است [۶]. از آنجایی که برای چنین مسائلی حل تحلیلی وجود ندارد، از روش‌های محاسباتی گوناگون که توانایی مدل‌سازی برهمکنش نور با نانوساختارهای پلاسمونیک را دارند، استفاده می‌شود. در این مقاله به‌منظور محاسبه افزایش نرخ گسیل خودبه‌خودی از روش انتگرال مرزی<sup>۱</sup> [۷]، که روشی نیمه‌تحلیلی و دقیق در بازه‌ی فرکانس است، استفاده می‌کنیم. از مزایای این روش می‌توان به سرعت و دقت آن در انجام محاسبات اشاره کرد. نشان می‌دهیم که نانوذرات بیضی‌شکل علاوه بر این که می‌توانند نرخ گسیل را ده‌ها برابر کنند، امکان تنظیم طول موج تشدید پلاسمونی متناسب با طول موج گسیل مولکول دلخواه را فراهم می‌آورند.

## ۲. روش انتگرال مرزی

روش انتگرال مرزی روشی نیمه‌تحلیلی است که در فضای بسامد عمل می‌کند و به‌منظور مطالعه برهم‌کنش نور با مواد همگن، همسانگرد و خطی به کار می‌رود. در این روش، مطابق شکل ۱، ابتدا مرز جسم مورد نظر ( $D$ ) را به امان‌های سطح  $d\sigma$  گسسته‌سازی کرده و یک‌سری نقاط روی مرز که دارای مختصات  $r_i$  هستند در نظر می‌گیریم.

<sup>1</sup> Boundary integral method (BIM)



شکل ۱- نمایی کلی از روش انتگرال مرزی

بر روی هر المان  $r_i$  یک میدان مغناطیسی ( $H$ ) و مولفه عمود بر سطح مشتق آن ( $F$ ) در نظر گرفته می‌شود. برای به دست آوردن میدان مغناطیسی در کل فضا، ابتدا باید این کمیت‌ها را به دست آورد. معادله موج برای میدان مغناطیسی بر اساس معادلات ماکسول به صورت زیر به دست می‌آید.

$$\nabla \left( \frac{1}{\epsilon} \nabla H \right) + k_0^2 H = 4\pi i k_0 (\mathbf{e}_z \times \nabla) \cdot \left( \frac{1}{\epsilon} \mathbf{p} \delta(|\mathbf{r}-\mathbf{r}_d|) \right) \quad (1)$$

در رابطه بالا،  $r$  محل قرار گرفتن نقطه مشاهده،  $r_d$  محل قرار گرفتن گسیل کننده و  $k_0$  عدد موج در خلا است.

برای حل معادله دیفرانسیل جزئی ۱، این معادله را از طریق قضیه گرین به معادله انتگرال مرزی تبدیل می‌کنیم [۸]. میدان مغناطیسی برای زمانی که نقطه دلخواه  $r$  درون جسم قرار گرفته است، به صورت زیر به دست می‌آید.

$$H(\mathbf{r}) = 2H_{inc} + \frac{1}{2\pi} \int_{\partial D} \left[ G_\epsilon(|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}|) \epsilon F(\mathbf{r}_i) - H(\mathbf{r}_i) \frac{\partial G_\epsilon}{\partial n}(|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}|) \right] d\sigma + F(\mathbf{r}_i) S_\epsilon \quad (2)$$

در رابطه بالا  $H_{inc}$  معرف میدان تابشی ناشی از گسیل کننده‌ای است که درون جسم قرار گرفته است.  $G_\epsilon$  تابع گرین که بصورت  $G_\epsilon = i\pi H_0^{(1)}(K_0 \sqrt{\epsilon} r)$  ارائه می‌گردد. تابع گرین در نقطه  $r = r_i$  دچار تکینگی می‌شود. به منظور پرهیز از تکینگی، جمله  $S_\epsilon$  در معادله ۲ ظاهر می‌شود.

