

## مدل سازی نانو آنتن ها با روش BOR-FDTD و بررسی تاثیر فاصله بر فلوتورسانس

احمد محمدی<sup>۱\*</sup>

اطلاعات مقاله	چکیده
<p><b>واژگان کلیدی:</b> نانو آنتن، روش BOR-FDTD، فلوتورسانس.</p>	<p>در این مطالعه با استفاده از روش BOR-FDTD، چگونگی افزایش سیگنال فلوتورسانس به کمک نانو آنتن ها بررسی شده است. جزئیات روش محاسباتی شامل شبکه بندی، معادلات به هنگام سازی، چشمه، آشکارساز و شرایط مرزی جاذب شرح داده شده است. نتایج نشان می دهد که افزایش فلوتورسانس به خصوصیات نانو آنتن، محیط پیرامون، طول موج نور و فاصله ی گسیل کننده از نانو آنتن بستگی دارد. با بررسی دقیق تاثیر فاصله بر روی پارامترهای موثر در افزایش فلوتورسانس (عامل پورسل، بهره ی آنتن، شدت میدان الکتریکی) مشخص می شود که با تنظیم مناسب فاصله گسیل کننده تا نانو آنتن می توان به بالاترین میزان افزایش (که می تواند چند هزار برابر باشد) دست یافت.</p>

### ۱- مقدمه

فلوتورسانس نانو آنتن به عنوان یک آنتن دوطرفه عمل می کند: ابتدا با تقویت میدان الکتریکی نور تابیده شده در اطراف خود (محل قرارگیری مولکول) آهنگ برانگیختگی را به شدت افزایش می دهد و سپس با افزایش قابل ملاحظه آهنگ واپاشی<sup>۱</sup> مولکول (گذار از تراز برانگیخته به تراز پایه) توان تابش مولکول را به اندازه ای افزایش می دهد که امکان آشکارسازی سیگنال های یک مولکول فراهم می گردد. اساس این فرآیندها، تشکیل پلاسمون سطحی<sup>۲</sup> جایگزیده درون نانوذره فلزی (از جنس طلا، نقره، ...) می باشد. پلاسمون سطحی به نوسانات گروهی الکترون های درون نانوذره تحت تاثیر نور فرودی اطلاق می شود و به شکل، جنس، اندازه ی نانوذره و ضریب گذردهی محیط پیرامون آن بستگی دارد. از سوی دیگر، اتلاف انرژی درون نانوذره فلزی در ناحیه اپتیکی

پیشرفت های اخیر در حوزه ی فناوری نانو امکان ساخت ساختارهایی مشابه با آنتن های رادیویی برای تقویت تابش گسیل شده توسط یک مولکول را فراهم کرده است. اصطلاحا به این گونه آنتن ها، نانو آنتن و یا آنتن اپتیکی گفته می شود. نانو آنتن ها عموما از یک یا دو نانوذره فلزی که در فاصله چند نانومتری از مولکول قرار می گیرند، تشکیل می شوند. با توجه به کاربرد گسترده نانو آنتن ها در فناوری های نوین، اخیرا تحقیقات بسیاری بر روی چگونگی عملکرد، کاربرد و مدل سازی آن ها انجام گرفته است [۱-۷]. از کاربردهای نانو آنتن ها می توان به مواردی از قبیل افزایش بهره ی سلول های خورشیدی [۸]، حس گرها [۹] و افزایش آهنگ فلوتورسانس مولکول ها [۱۰ و ۱۱] اشاره کرد. در پدیده ی افزایش آهنگ

<sup>1</sup> Decay rate

<sup>2</sup> Surface Plasmon

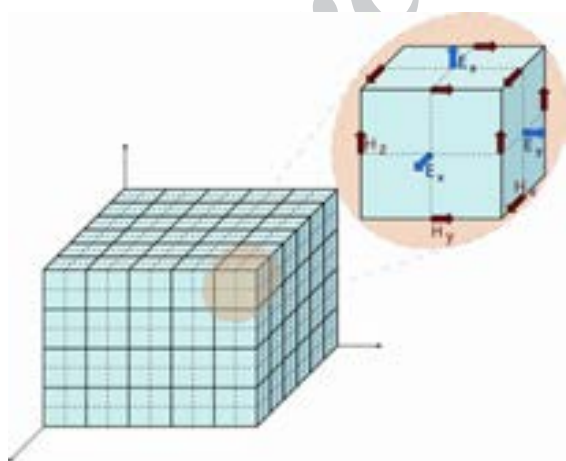
\* پست الکترونیک نویسنده مسئول: mohammadi@pgu.ac.ir

۱. استادیار، دانشکده علوم پایه، دانشگاه خلیج فارس

مسئله تابش یک مولکول در کنار نانوذره را می‌توان در حوزه‌ی الکترودینامیک کلاسیک مورد بررسی قرار داد [۱۲]. برای این منظور حل دقیق معادلات تمام برداری ماکسول برای محاسبه‌ی میزان تابش توسط مولکول مورد نیاز است که به صورت تحلیلی جز برای موارد ساده و خاص امکان پذیر نمی‌باشد. بنابراین نیاز است که از تکنیک‌های محاسباتی استفاده شود. یکی از این روش‌ها، روش تفاضل متناهی دامنه زمان<sup>۳</sup> (FDTD) می‌باشد که به دلیل توانایی حل معادلات ماکسول در دامنه زمان برای ساختارهای پیچیده با ابعاد و شکل دلخواه از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است [۱۳]. در بخش بعد قسمت‌های مختلف این روش که برای مدل سازی نانوانت‌ها مورد نیاز می‌باشند، به طور خلاصه معرفی می‌گردند.

### ۳- روش FDTD استاندارد

در این روش با شبکه‌بندی فضای مدل سازی و اختصاص خواص اپتیکی به سلول‌های این شبکه، ساختار مورد مطالعه و میدان‌های برهم کنش کننده تعریف می‌شوند. این روش در سال ۱۹۶۶ توسط یی [۱۴] ابداع گردید. اما به دلیل عدم دسترسی به کامپیوترهای با سرعت و حافظه مورد نیاز تا اواخر دهه ۸۰ مورد توجه واقع نگردید.



