

Study of optical absorption and dispersion in a semiconductor-metal nanoparticle hybrid system: Exciton-plasmon coupling

Tayebeh Naseri¹
Nader Daneshfar^{1*}
Saba Shafiipour¹
Mahsa Moradbeigi¹

Received: 2016-08-29

Accept: 2018-03-14

Abstract

In this paper, optical properties of a hybrid system consisting of a semiconductor quantum dot placed in the vicinity of a metal (plasmonic) nanoparticle with spherical and ellipsoidal symmetry is investigated. An analytical expression for the absorption and dispersion using the density-matrix approach via semi-classical theory is derived and numerically discussed. In our numerical calculations, we have used Au and Ag metals, because these metals have predominately been the materials of choice for plasmonic applications around the optical frequencies. It is shown that the optical dispersion and absorption strongly depends on the particle size and shape, the quantum dot-nanoparticle distance (the semiconductor quantum dot-plasmonic nanoparticle center-to-center distance), and the dielectric constant of host matrix. It is important to note that dependences of optical properties of a hybrid system on changing and adjusting of the geometrical parameters of system can be used for optical sensing purposes and design of tunable biosensors.

Keywords: *Plasmon-exciting coupling, Absorption and dispersion, Density matrix.*

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

* Corresponding Author; E-mail: ndaneshfar@gmail.com

مطالعه جذب و پاشندگی نوری در سیستم هیبریدی نیمه رسانا- نانوذره فلزی: جفت شدگی پلاسمون-اکسایتون^۱

طیبه ناصری^۱، نادر دانش فر^{۲*}، صبا شفیعی پور^۲، مهسا مرادیگی^۲

تاریخ ارسال: ۹۵/۶/۸

تاریخ تصویب: ۱۳۹۶/۱۲/۲۳

چکیده

در این مقاله، به بررسی خواص اپتیکی یک سیستم هیبریدی متشکل از یک نیمه رسانای (نقطه کوانتومی) که در مجاورت یک نانوذره فلزی با تقارن کروی و بیضوی قرار دارد، پرداخته می شود. جذب و پاشندگی مربوط به میدان الکترومغناطیسی در این سیستم، با استفاده از نظریه نیمه کلاسیکی و از روش ماتریس چگالی به دست آمده و به صورت عددی محاسبه شده اند. در شبیه سازی های عددی، جنس نانوذره از فلزات طلا و نقره انتخاب شده است، زیرا این فلزات گزینه های مناسبی برای کاربردهای پلاسمونیک در فرکانس های نوری هستند. نشان داده ایم که جذب و پاشندگی نوری به پارامترهایی همچون شکل و اندازه ذره، فاصله ی بین نانوذره و نقطه کوانتومی و ثابت دی الکتریک محیط اطراف بستگی دارد. شایان ذکر است که بررسی وابستگی خواص نوری

^۱ شناسه دیجیتال (DOI): 1022051/jap.2018.11499.1050

^۲ گروه فیزیک، دانشگاه رازی، کرمانشاه، ایران.

* نویسنده مسئول: ndaneshfar@gmail.com

سیستم هیبریدی به تغییر و تنظیم پارامترهای هندسی سیستم را می‌توان برای اهداف حسگری نوری و طراحی نانوزیست‌حسگرهای تنظیم‌پذیر به کار برد.

واژه‌های کلیدی: جفت‌شدگی پلاسمون-اکسیتون، جذب و پاشندگی، ماتریس چگالی.

۱. مقدمه

فناوری نانو امکان ترکیب نانو ساختارها را با مواد مختلف و ویژگی‌های مختلف در یک ساختار فراهم می‌کند. یک سیستم هیبریدی متشکل از یک نقطه کوانتومی جفت‌شده با یک نانوذره فلزی، الگوی جدیدی در خواص اپتیکی نانو ساختارها فراهم می‌کند. به همین دلیل در سال‌های اخیر اهمیت قابل توجهی به مطالعه‌ی خواص نوری در چنین ساختارهایی داده شده است [۱-۵]. نقاط کوانتومی با توجه به خواص نوری منحصر به فرد خود و نانوذرات فلزی به دلیل خواص پراکندگی نور و پلاسمون‌های سطحی، بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند. زمانی که یک نقطه کوانتومی در مجاورت یک نانوکریه فلزی قرار می‌گیرد، این دو ذره می‌توانند از نظر الکتریکی با هم جفت شوند و قدرت جفت‌شدگی آن‌ها بستگی به ساختار این ترکیب دارد، که چنین ساختاری می‌تواند باعث به وجود آمدن اثرات فیزیکی متفاوتی شود [۶، ۷].

