

چکیده

محاسبه افزایش فلئوئورسانس مولکول در کنار نانوانتن‌ها با روش المان مرزی

آیدا فیروزی

در این پایان نامه به محاسبه افزایش نرخ فلئوئورسانس به کمک نانوانتن‌های پلاسمونیک پرداخته می‌شود. به این منظور، از هندسه ساده (نانوذره کروی) شروع و سپس اشکال پیچیده‌تر از جمله بیضی‌گون، نانومیله و مخروطی شکل را مورد مطالعه قرار می‌دهیم. تاثیر پارامترهای گوناگون از جمله هندسه، جنس و ابعاد نانوانتن، فاصله گسیل‌کننده از نانوانتن، ضریب شکست محیط زمینه و ... مورد مطالعه قرار می‌گیرد. نشان می‌دهیم که با تنظیم این پارامترها نرخ فلئوئورسانس به میزان قابل توجهی افزایش می‌یابد. علاوه بر این، با تغییر این پارامترهای تاثیرگذار می‌توان قله تشدید پلاسمون سطحی جایگزیده را در محدوده طول موجی دلخواه تنظیم نمود. نرخ گسیل خودبه‌خود به راستای قرار گرفتن گسیل‌کننده و مکان آن نسبت به نانوانتن بستگی دارد. قرار دادن مولکول در یک مکان خاص با جهت‌گیری مشخص در عمل به طور دقیق امکان‌پذیر نیست و با خطا همراه است. با محاسبه تغییرات ایجاد شده در طیف گسیل مولکول و الگوی تابشی ناشی از جابه‌جایی مولکول نسبت به نانوانتن، می‌توان هم‌خوانی بهتری میان داده‌های آزمایشگاهی و محاسبات تئوری به دست آورد. علاوه بر این، امکان پیش‌بینی پیکربندی آزمایشگاهی مناسب برای دستیابی به نرخ موردنظر فراهم می‌گردد.

در گام بعد، به طراحی و مدل‌سازی نانوانتن‌های مبتنی برهم‌کنش نور با نانوذرات جفت‌شده فلزی می‌پردازیم. نشان داده می‌شود که وجود یک نانوذره دیگر در فاصله کمی از نانوذره اول، منجر به جفت‌شدگی بین مدهای پلاسمونیک و در نتیجه افزایش قابل توجه در نرخ فلئوئورسانس می‌گردد.

بررسی نرخ فلئوئورسانس در قالب دو فرآیند برانگیختگی و گسیل خودبه‌خودی صورت می‌گیرد. با در نظر گرفتن مدل کلاسیکی تابش یک دوقطبی در کنار نانو ساختار، محاسبات مورد نیاز را در حوزه الکتروپدنامیک کلاسیک و با حل معادلات برداری ماکسول و اعمال شرایط مرزی مناسب انجام می‌دهد. حل این معادلات برای هندسه‌های گوناگون به صورت تحلیلی امکان‌پذیر نمی‌باشد و باید از روش‌های محاسباتی استفاده نمود. در این پایان‌نامه از روش المان مرزی برای محاسبه نرخ فلئوئورسانس یک گسیل‌کننده در کنار نانوانتن پلاسمونیک استفاده می‌کنیم. از مهم‌ترین مزایای این روش می‌توان به سرعت بالا و دقت بسیار خوب آن اشاره کرد.

کلید واژه: افزایش فلئوئورسانس، نانوانتن‌ها، روش المان مرزی