شکل ۱- شبکه بندی در فضای FDTD سه بعدی و محل قرارگیری مولفه های میدان های الکتریکی و مغناطیسی بر روی هر سلول

غیرقابل چشم پوشی است. بنابراین در طراحی نانوانت‌ها باید پارامترهای گوناگون آن را به دقت تنظیم نمود، به گونه‌ای که با کمترین اتلاف انرژی بیشترین افزایش آهنگ فلوتورسانس را امکان پذیر سازد. با مدل سازی نانوانت‌ها چندین قاعده کلی را برای طراحی آن‌ها پیشنهاد کرده ایم، که شامل تنظیم شکل نانوذره [۲ و ۳]، جنس نانوذره [۴] و استفاده از نانوذرات جفت شده [۵] می‌باشند. نتایج مدل سازی‌ها با نتایج آزمایشگاهی که در همین راستا انجام شد مطابقت بسیار خوبی دارند [۷]. در این مقاله با ارائه جزئیات مدل سازی نانوانت‌ها به کمک روش Bor<sup>۱</sup>-FDTD، و نوشتن کدهای مورد نیاز برای پیاده سازی آن، نشان می‌دهیم که با تنظیم دقیق فاصله مولکول از نانوذره می‌توان آهنگ فلوتورسانس را به طور چشمگیری افزایش داد.

### ۲- افزایش فلوتورسانس به کمک نانوانت‌ها

افزایش سیگنال فلوتورسانس در مجاورت نانوانت (S) نسبت به سیگنال فلوتورسانس در محیط همگن (S<sub>0</sub>) از رابطه (۱) قابل محاسبه می‌باشد [۵]:

$$\frac{S}{S_0} = \frac{1}{(1 - \eta_0)/F + \eta_0/\eta_a} \frac{|\vec{P} \cdot \vec{E}|^2}{|\vec{P} \cdot \vec{E}_0|^2} \quad (1)$$

که در این رابطه  $\eta_0$  بهره‌ی کوانتومی گسیل کننده، E و E<sub>0</sub> به ترتیب میدان الکتریکی در محل گسیل کننده در حضور نانوانت و بدون آن،  $\eta_a$  بهره‌ی آنتن و F عامل پورسل<sup>۲</sup> می‌باشند. بهره‌ی آنتن به صورت نسبت آهنگ واپاشی تابشی به آهنگ کل تعریف می‌شود و مشخص کننده بخشی از انرژی کل تابش شده توسط گسیل کننده است که به خارج از مجموعه نانوانت-گسیل کننده تابش می‌شود. لازم به ذکر است که بخش دیگر انرژی درون نانوذره اتلاف می‌شود. عامل پورسل به صورت نسبت آهنگ واپاشی تابشی گسیل کننده در حضور نانوذره به آهنگ واپاشی تابشی در محیط همگن تعریف می‌شود.

<sup>1</sup> Body of Revolution

<sup>2</sup> Purcell factor

<sup>3</sup> Finite Difference Time Domain

که  $\epsilon_0$  و  $\mu_0$  به ترتیب ضریب گذردهی و تراوایی خلا و  $\epsilon_r, \mu_r, \sigma$  به ترتیب ثابت گذردهی، تراوایی و رسانش محیط می‌باشند.

به‌عنوان نمونه معادله‌ی به‌هنگام‌سازی برای  $D_x$  به‌صورت رابطه (۴) به‌دست می‌آید:

$$D_x \Big|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} = D_x \Big|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n-1/2} + \Delta t \left( \begin{array}{c} \frac{H_z \Big|_{i,j+1,k+1/2}^n - H_z \Big|_{i,j+1,k+1/2}^{n-1}}{\Delta y} \\ - \frac{H_y \Big|_{i,j+1/2,k+1}^n - H_y \Big|_{i,j+1/2,k}^{n-1}}{\Delta z} \\ - J_x \Big|_{i,j+1/2,k+1/2}^n \end{array} \right) \quad (4)$$

به‌همین ترتیب می‌توان سایر معادلات به‌هنگام‌سازی را به‌دست آورد.

### ۳-۲- شرایط مرزی جاذب

در این مسئله، نانوانتن و ملکول در یک محیط همگن بدون مرز قرار دارند. بنابراین فضای فیزیکی مورد مطالعه نامحدود می‌باشد. اما در عمل به‌دلیل محدود بودن حافظه کامپیوتر، مجبور به محصور کردن فضای محاسباتی و استفاده از مرزهای غیرفیزیکی می‌باشیم. برای جلوگیری از بازتاب ناخواسته و غیرفیزیکی از این مرزهای غیرواقعی شرایط مرزی مناسب اعمال می‌گردد، به‌گونه‌ای که تمام امواج رسیده به این مرزها (با هر بسامد و هر زاویه‌ی فرودی) به‌طور کامل جذب شده و چنین به‌نظر می‌رسد که امواج بدون هیچ بازتابی به طرف خارج از فضای شبیه‌سازی منتشر می‌گردند. به چنین مرزهای محصور کننده، شرایط مرزی جاذب<sup>۱</sup> گفته می‌شود. در این مسئله، از شرایط مرزی جاذب PML<sup>۲</sup> استفاده می‌شود.

### ۳-۳- چشمه

در روش FDTD با توجه به مسئله مورد مطالعه، انواع مختلفی از چشمه‌های الکترومغناطیسی به‌کار برده

با پیشرفت در ساخت کامپیوترهای شخصی، این روش به‌عنوان کارآمدترین روش در مطالعه انتشار و برهم‌کنش امواج الکترومغناطیس-ماده در بسیاری از شاخه‌ها از قبیل: فیزیک، الکترونیک، مخابرات، فوتونیک و ... مطرح گردید [۱۳]. در روش FDTD استاندارد، فضای شبیه‌سازی مانند شکل ۱ به سلول‌های مکعبی شکل یکسان تقسیم‌بندی می‌شود. محل قرارگیری مولفه‌های میدان الکتریکی و میدان مغناطیسی بر روی هر سلول به‌صورت یک در میان به‌گونه‌ای تعیین می‌گردد که هر مولفه میدان الکتریکی توسط مولفه‌های میدان مغناطیسی و هر مولفه میدان مغناطیسی توسط مولفه‌های میدان الکتریکی احاطه گردد. با گسسته‌سازی معادلات ماکسول از طریق اعمال تفاضل متناهی بر روی مشتق زمانی و مکانی مولفه‌های میدان، شش معادله به‌هنگام‌سازی برای شش مولفه‌ی میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی حاصل می‌شود.