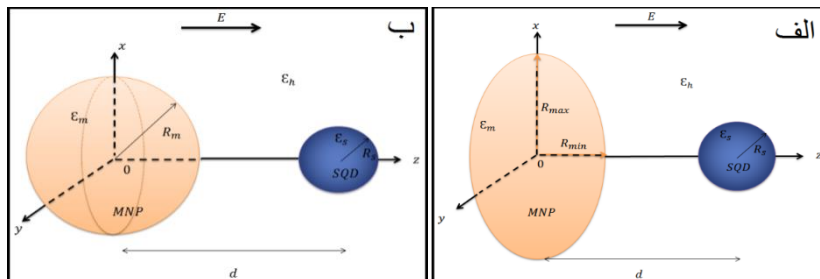
در این مقاله، خواص اپتیکی یک سیستم هیبریدی نقطه کوانتومی-نانوذره‌ی پلاسمونیک بیضوی و کروی بررسی شده است. به عبارت دیگر جذب و پاشندگی یک سیستم پلاسمونیک-اکسیتون که متشکل از یک نانوذره فلزی بیضوی و کروی شکل در نزدیکی یک نقطه کوانتومی می‌باشد، مطالعه شده است. اثر پارامترهایی همچون فاصله‌ی بین دو ذره، شعاع و جنس و ساختار هندسی نانوذره فلزی بیضوی و جنس محیط اطراف در جذب و پاشندگی بررسی شده است و وابستگی خواص نوری سیستم نقطه کوانتومی-نانوذره به پارامترهای فوق نشان داده می‌شود.

۲. مدل فیزیکی و تئوری مسئله

در بررسی برهمکنش نور با ماده سه نظریه وجود دارد: ۱- نظریه کلاسیکی که نور و ماده را به صورت کاملاً کلاسیکی در نظر می‌گیرد. ۲- نظریه شبه کلاسیکی که ماده را به صورت یک سیستم کوانتومی و نور را به صورت کلاسیکی در نظر می‌گیرد. ۳- نظریه کوانتومی که نور و ماده را به صورت کوانتومی بررسی می‌کند که در این صورت باید کوانتتش میدان برای امواج الکترومغناطیسی در نظر گرفته شود و در نتیجه نور به صورت ترکیبی از عملگرهای خلق و فنا به دست می‌آید. به صورت عمده این دست مسائل برهمکنشی، به صورت شبه کلاسیکی بررسی

می شود. برای بررسی محاسبات به صورت کاملاً کوانتومی، نیاز به معرفی مجموعه‌ای از عملگرها و انجام محاسبات بر اساس عملگرهای بالابرنده (خلق) و پایین‌برنده (فنا) اتم و همچنین عملگرهای خلق و فنا می‌باشد. با توجه به محاسبات تحلیلی انجام شده پیشین نتایج هر نظریه کوانتومی در حالت حدی با نظریه شبه کلاسیکی همخوانی دارد [۸]. به هر حال، در این پژوهش از رهیافت نیمه کلاسیک استفاده می‌شود که در آن اتم به صورت کوانتیده و میدان به صورت کلاسیک است. ساختار مورد نظر در شکل ۱ الف نشان داده شده است، که در آن یک نقطه کوانتومی به شعاع R_S و ثابت دی‌الکتریک ϵ_s با فاصله‌ی مرکز تا مرکز d از یک نانوذره فلزی بیضوی طلا با شعاع بزرگ R_{max} ، شعاع کوچک R_{min} و ثابت دی‌الکتریک ϵ_m قرار گرفته است و میدان $E = E_0 \cos \omega t$ به این سیستم وارد می‌شود، که E_0 دامنه‌ی میدان و ω فرکانس نور فرودی می‌باشد. در این پژوهش به بررسی ویژگی اپتیکی جذب و پاشندگی سیستم هیبریدی متشکل از نقطه کوانتومی و نانوذره فلزی پرداخته شده است. برای محاسبه جذب در سیستم از نظریه کوانتومی و تئوری ماتریس چگالی استفاده شده است. تحولات زمانی عناصر ماتریس چگالی مربوط به سیستم بررسی می‌شود. بنابراین وابستگی مکانی میدان در محاسبات وارد نمی‌شود و عملاً جذب و پاشندگی تابعی از موقعیت مکانی میدان الکترومغناطیسی فرودی نمی‌باشند و در نتیجه وابستگی مکانی میدان تابشی لحاظ نشده است.