اگر نقطه دلخواه  $r$  بیرون از جسم  $D$  در نظر گرفته شود، میدان مغناطیسی به صورت زیر به دست می‌آید.

$$H(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2\pi} \int_{\partial D} \left[ G_{\epsilon_0}(|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}|) \epsilon_0 F(\mathbf{r}_i) - H(\mathbf{r}_i) \frac{\partial G_{\epsilon_0}}{\partial n}(|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}|) \right] d\sigma - F(\mathbf{r}_i) S_{\epsilon_0} \quad (3)$$

برای حل معادله انتگرالی ۲ و ۳ از تقریب ریمان که بصورت زیر نشان داده شده است، استفاده می‌کنیم.

$$\int_{\partial D} [G_\epsilon(|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}|) \epsilon F(\mathbf{r}_i)] d\sigma(\mathbf{r}_i) \rightarrow \sum_{j \neq i} d\sigma_j G_\epsilon(|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j|) \epsilon F(\mathbf{r}_i) \quad (4)$$

با باز نویسی معادله ۲ و ۳ بر اساس بسط ریمان می‌توان میدان مغناطیسی و مولفه عمود بر سطح مشتق آن را روی مرز به دست آورد، و با داشتن میدان مغناطیسی روی مرز می‌توان میدان مغناطیسی را به صورت زیر در کل فضا به دست آورد.

$$H(\mathbf{r})^{in} = \frac{1}{4\pi} \int_{\partial D} \left[ G_\epsilon(|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}|) \epsilon F(\mathbf{r}_i) - H(\mathbf{r}_i) \frac{\partial G_\epsilon}{\partial n}(|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}|) \right] d\sigma \quad (5)$$

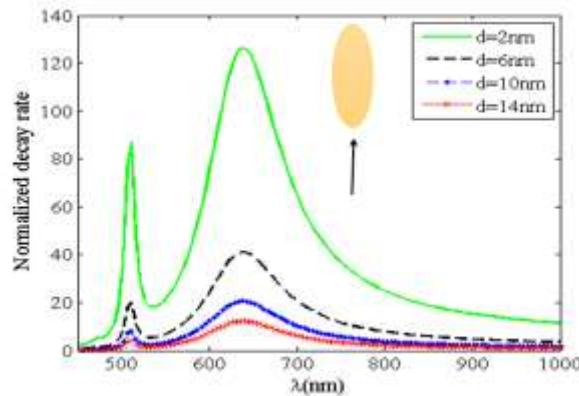
$$H(\mathbf{r})^{\text{out}} = -\frac{1}{4\pi} \int_{\partial D} \left[ G_{\epsilon_0}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}) \epsilon_0 F(\mathbf{r}_i) - H(\mathbf{r}_i) \frac{\partial G_{\epsilon_0}}{\partial n}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}) \right] d\sigma \quad (6)$$

با استفاده از معادله ۵ و ۶ می توان میدان الکتریکی را در کل فضا براساس معادلات ماکسول به دست آورد.

### ۳. نتایج

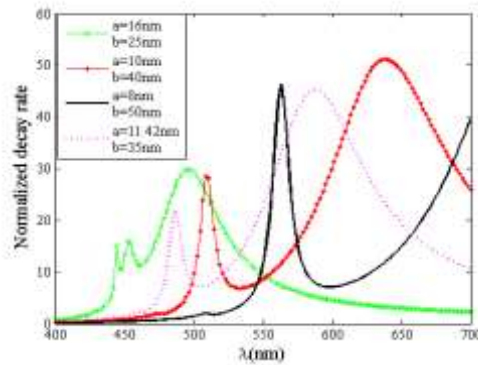
در این بخش، نرخ گسیل خودبه خودی مولکول را مورد بررسی قرار داده و تاثیر پارامترهای گوناگون را محاسبه می کنیم. برای محاسبه نرخ واپاشی، میزان تابش یک دوقطبی (معادل کلاسیکی تابش مولکول) را در نزدیکی یک نانوذره محاسبه می کنیم.

به منظور بررسی تاثیر فاصله از نانوذره بر روی نرخ گسیل خودبه خودی، نانوذره ای از جنس طلا با سطح مقطع بیضی (قطر بزرگ ۸۰ نانومتر و قطر کوچک ۲۰ نانومتر) که در محیطی به ضریب شکست ۱٫۵ قرار گرفته است را در نظر می گیریم و گسیل کننده را در فواصل مختلف از نانوذره قرار می دهیم. نتایج حاصل از این شبیه سازی در شکل ۲ نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود هر چه فاصله گسیل کننده از نانوذره کمتر می شود نرخ واپاشی افزایش می یابد. در فواصل بسیار نزدیک، نرخ گسیل می تواند چند صد برابر شود. البته باید توجه شود که در این فواصل احتمال گسیل غیر تابشی که منجر به اتلاف انرژی درون نانوذره می گردد، افزایش می یابد. بنابراین دستیابی به بالاترین نرخ گسیل تابشی مستلزم انتخاب یک فاصله مناسب از طریق روش های بهینه سازی است.