### ۳-۱- معادلات به‌هنگام‌سازی

معادلات ماکسول که اساس الکتروپنایمیک کلاسیک را تشکیل می‌دهند، عبارتند از:

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{H} &= \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \end{aligned} \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

که  $B$  چگالی شار مغناطیسی،  $E$  میدان الکتریکی،  $D$  چگالی شار الکتریکی،  $H$  میدان مغناطیسی،  $J$  چگالی جریان الکتریکی و  $\rho$  چگالی بار الکتریکی می‌باشند.

علاوه بر معادلات ماکسول به معادلات ساختمندی نیز نیازمندیم:

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{E} \\ \mathbf{B} &= \mu_0 \mu_r \mathbf{H} \\ \mathbf{J} &= \sigma \mathbf{E} \end{aligned} \quad (3)$$

<sup>1</sup> Absorbing Boundary Condition

<sup>2</sup> Perfectly Matched layer

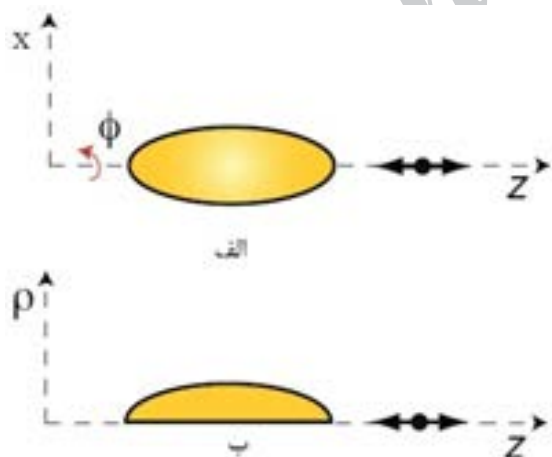
می‌باشد. بنابراین می‌توان بستگی میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی به مختصه  $\phi$  را با استفاده از سری فوریه به صورت رابطه (۵) بسط داد [۱۳]:

$$\mathbf{E} = \sum_{m=0}^{\infty} (\mathbf{E}_{even,m} \cos m\phi + \mathbf{E}_{odd,m} \sin m\phi) \quad (5)$$

$$\mathbf{H} = \sum_{m=0}^{\infty} (\mathbf{H}_{even,m} \cos m\phi + \mathbf{H}_{odd,m} \sin m\phi)$$

که  $m$  اندیس هارمونیک دورانی است. به این ترتیب کافی است با استفاده از معادلات FDTD مقدار میدان الکتریکی و مغناطیسی در  $\phi = 0$  (شکل ۲-ب) محاسبه شود. در این صورت مقادیر میدان به ازای مقادیر مختلف  $\phi$  را می‌توان به صورت تحلیلی و به کمک روابط (۵) محاسبه کرد.

شکل ۳ شبکه‌بندی فضای FDTD سه‌بعدی در دستگاه استوانه‌ای و معادل دوبعدی آن در فضای BOR-FDTD را نشان می‌دهد. در این شکل همچنین محل قرارگیری میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی بر روی هر سلول BOR-FDTD مشخص شده است. با تکرار فرآیندی مشابه با روش FDTD استاندارد می‌توان معادلات به‌هنگام‌سازی میدان‌ها را به‌دست آورد.



شکل ۲- نمایش یک گسیل‌کننده در نزدیکی نانوآنتن در الف) فضای فیزیکی ب) فضای BOR-FDTD

به‌عنوان مثال معادله به‌هنگام‌سازی مؤلفه  $r$  میدان الکتریکی به صورت رابطه (۶) به‌دست می‌آید [۱۳]:

می‌شود. برای محاسبه فلوتورسانس دو نوع چشمه مورد نیاز است:

۱. چشمه‌ی نقطه‌ای: با قرار دادن یک دوقطبی در محل گسیل‌کننده می‌توان تابش توسط ملکول را شبیه‌سازی کرد.
۲. موج تخت: از روش میدان کل-میدان پراکنده شده (TFSF<sup>1</sup>) برای تولید موج تخت استفاده می‌شود. در این تکنیک فضای شبیه‌سازی به دو بخش میدان کل و میدان پراکنده شده تقسیم می‌گردد. با اعمال شرایط مرزی مناسب در مرز میان دو بخش می‌توان میدان فرودی موردنظر را بوجود آورد.