در حالتی که $R_{max} = R_{min} = R_m$ باشد سیستم متشکل از یک نانوذره فلزی کروی و یک نقطه کوانتومی به شعاع R_S می‌باشد که در فاصله‌ی d از یکدیگر قرار گرفته‌اند (مطابق شکل ۱ ب).



شکل ۱ الف) سیستم هیبرید نقطه کوانتومی شامل یک شهبه‌سانای نقطه کوانتومی با شعاع R_S و یک نانوذره فلزی بیضوی با شعاع بزرگ R_{max} و شعاع کوچک R_{min} که در فاصله‌ی d از هم قرار گرفته‌اند. ب) سیستم هیبرید نقطه کوانتومی شامل یک شهبه‌سانای نقطه کوانتومی با شعاع R_S و یک نانوذره فلزی کروی با شعاع R_m که در فاصله‌ی d از هم قرار گرفته‌اند.

همچنین میدان فرودی یک موج تخت تابع زمان است و یک میدان کلاسیکی می‌باشد. شبه رسانای نقطه کوانتومی (SQD)^۱ را به صورت یک سیستم دوترازه با انرژی $\hbar\omega_0$ در نظر می‌گیریم. هامیلتونی برای سیستم نقطه کوانتومی دوترازه به صورت زیر نوشته می‌شود [۹]:

$$H_{SQD} = \hbar\omega_0 \hat{a}^+ \hat{a} - \mu E_{SQD} (\hat{a} + \hat{a}^+) \quad (۱)$$

که جمله اول انرژی سیستم نقطه کوانتومی (انرژی سیستم دوترازه) و جمله دوم هامیلتونی اختلالی بر اثر اعمال میدان می‌باشد. \hat{a} و \hat{a}^+ عملگرهای افزایشده و کاهشدهی اکسیتون و μ گشتاور دوقطبی الکتریکی می‌باشد. E_{SQD} میدان الکتریکی محسوس توسط نقطه کوانتومی است که به صورت مجموع میدان الکتریکی خارجی و میدان داخلی ایجاد شده توسط قطبش نانوذره‌ی فلزی (میدان حاصل از برهمکنش پلاسمون اکسیتون) می‌باشد:

$$E_{SQD} = \frac{1}{\epsilon_{effs}} (E + \frac{1}{4\pi\epsilon_h} \frac{S_{\alpha} P_{MNP}}{d^3}) \quad (۲)$$

که در آن، اندیس MNP بیانگر نانوذره‌ی فلزی می‌باشد، ϵ_h ثابت دی‌الکتریک محیط اطراف، $\epsilon_{effs} = \frac{2\epsilon_h + \epsilon_s}{3\epsilon_h}$ و S_{α} پارامتری است که هنگامی که میدان اعمالی موازی (عمودی) با محور سیستم باشد برابر با (-1) و $S_{\alpha} = 2$ می‌باشد. رابطه‌ی بین P_{MNP} و E_{MNP} عبارت است از:

$$P_{MNP} = \alpha E_{MNP} \quad (۳)$$

که در آن، α قطبش‌پذیری نانوذره است و برای نانوذره‌ی فلزی بیضوی به صورت زیر نوشته می‌شود [۱۰]:

$$\alpha = \left[\left(\frac{\epsilon_m(\omega) - \epsilon_h}{\chi \epsilon_h + \epsilon_m(\omega)} \right) \frac{R_{max}^3 (1 + \chi) \xi_0^2 + 1}{3 \xi_0^2} \right] \quad (۴)$$

که در آن χ حساسیت الکتریکی و عبارت است از:

$$\chi = -1 - 2 \left[\xi_0^2 - \frac{\xi_0 (\xi_0^2 + 1)}{2} \cos^{-1} \left(\frac{\xi_0^2 - 1}{\xi_0^2 + 1} \right) \right]^{-1} \quad (۵)$$