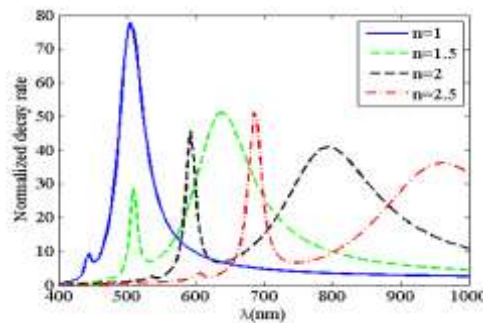
شکل ۲- نرخ واپاشی به ازای فواصل مختلف گسیل کننده از نانوذره.

همانطور که در شکل ۲ مشاهده شد، تغییر فاصله گسیل کننده از نانوذره تاثیری بر روی طول موج های مربوط به بیشینه نرخ واپاشی ندارد. برای جابه جا کردن این بیشینه ها می توان ابعاد بیضی را تغییر داد. نتایج حاصل از این شبیه سازی در شکل ۳ نشان داده شده است. با تغییر ابعاد بیضی بیشینه نرخ واپاشی را می توان در گستره وسیعی از طول موج ها جابه جا کرد.



شکل ۳- نرخ واپاشی به‌ازای ابعاد مختلف بیضی،  $2a$  و  $2b$  به ترتیب قطر کوچک و قطر بزرگ بیضی هستند.

پارامتر دیگری که می‌تواند محل بیشینه‌ها را جابه‌جا کند، ضریب شکست محیط اطراف نانوذره است. به‌منظور بررسی تاثیر ضریب شکست محیط بر روی نرخ واپاشی، گسیل‌کننده‌ای در فاصله ۵ نانومتری از نانوذره‌ای از جنس طلا با سطح مقطع بیضی (قطر بزرگ ۸۰ نانومتر و قطر کوچک ۲۰ نانومتر) که در محیط‌هایی به ضریب شکست‌های مختلف قرار گرفته است در نظر می‌گیریم. نتایج حاصل از این شبیه‌سازی در شکل ۴ نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می‌شود هر چه ضریب شکست محیط بیشتر می‌شود پیک نرخ واپاشی به سمت طول موج‌های بلندتر جابه‌جا می‌شود.



شکل ۴- نرخ واپاشی به‌ازای ضریب شکست‌های مختلف.

#### ۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله، به بررسی چگونگی افزایش نرخ گسیل خودبه‌خودی به کمک نانوذره‌های پلاسمونیک پرداخته شد. نتایج نشان می‌دهد که می‌توان با تغییر ابعاد نانوذره و ضریب شکست محیط اطراف نرخ گسیل خودبه‌خودی را در محدوده طول موجی دلخواه کنترل کرد.

#### ۵. منابع

1. Mohammadi, A. Sandoghdar, V. Agio, M. 2008. Gold nanorods and nanospheroids for enhancing spontaneous emission. *New Journal of Physics*. 1-14.
2. Maier, S.A. 2007. *Plasmonics Fundamentals and Applications*. Springer. New York.
3. Rogobete, L. Kaminski, F. Agio, M. Sandoghdar, V. 2007. Design of plasmonic nanoantennae for enhancing spontaneous emission. *Optics Letters*. 1623-1625.
4. Mohammadi, A. Sandoghdar, V. Agio, M. 2009. Gold, Copper, Silver and Aluminum Nanoantennas to Enhance Spontaneous Emission. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*. 2024-2030.
5. Purcell, E.M. 1946. Spontaneous emission probabilities at radio frequency. *Phys. Rev.* 69-681.
6. Novotny, L. and Hecht, B. 2006. *Principles of Nano-Optics*, Cambridge University Press. Cambridge. England.
7. Rogobete, L. Henkel, C. 2004. Spontaneous emission in a subwavelength environment characterized by boundary integral equations. *Physical Review A*. 063815-1-10.
8. Vesperinas, M.N. 1991. *Scattering and Diffraction in Physical Optics*. John Wiley and Sons. New York.