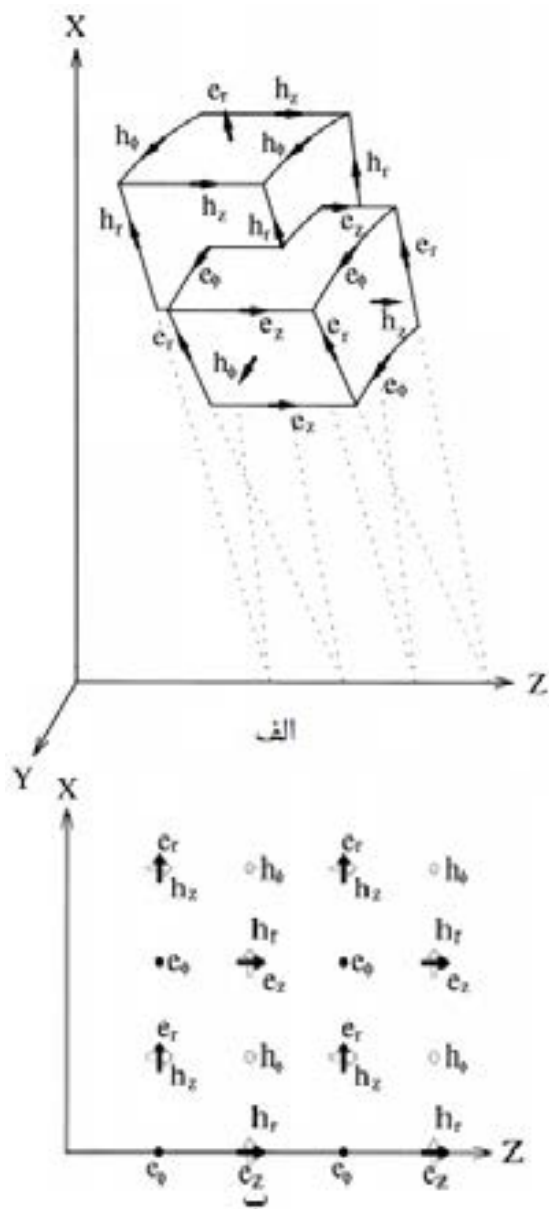
#### ۴- روش BOR-FDTD

یکی از ایرادهای روش FDTD استاندارد نیاز به استفاده از سلول‌های بسیار ریز برای به‌دست آوردن جواب‌های دقیق می‌باشد. به‌عنوان نمونه برای مدل‌سازی دقیق نانوآنتن مورد بحث به سلول‌هایی به اضلاع یک نانومتر نیاز داریم. بنابراین فضای محاسباتی برای شبیه‌سازی یک فضای فیزیکی مکعبی شکل به ضلع ۲۰۰ نانومتر به  $200 \times 200 \times 200$  سلول نیاز دارد. با در نظر گرفتن زمان محاسبه و مقدار متغیرهای مورد نیاز برای هر سلول مشاهده می‌شود که انجام چنین مدل‌سازی بر روی کامپیوترهای معمولی بسیار وقت‌گیر می‌باشد. به‌ویژه در مواردی که نیاز به تکرار شبیه‌سازی می‌باشد (مانند مسئله حاضر)، عملاً استفاده از روش FDTD امکان‌پذیر نمی‌باشد.

با بهره‌گیری از تقارن دورانی نانوآنتن در کنار گسیل‌کننده می‌توان با روش BOR-FDTD ضمن کاهش فضای سه‌بعدی به دوبعدی، مدل‌سازی را بر روی کامپیوترهای معمولی انجام داد. همان‌گونه که در شکل ۲-الف نشان داده شده است، مسئله دارای تقارن دورانی حول محور  $Z$

<sup>1</sup> Total Field/Scattered Field

برای نرخ فلئورسانس به دست می‌آید. برای مدل‌سازی از یک نانوذره‌ی طلا به شعاع ۵۰ نانومتر که در محیطی با ضریب گذردهی ۲/۲۵ قرار دارد، استفاده می‌شود.



شکل ۳- محل قرارگیری میدان الکتریکی و مغناطیسی بر روی هر سلول الف) فضای FDTD سه‌بعدی در دستگاه استوانه‌ای و ب) فضای BOR-FDTD [۱۳]

### ۵-۱- محاسبه میدان نزدیک

برای محاسبه میدان الکتریکی در نزدیکی نانوانتن مطابق شکل ۴ فضای محاسباتی را طراحی می‌کنیم. با تکنیک TFSF یک موج تخت با طول موج ۶۵۰ نانومتر از سمت

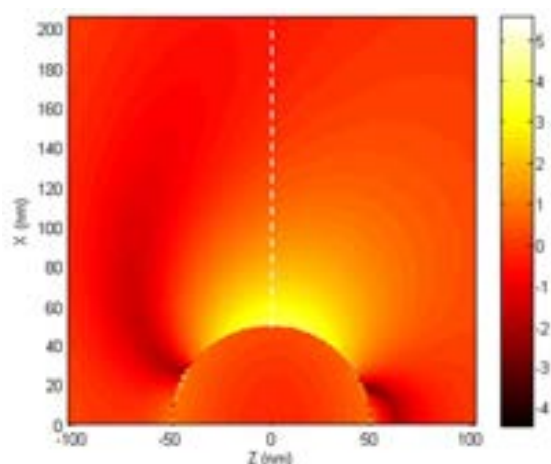
$$E_r^{n+1}(i,j) = \left(1 - \frac{\sigma \Delta t}{2\epsilon_r}\right) E_r^n(i,j) - \frac{\Delta t}{\epsilon_r \left(1 + \frac{\sigma \Delta t}{2\epsilon_r}\right)} \times \left[ \frac{H_\phi^{n+1/2}(i,j) - H_\phi^{n+1/2}(i,j-1)}{\Delta z} \right] - \frac{m \Delta t}{\epsilon_r \left(1 + \frac{\sigma \Delta t}{2\epsilon_r}\right)} \frac{H_z^{n+1/2}(i,j)}{r_{i+1/2}} \quad (6)$$

سایر معادلات به‌هنگام‌سازی برای دیگر مؤلفه‌های میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی به‌طور مشابه به دست می‌آیند. بدین ترتیب، مسئله سه بعدی را به هم ارز دوبعدی آن (فضای دو بعدی با شش مؤلفه میدان) کاهش می‌دهیم که حاصل، کاهش قابل‌ملاحظه‌ای در حافظه کامپیوتر و زمان اجرای برنامه می‌باشد. قابل ذکر است که در مسائل سه‌بعدی حافظه مورد نیاز متناسب با  $N^3$  و زمان اجرا متناسب با  $N^4$  می‌باشد که  $N$  تعداد سلول‌های به‌کار رفته در راستای  $X, Y, Z$  می‌باشد. این درحالی است که در مسائل دوبعدی (و همچنین در روش BOR-FDTD) حافظه مورد نیاز متناسب با  $N^2$  و زمان اجرا متناسب با  $N^3$  می‌باشد. کارایی و دقت این روش در مدل‌سازی مسائل گوناگون الکترومغناطیسی مانند پراکندگی امواج الکترومغناطیسی [۱۵]، رادار زیرسطحی [۱۶]، لنزهای اپتیکی [۱۷] و کاواک تشدید [۱۸] به تأیید رسیده است.

### ۵- مدل‌سازی و طراحی نانوانتن

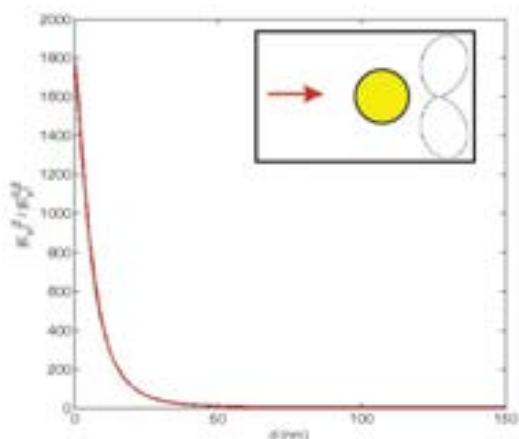
همان‌گونه که در بخش دوم اشاره شد نرخ فلئورسانس به میدان الکتریکی در محل گسیل‌کننده، بهره‌ی آنتن و عامل پورسل بستگی دارد. در این بخش به نحوه محاسبه این کمیت‌ها با روش BOR-FDTD و بررسی وابستگی آن‌ها به فاصله گسیل‌کننده از نانوانتن می‌پردازیم. نشان می‌دهیم که با انتخاب مناسب فاصله مقدار بیشینه‌ای

شکل ۶ الگوی تابشی ناشی از مولکول در مجاورت نانوکره طلا نشان داده شده است.