ξ_0 پارامتری است که به شکل هندسی نانو ذره بستگی دارد،

$$\xi_0 = \left(\frac{R_{max}^2}{R_{min}^2} - 1 \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (۶)$$

با جداسازی قسمت مثبت و منفی فرکانس به دست می‌آوریم:

$$P_{MNP} = \alpha (E_{MNP}^+ e^{-i\omega t} + E_{MNP}^- e^{+i\omega t}) \quad (۷)$$

که در آن، E_{MNP}^+ و E_{MNP}^- قسمت مثبت و منفی فرکانسی میدان الکتریکی محسوس توسط نانوذره‌ی فلزی می‌باشند و $\epsilon_m(\omega)$ ثابت گذردهی فلز است که با استفاده از مدل درود محاسبه می‌شود [۱۰]،

^۱ Semiconductor Quantum Dot

^۲ Metal Nano Particle

$$\epsilon_m(\omega) = \epsilon_{p\infty} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\Gamma\omega} \quad (۸)$$

E_{MNP} به صورت مجموع میدان اعمالی خارجی و میدان داخلی ایجاد شده توسط قطبش نقطه کوانتومی می باشد و به صورت زیر نوشته می شود:

$$E_{MNP} = (E + \frac{1}{4\pi\epsilon_h} \frac{S\alpha P_{SQD}}{\epsilon_{effs} d^3}) \quad (۹)$$

که در آن P_{SQD} قطبش نقطه کوانتومی است و به صورت زیر نوشته می شود:

$$P_{SQD} = \mu(\rho_{12} + \rho_{21}) \quad (۱۰)$$

که ρ_{12} و ρ_{21} مؤلفه های غیر قطری ماتریس چگالی می باشند. با جایگذاری روابط بالا در رابطه ی (۲)، E_{SQD} (میدانی که در نقطه کوانتومی اثر می کند) به دست خواهد آمد،

$$E_{SQD} = \frac{\hbar}{\mu} [(\Omega + G\tilde{\rho}_{21})e^{-i\omega t} + (\Omega^* + G^*\tilde{\rho}_{12})e^{i\omega t}] \quad (۱۱)$$

که

$$\rho_{21} = \tilde{\rho}_{21}e^{-i\omega t} \text{ و } \rho_{12} = \rho_{21}^* \quad (۱۲)$$

Ω فرکانس رابی و G پارامتر خودبرهمکنشی (جفت شدگی) است و برای سیستم هیبریدی نقطه کوانتومی نانوذره ی بیضوی به صورت زیر تعریف می شوند:

$$\Omega = \frac{E_0\mu}{2\hbar\epsilon_{effs}} (1 + \frac{\alpha S\alpha}{4\pi\epsilon_h d^3}) \quad (۱۳)$$

$$G = (\frac{\mu S\alpha}{4\pi\epsilon_h\epsilon_{effs}d^3})^2 \frac{\alpha}{\hbar} \quad (۱۴)$$

در این رابطه، \hbar ثابت پلانک است. قطبش نانوذره ی فلزی کروی (شکل ۱-ب) به صورت زیر نوشته می شود [۱۱]:

$$P_{MNP} = (4\pi\epsilon_h)R_m^3 (\gamma E_{MNP}^+ e^{-i\omega t} + \gamma^* E_{MNP}^- e^{i\omega t}) \quad (۱۵)$$

که در آن $\gamma = \frac{\epsilon_m(\omega) - \epsilon_h}{2\epsilon_h + \epsilon_m(\omega)}$ و R_m شعاع نانوکره می باشد. همچنین، G و Ω برای سیستم هیبریدی نقطه کوانتومی نانوذره ی فلزی کروی به صورت زیر نوشته می شوند:

$$\Omega = \frac{E_0\mu}{2\hbar\epsilon_{effs}} (1 + \frac{\gamma R_m^3 S\alpha}{d^3}) \quad (۱۶)$$

$$G = \frac{\mu^2 \gamma R_m^3 S\alpha^2}{4\pi\hbar\epsilon_h\epsilon_{effs}^2 d^6} \quad (۱۷)$$

جفت شدگی پلاسمون-اکسیتون توسط میدان هایی که بر هر ذره وارد می شود تعریف می شود که شامل میدان خارجی و میدان القایی وارد بر ذره می باشد، که ناشی از قطبش القایی ذره ی دیگر است. قطبش های القایی سبب ایجاد خودبرهمکنشی G می شوند. هنگامی که نقطه کوانتومی قطبیده

می‌شود، این قطبش بارهای تصویری در نانوذره فلزی القا می‌کند سپس بارهای تصویری، نقطه کوانتومی را قطبیده می‌کند.