شکل ۵- نمودار لگاریتمی نسبت مولفه‌ی X میدان الکتریکی در حضور نانوآنتن به مولفه‌ی X میدان الکتریکی در محیط همگن

$$\log \left( \frac{|E_x|}{|E_x^0|} \right)$$

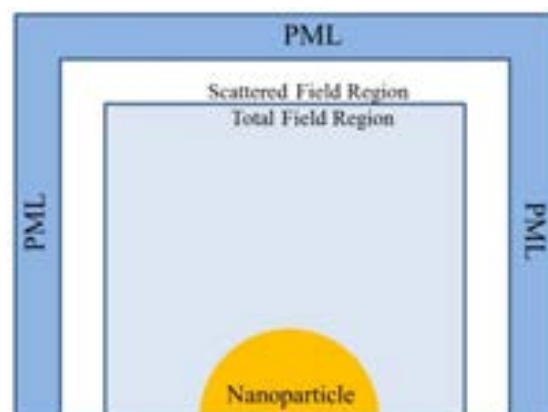


شکل ۶- تغییرات شدت میدان الکتریکی بهنجار برحسب فاصله از سطح نانوذره در امتداد خط چین (شکل ۵). در بالای شکل، الگوی تابشی ناشی از مولکول در مجاورت نانوکره طلا نشان داده شده است.

#### ۵-۲- محاسبه توان تابش

برای این منظور به یک آشکارساز که عبارت است از یک سطح بسته اطراف دوقطبی نیاز داریم. در هر گام زمانی با در اختیار داشتن میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی بر روی این سطح می‌توان بردار پوینتینگ (S) را محاسبه و سپس توان کل تابش شده توسط دوقطبی را به دست آورد:

چپ وارد ناحیه میدان کل شده و پس از برهم‌کنش با نانوذره در مرز سمت راست جذب می‌شود. در اطراف فضای شبیه‌سازی از شرایط مرزی PML برای جلوگیری از بازتاب‌های غیرفیزیکی استفاده می‌کنیم. شبیه‌سازی را یک بار بدون نانوذره و بار دیگر با وجود نانوذره انجام داده و نسبت شدت میدان الکتریکی را محاسبه می‌نماییم. نتیجه محاسبات در شکل ۵ نشان داده شده است.

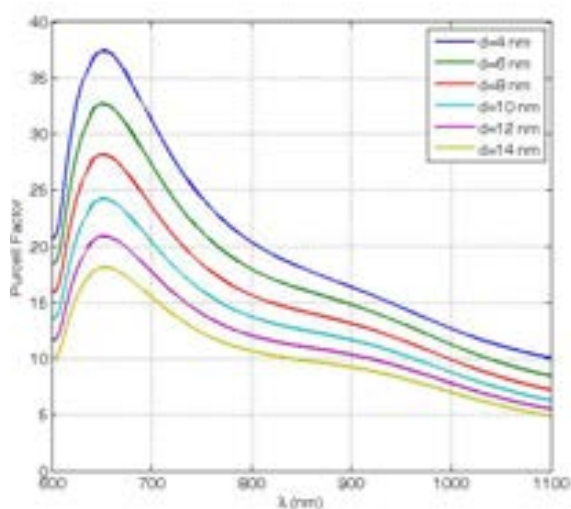


شکل ۴- فضای مدل‌سازی BOR-FDTD برای محاسبه میدان نزدیک در اطراف نانوذره طلا

در شکل ۶ تغییرات شدت میدان الکتریکی بهنجار به صورت تابعی از فاصله از سطح نانوذره در امتداد خطی موازی با محور Xها که از نقطه  $z=0$  می‌گذرد، نشان داده شده است. شدت میدان الکتریکی در سطح نانوذره دارای بیشترین مقدار می‌باشد و با دور شدن از سطح به سرعت کاهش می‌یابد.

نانوآنتن‌ها علاوه بر افزایش شدت میدان الکتریکی، نقش مؤثری در تغییر الگوی تابشی و جهت‌دهی به گسیل مولکولی بر عهده دارند. در صورتی که مولکول با نانوآنتن جفت‌شدگی قوی داشته باشد، انرژی به مدهای پلاسمون سطحی انتقال و به میدان دور تابیده می‌شود. بنابراین الگوی تابشی به طور کامل توسط نانوآنتن تعیین می‌شود [۱۹]. در سال‌های اخیر، تأثیر ساختارهای گوناگون بر روی الگوی تابشی و بهره‌گیری از آن به منظور کنترل گسیل مولکولی به صورت نظری [۲۰-۲۴] و آزمایشگاهی [۲۵ و ۲۶] به تفصیل مورد بررسی قرار گرفته است. در

حضور نانوذره انجام داده و توان تابشی را با انتگرال‌گیری از بردار پوئین‌تینگ بر روی سطح  $S_2$  (شکل ۷) محاسبه می‌کنیم. نتایج محاسبات در شکل ۹ دیده می‌شود. همان‌گونه که مشاهده می‌شود عامل پورسل به طول موج نور فرودی بستگی دارد و دارای یک بیشینه در طول موج ۶۵۰ نانومتر می‌باشد. علاوه بر این با کاهش فاصله گسیل‌کننده از نانوذره عامل پورسل افزایش می‌یابد.