با جایگذاری رابطه‌ی (۱۱) در رابطه‌ی (۱) هامیلتونی سیستم نقطه کوانتومی دوترازه، که در مجاورت نانوذره فلزی قرار دارد به‌دست می‌آید. معادله‌ی هایزنبرگ در تصویر برهمکنشی برای نقطه کوانتومی در حضور نانوذره فلزی با در نظر گرفتن واهلش‌های نقطه کوانتومی به‌صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\dot{\rho} = \frac{i}{\hbar} [\rho, H_{SQD}] - \Gamma(\rho) \quad (18)$$

$\Gamma(\rho)$ ماتریس واهلش و ρ ماتریس چگالی می‌باشد که $\Gamma_{12} = \Gamma_{21}^* = \frac{\rho_{12}}{T_{20}}$ و $\Gamma_{22} = \frac{\rho_{22}}{\tau_0}$ و $\Gamma_{11} = \frac{\rho_{11}-1}{\tau_0}$ مؤلفه‌های ماتریس واهلش و ρ_{21} و ρ_{22} و ρ_{11} و ρ_{12} مؤلفه‌های ماتریس چگالی و τ_0 و T_{20} زمان‌های واهلش هستند. حال قسمت حقیقی و موهومی مؤلفه‌های ماتریس چگالی را جدا می‌کنیم،

$$\tilde{\rho}_{12} = A + iB \text{ و } \tilde{\rho}_{21} = \tilde{\rho}_{12}^* \text{ و } \Delta = \rho_{11} - \rho_{22} \quad (19)$$

با حل معادله (۱۸) و با استفاده از تقریب موج چرخان، معادلات دیفرانسیل جفت‌شده‌ی زیر به‌دست خواهند آمد:

$$\dot{A} = -\frac{A}{T_{20}} + (\omega - \omega_0)B - (\Omega_I + G_I A - G_R B)\Delta \quad (20)$$

$$\dot{B} = -\frac{B}{T_{20}} - (\omega - \omega_0)A - (\Omega_R + G_R A - G_I B)\Delta \quad (21)$$

$$\dot{\Delta} = \frac{1-\Delta}{\tau_0} + 4\Omega_I A + 4\Omega_R B + 4G_I (A^2 + B^2) \quad (22)$$

با حل معادلات (۲۰) و (۲۱) و در نظر گرفتن شرایط مانا، A و B بر حسب Δ به‌دست خواهند آمد:

$$A = \frac{-[\Delta\Omega_I(\frac{1}{T_{20}} + \Delta G_I) + \Delta\Omega_R((\omega - \omega_0) + G_R \Delta)]}{(\frac{1}{T_{20}} + \Delta G_I)^2 + ((\omega - \omega_0) + G_R \Delta)^2} \quad (23)$$

$$B = \frac{-\Delta\Omega_R(\frac{1}{T_{20}} + \Delta G_I) + \Delta\Omega_I((\omega - \omega_0) + G_R \Delta)}{(\frac{1}{T_{20}} + \Delta G_I)^2 + ((\omega - \omega_0) + G_R \Delta)^2} \quad (24)$$

با جایگذاری معادلات (۲۳) و (۲۴) در معادله (۲۲) و در نظر گرفتن شرایط مانا، معادله‌ی زیر به‌دست خواهد آمد:

$$W_3 \Delta^3 + W_2 \Delta^2 + W_1 \Delta - W_0 = 0 \quad (25)$$

که در آن،

$$W_3 = T_{20}^2 (G_R^2 + G_I^2)$$

$$W_2 = 2T_{20}^2 G_R (\omega - \omega_0) + 2T_{20} G_I - T_{20}^2 (G_R^2 + G_I^2)$$

$$\begin{aligned} W_1 &= [4T_{20}\tau_0\Omega^2 - 2T_{20}G_I + T_{20}^2(\omega - \omega_0)^2 - 2T_{20}^2G_R(\omega - \omega_0) + 1] \\ W_0 &= -T_{20}^2(\omega - \omega_0)^2 - 1 \end{aligned} \quad (26)$$