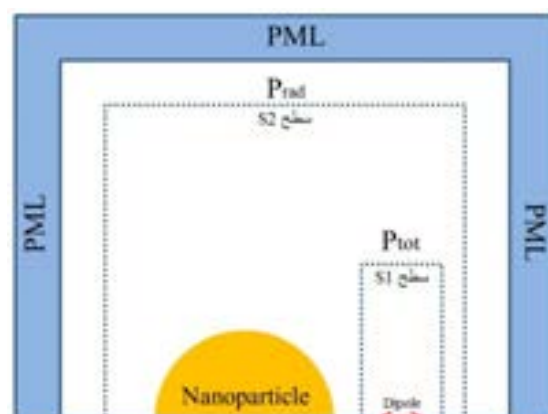
شکل ۹- عامل پورسل به ازای فواصل مختلف گسیل‌کننده از نانوانتن

#### ۴-۵- محاسبه بهره آنتن

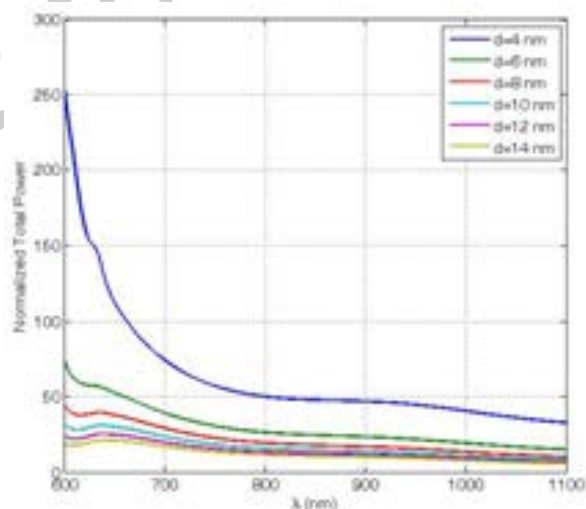
همان‌گونه که اشاره شد بخشی از انرژی تابش شده دوقطبی توسط نانوذره جذب و به گرما تبدیل می‌شود. بنابراین توان تابشی نانوانتن کمتر از توان تابش شده توسط دوقطبی می‌باشد. برای محاسبه بهره آنتن از دو آشکارساز مطابق شکل ۷ استفاده می‌کنیم. آشکارسازی که دوقطبی و نانوذره را در برمی‌گیرد می‌تواند توان تابشی نانوانتن را محاسبه کند. نتایج محاسبات در شکل ۱۰ دیده می‌شود. برخلاف عامل پورسل، بهره آنتن با نزدیک کردن گسیل‌کننده به نانوانتن کاهش می‌یابد. دلیل این امر، افزایش اتلاف انرژی درون نانوذره‌ی طلا می‌باشد.

$$p = \oint S \cdot \hat{n} d\vec{a} \quad (7)$$

که  $\hat{n}$  بردار یکه عمود بر سطح  $S_1$ ، سطح آشکارسازی که دوقطبی را در برمی‌گیرد (شکل ۷)، می‌باشد. در شکل ۸ آهنگ تابش توسط دوقطبی در فواصل مختلف از نانوذره نشان داده شده است.



شکل ۷- فضای مدل‌سازی BOR-FDTD برای محاسبه توان تابش، عامل پورسل و بهره آنتن



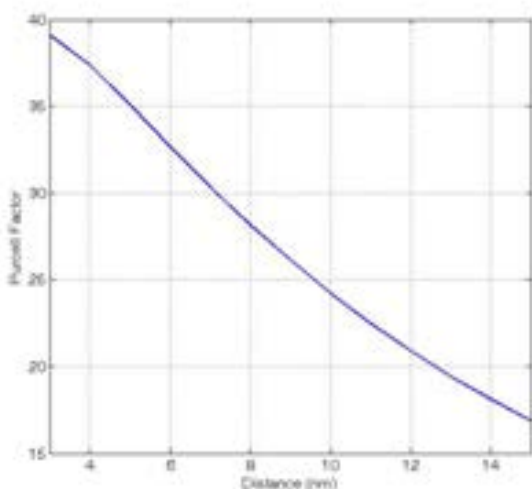
شکل ۸- توان تابش کل بهنجار به ازای فواصل مختلف گسیل‌کننده از نانوانتن

#### ۳-۵- محاسبه عامل پورسل

همان‌گونه که در بخش ۲ اشاره شد، عامل پورسل عبارت است از نسبت توان تابشی گسیل‌کننده در حضور نانوذره به توان تابشی در محیط همگن. برای محاسبه عامل پورسل شبیه‌سازی را یک بار بدون نانوذره و بار دیگر با

فواصل کنترل‌شده از یک نانوذره‌ی طلا قرار داده و افزایش فلئورسانس را به‌صورت تابعی از مکان مولکول اندازه‌گیری کنند [۷].

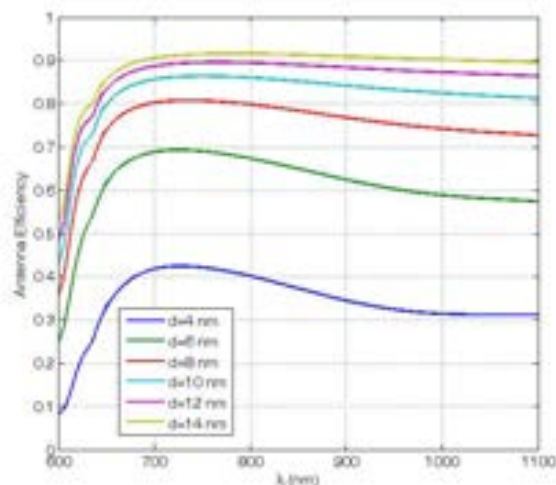
تاثیر نانوآنتن بر تقویت سیگنال فلئورسانس مولکول‌هایی با بهره‌ی کوانتومی پایین‌تر از یک بسیار چشمگیرتر می‌باشد. اندازه‌گیری سیگنال فلئورسانس تک مولکول به دلیل وجود نویز و مشکلات فنی دیگر امکان‌پذیر نمی‌باشد. اما با استفاده از نانوآنتن می‌توان این سیگنال را تا چند هزار برابر افزایش داد به‌گونه‌ای که توسط آشکارسازهای معمولی قابل اندازه‌گیری باشند. در شکل ۱۴ تقویت سیگنال فلئورسانس برای مولکول‌هایی با  $\eta_0 = 1, 0.5, 0.2$  نمایش داده شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، به‌کمک نانوآنتن سیگنال فلئورسانس مولکولی با  $\eta_0 = 0.2$  تا بیش از دو هزار برابر تقویت شده است.