از آنجا که معادله‌ی (۲۵) یک معادله‌ی درجه سوم است، سه ریشه دارد. با حل این معادله جواب‌های زیر به دست می‌آید

$$\Delta_1 = (P_1 + P_2) - \frac{W_2}{3W_3} \quad (27)$$

$$\Delta_2 = -\frac{1}{2}(P_1 + P_2) - \frac{W_2}{3W_3} + \frac{i\sqrt{3}}{2}(P_1 - P_2) \quad (28)$$

$$\Delta_3 = -\frac{1}{2}(P_1 + P_2) - \frac{W_2}{3W_3} - \frac{i\sqrt{3}}{2}(P_1 - P_2) \quad (29)$$

که در آن P_1 و P_2 عبارتند از

$$P_1 = \left[\frac{\frac{W_1W_2 - 3W_0}{W_3W_3} - \frac{W_2^3}{27W_3^3} - \left(\frac{W_1}{3W_3} - \frac{W_2^2}{9W_3^2} \right)^3 + \left(\frac{\frac{W_1W_2 - 3W_0}{W_3W_3} - \frac{W_2^3}{27W_3^3} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \Bigg]^{1/3} \quad (30)$$

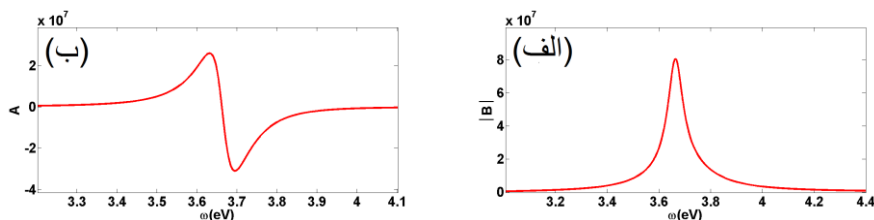
$$P_2 = \left[\frac{\frac{W_1W_2 - 3W_0}{W_3W_3} - \frac{W_2^3}{27W_3^3} - \left(\frac{W_1}{3W_3} - \frac{W_2^2}{9W_3^2} \right)^3 + \left(\frac{\frac{W_1W_2 - 3W_0}{W_3W_3} - \frac{W_2^3}{27W_3^3} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \Bigg]^{1/3} \quad (31)$$

مشاهده می‌شود که Δ دارای دو جواب مختلط و یک جواب حقیقی است. تنها Δ حقیقی قابل قبول است. با جایگذاری Δ حقیقی در معادلات (۲۳) و (۲۴)، A و B که قسمت حقیقی و موهومی مؤلفه‌های غیر قطری ماتریس چگالی می‌باشند به دست خواهند آمد. قسمت حقیقی مؤلفه‌های غیر قطری ماتریس چگالی، بیانگر پاشندگی در سیستم مورد بحث و قسمت موهومی مؤلفه‌های غیر قطری ماتریس چگالی، بیانگر جذب در این سیستم می‌باشد.

۳. نتایج عددی و بحث

در شکل‌های (۲الف) و (۲ب) نمودارهای جذب و پاشندگی در یک سیستم هیبریدی نقطه کوانتومی نانوذره‌ی فلزی بیضوی (از جنس طلا [۱]) که در محیطی با ثابت دی الکتریک $\epsilon_h = 1$ قرار گرفته، نمایش داده شده است. فاصله‌ی بین دو نانوذره $d = 13 \text{ nm}$ ، شعاع بزرگ و کوچک نانوذره‌ی فلزی بیضوی به ترتیب $R_{max} = 5 \text{ nm}$ و $R_{min} = 3 \text{ nm}$ ، گشتاور دو قطبی الکتریکی نقطه کوانتومی $\mu = 0.25$ ، زمان‌های واهلش $T_{20} = 0.3 \text{ ns}$ و $\tau_0 = 0.9 \text{ ns}$ ، ثابت دی الکتریک نقطه کوانتومی $\epsilon_s = 6$ ، فرکانس تشدید $\omega_0 = 2.5 \text{ eV}$ و شدت نور فرودی $I = 1 \frac{W}{cm^2}$ می‌باشد. از نمودارها بر می‌آید که حداکثر جذب و پهنای کامل در نصف بیشینه (FWHM)^۱، در فرکانس 3.664 eV ، به ترتیب 8.063×10^7 و 0.087 eV می‌باشد.