شکل ۱۱- عامل پورسل برای طول موج ۶۵۰ نانومتری به‌صورت تابعی از فاصله

## ۶- نتیجه‌گیری

چگونگی تقویت سیگنال فلئورسانس به‌کمک نانوآنتن توسط روش FDTD مورد بررسی قرار گرفته است. از

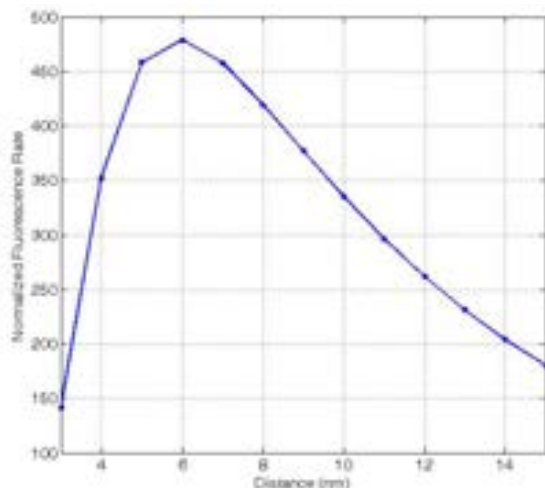


شکل ۱۰- بهره‌ی آنتن برای فواصل گسیل‌کننده از نانوآنتن

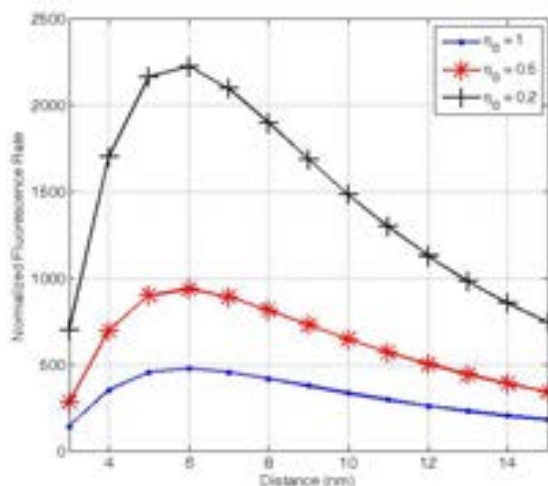
## ۵-۵- محاسبه فلئورسانس

با در اختیار داشتن میدان الکتریکی، عامل پورسل و بهره‌ی آنتن می‌توانیم میزان تقویت فلئورسانس به‌کمک نانوآنتن را محاسبه کنیم. همان‌گونه که در شکل ۹ دیده می‌شود طراحی آنتن (با انتخاب مناسب جنس، شعاع و ضریب گذردهی محیط پیرامون) به‌گونه‌ای است که بیشترین تقویت در طول موج ۶۵۰ نانومتر رخ می‌دهد. بنابراین با استفاده از داده‌های شکل‌های ۹ و ۱۰ بهره‌ی آنتن و عامل پورسل را در این طول موج به ازای فواصل مختلف گسیل‌کننده از نانوآنتن محاسبه می‌کنیم. نتایج حاصل در شکل‌های ۱۱ و ۱۲ مشاهده می‌شود. شکل ۱۳ میزان تقویت سیگنال فلئورسانس را برای یک گسیل‌کننده با بهره‌ی کوانتومی  $\eta_0 = 1$  نشان می‌دهد. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، با طراحی مناسب نانوآنتن می‌توان سیگنال‌های فلئورسانس را تا بیش از ۴۵۰ برابر تقویت کرد. این مقدار بیشینه در فاصله ۶ نانومتری رخ می‌دهد. بنابراین جهت‌گیری و مکان گسیل‌کننده نسبت به نانوآنتن بسیار مهم می‌باشد و باید به‌طور دقیق مشخص شود. خوشبختانه انجام این کار با فناوری موجود امکان‌پذیر می‌باشد. برای اولین بار پژوهشگران در گروه نانوپتیک دانشگاه ETH موفق شدند یک مولکول را در





شکل ۱۳- آهنگ فلئورسانس بهنجار برای طول موج ۶۵۰ نانومتر به صورت تابعی از فاصله



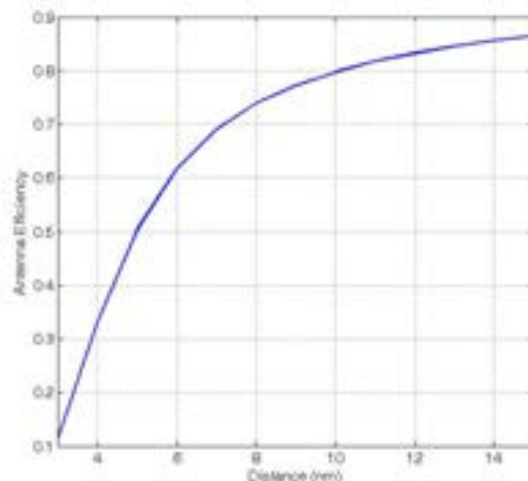
شکل ۱۴- مقایسه آهنگ فلئورسانس بهنجار برای گسیل‌کننده‌هایی با بهره‌ی کوانتومی مختلف

### تقدیر و تشکر

از همکاری گروه نانوپتیک دانشگاه ETH به ویژه پروفیسور وحید صندوقدار و دکتر ماریو آجو و پشتیبانی مالی دانشگاه ETH در قالب پروژه (CDM) صمیمانه تشکر می‌کنم. این کار با پشتیبانی مالی شورای پژوهشی دانشگاه خلیج فارس در قالب طرح پژوهشی طراحی نانوانتن برای افزایش فلئورسانس ملکول‌ها انجام شده‌است.

آنجایی که حل دقیق این مسئله در سه بعد به حافظه بسیار بالا و زمان شبیه‌سازی بسیار طولانی نیازمند است، با بهره‌گیری از تقارن دورانی مسئله و تکنیک BOR-FDTD مسئله سه‌بعدی را به دو بعد کاهش داده‌ایم، به‌گونه‌ای که بتوان آن را بر روی کامپیوترهای معمولی مدل‌سازی نمود.

با بررسی پارامترهای موثر در افزایش سیگنال فلئورسانس نشان داده شد که با نزدیک شدن گسیل‌کننده به نانوانتن عامل پورسل و همچنین شدت میدان الکتریکی در مجاورت نانوذره افزایش می‌یابد، اما بهره‌ی آنتن به دلیل اتلاف انرژی درون نانوذره طلا کاهش می‌یابد. بنابراین برای دستیابی به بالاترین میزان تقویت سیگنال، فاصله گسیل‌کننده از نانوانتن را باید با دقت محاسبه و در طراحی نانوانتن در نظر گرفت. فاصله‌ی بهینه به عواملی از قبیل طول موج نور فرودی، شکل، جنس و اندازه‌ی نانوانتن و ضریب گذردهی محیط پیرامون بستگی دارد [۲-۵].