^۱ Full Width at Half Maximum

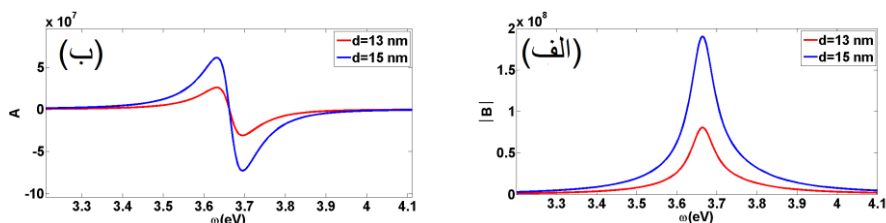


شکل ۲ (الف) نمودار جذب و (ب) نمودار پاشندگی برای سیستم هیبرید نقطه کوانتومی-نانوذره بیضوی فلزی (طلا):

$$\mu = 0.25, I = 1 \frac{W}{cm^2}, \epsilon_s = 6, R_{min} = 3 \text{ nm}, R_{max} = 5 \text{ nm}, d = 13 \text{ nm}, \epsilon_h = 1$$

$$\omega_0 = \frac{2}{5} eV \text{ و } \tau_0 = 0.9 \text{ ns}, T_{20} = 0.3 \text{ ns},$$

شکل‌های ۳الف و ۳ب اثر تغییر فاصله‌ی بین نقطه کوانتومی و نانوذره بیضوی طلا را در جذب و پاشندگی سیستم مورد نظر نشان می‌دهد و مشاهده می‌شود که با افزایش فاصله‌ی بین این دو نانوذره (از 13 nm به 15 nm)، بدون جابه‌جایی فرکانسی، میزان جذب در انرژی 3.664 eV، از 8.063×10^7 به 1.903×10^8 افزایش می‌یابد، همچنین، FWHM برابر با 0.087 eV می‌باشد. به عبارت دیگر، با افزایش فاصله‌ی بین دو نانوذره، به‌علت کاهش برهمکنش پلاسمون-اکستون، جذب و پاشندگی افزایش می‌یابد.

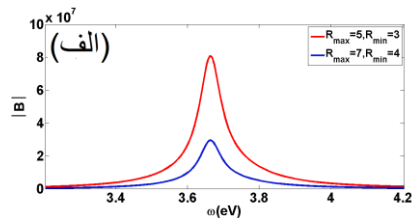
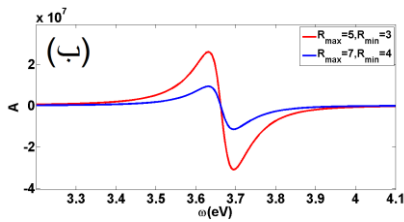


شکل ۳ اثر تغییر فاصله‌ی بین نانوذره بیضوی فلزی (طلا) و نقطه کوانتومی بر (الف) جذب و (ب) پاشندگی:

$$\mu = 0.25, I = 1 \frac{W}{cm^2}, \tau_0 = 0.9 \text{ ns}, T_{20} = 0.3 \text{ ns}, \omega_0 = \frac{2}{5} eV, \epsilon_s = 6, R_{min} = 3 \text{ nm}, R_{max} = 5 \text{ nm}, \epsilon_h = 1$$

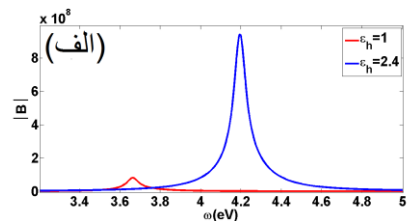
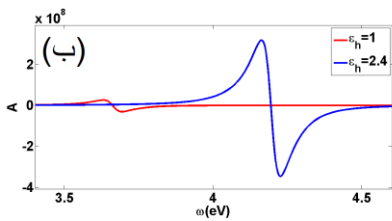
$$2.5 \text{ eV}$$