شکل ۱۲- بهره‌ی آنتن برای طول موج ۶۵۰ نانومتری به صورت تابعی از فاصله

## مراجع

- [1] Bohren, C. F., Huffman, D. R. (1983). "Absorption and scattering of light by small particles". John Wiley & Sons, Inc. New York.
- [2] Mohammadi, A., Sandoghdar, V., Agio, M. (2008). "Gold nanorods and nanospheroids for enhancing spontaneous emission". *New Journal of Physics*, Vol. 10, No. 10, pp. 105015-105028.
- [3] Mohammadi, A., Kaminski, F., Sandoghdar, V., Agio, M. (2009). "Spheroidal Nanoparticles as Nanoantennas for Fluorescence Enhancement". *Int. J. Nanotechnol.*, Vol. 6, No. 10/11, pp. 902-914.
- [4] Mohammadi, A., Sandoghdar, V., Agio, M. (2009). "Gold, copper, silver and aluminum nanoantennas to enhance spontaneous emission". *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, Vol. 6, No. 9, pp. 2024-2030.
- [5] Mohammadi, A., Kaminski, F., Sandoghdar, V., Agio, M. (2010). "Fluorescence enhancement with the optical (Bi-) conical antenna". *J. Phys. Chem. C*, Vol. 114, No. 116, pp. 7372-7377.
- [6] Rogobete, L., Kaminski, F., Agio, M., Sandoghdar, V. (2007). "Design of plasmonic nanoantennae for enhancing spontaneous emission". *Optics letters*, Vol. 32, No. 12, pp. 1623-1625.
- [7] Kuhn, S., Hakanson, U., Rogobete, L., Sandoghdar, V. (2006). "Enhancement of single-molecule fluorescence using a gold nanoparticle as an optical nanoantenna". *Physical review letters*, Vol. 97, No. 1, pp. 017402-017405.
- [8] Hallermann, F., Rockstuhl, C., Fahr, F., Seifert, G., Wackerow, S., Graener, H., Plessen, G.V., Lederer, F. (2008). "On the use of localized plasmon polaritons in solar cells". *Phys. Status Solidi A*, Vol. 205, No. 12, pp. 2844-2861.
- [9] Willets, K. A., Van Duyne, R.P. (2007). "Localized surface plasmon spectroscopy and sensing". *Ann. Rev. Phys. Chem.*, Vol. 58, pp. 267-297.
- [10] Zhang, J., Fu, Y., Chowdhury, M.H., Lakowicz, J.R. (2007). "Metal-enhanced single-molecule fluorescence on silver particle monomer and dimer: coupling effect between metal particles". *Nano Lett.* Vol. 7, pp. 2101-2107.
- [11] Anger, P., Bharadwaj, P., Novotny, L. (2006). "Enhancement and quenching of single-molecule fluorescence". *Phys. Rev. Lett.* Vol. 96, pp. 113002-113005.
- [12] Novotny L., Hecht, B. (2006). "Principles of Nano-Optics". Cambridge University Press, Cambridge, England.
- [13] Taflove, A., Hagness, S. C. (2005). "Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method". Artech House, Norwood.
- [14] Yee, K.S. (1966). "Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems involving Maxwell's Equations in Isotropic Media". *IEEE Trans. Antennas Propag.*, Vol. AP-14, No. 3, pp. 302-307.
- [15] Bitt, C. L. (1989). "Solution of electromagnetic scattering problems using time domain techniques". *IEEE Trans. Antenna and propagat.*, Vol. 37, pp. 1181-1192.
- [16] Moghaddam, M.E., Yannakakis, J., Chew, W.C. (1991). "Modeling of the subsurface interface radar". *Journal of Electromagnetic Waves and Applications*, Vol. 5, pp. 17-39.
- [17] Davidson, D.B., Ziolkoski, R.W. (1994). "Body of revolution finite difference time-domain modeling of space time focusing by a three dimensional lens". *J. Optical Society of America A*, Vol. 11, No. 4, pp. 1471-1490.
- [18] Chen, Y., Mittra, R. (1996). "Finite-difference time-domain algorithm for solving Maxwell's equations in rotationally symmetric geometries". *IEEE Trans. Microwave Theory Tech*, Vol. 44, pp. 832-839.
- [19] Taminiau, T.H., Stefani, F.D., Segerink, F.B., van Hulst, N.F. (2008). "Optical antennas direct single-molecule emission". *Nat. Photon.*, Vol. 2, No. 4, pp. 234-237.
- [20] Blanco, L.A., Garcia de Abajo, F.J. (2004). "Spontaneous light emission in complex nanostructures". *Phys. Rev. B*, Vol. 69, No. 20, pp. 205414-205425.

- [21] Bonod, N., Devilez, A., Rolly, B., Bidault, S., Stout, B. (2010). "Ultracompact and unidirectional metallic antennas". *Phys. Rev. B*, Vol. 82, No. 11, pp. 115429-115443.
- [22] Chen, X.W., Sandoghdar V., Agio, M. (2010). "Nanofocusing radially-polarized beams for high-throughput funneling of optical energy to the near field". *Opt. Express*, Vol. 18, No. 10, pp. 10878–10887.
- [23] Li, J., Salandrino A., Engheta N. (2007). "Shaping light beams in the nanometer scale: A yagi-uda nanoantenna in the optical domain". *Phys. Rev. B*, Vol. 76, No. 24, pp. 245403-245419.
- [24] Novotny, L. (1996). "Single molecule fluorescence in inhomogeneous environments". *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 69, No. 25, pp. 3806–3808.
- [25] Curto, A.G., Volpe, G., Taminiu, T.H., Kreuzer, M.P., Quidant, R., van Hulst, N.F. (2010). "Unidirectional emission of a quantum dot coupled to a nanoantenna". *Science*, Vol. 329, pp. 930–933.
- [26] Kuhn, S., Mori G., Agio, M., Sandoghdar, V. (2008). "Modification of single molecule fluorescence close to a nanostructure: radiation pattern, spontaneous emission and quenching". *Mol. Phys.*, Vol. 106, No. 7, pp. 893–908.

Archive of SID