در شکل ۴الف و ۴ب اثر تغییر شعاع نانوذره‌ی فلزی در جذب و پاشندگی در سیستم هیبرید نقطه کوانتومی-نانوذره بیضوی از جنس طلا، یک بار برای $R_{min} = 3 \text{ nm}, R_{max} = 5 \text{ nm}$ و بار دیگر برای $R_{min} = 4 \text{ nm}, R_{max} = 7 \text{ nm}$ بررسی شده است. مشاهده شده که به ازای $R_{min} = 4 \text{ nm}$ و $R_{max} = 7 \text{ nm}$ حداکثر جذب در انرژی 3.664 eV، 2.945×10^7 می‌باشد. همچنین، FWHM بدون تغییر، 0.087 eV است. به عبارت دیگر، با افزایش شعاع نانوذره، به‌علت افزایش سطح آن، پلاسمون‌های سطحی افزایش می‌یابند و با افزایش پلاسمون‌های سطحی، به سبب افزایش برهمکنش پلاسمون-اکستون، جذب و پاشندگی کاهش می‌یابند.



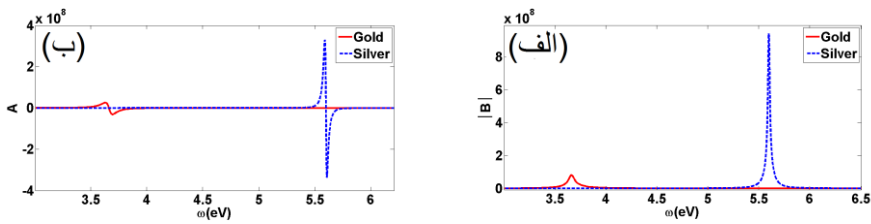
شکل ۴ اثر تغییر شعاع نانوذره بیضوی فلزی (طلا) بر (الف) جذب و (ب) پاشندگی: $\epsilon_s = d = 13 \text{ nm}$, $\epsilon_h = 1$
 $\omega_0 = 2.5 \text{ eV}$ و $\tau_0 = 0.9 \text{ ns}$, $T_{20} = 0.3 \text{ ns}$, $\mu = 0.25$, $J = 1 \frac{W}{\text{cm}^2}$, 6

در شکل ۵الف و ۵ب اثر تغییر جنس محیط اطراف نانوذره در جذب و پاشندگی بررسی شده است. مشاهده شده که به ازای $\epsilon_h = 2.4$ نسبت به محیطی با ثابت دی الکتریک $\epsilon_h = 1$ ، با جابه‌جایی انرژی 0.531 eV ، حداکثر جذب از 8.063×10^7 به 9.409×10^8 افزایش می‌یابد و FWHM تغییری نمی‌کند.



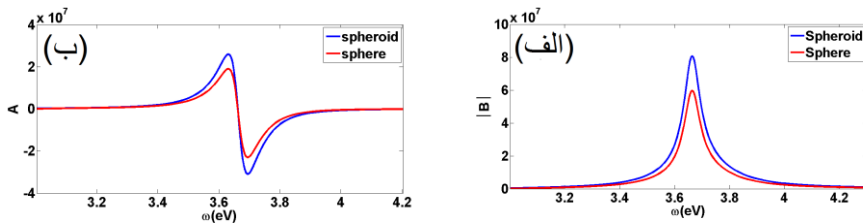
شکل ۵ اثر تغییر جنس محیط بر (الف) جذب و (ب) پاشندگی برای سیستم هیبرید نقطه کوانتومی نانوذره بیضوی فلزی (طلا): $\epsilon_s = 6$, $R_{min} = 3 \text{ nm}$, $R_{max} = 5 \text{ nm}$, $d = 13 \text{ nm}$, $\mu = 0.25$, $J = 1 \frac{W}{\text{cm}^2}$, $\epsilon_h = 2.4$
 $\omega_0 = 2.5 \text{ eV}$ و $\tau_0 = 0.9 \text{ ns}$, $T_{20} = 0.3 \text{ ns}$,

در شکل ۶الف و ۶ب اثر تغییر جنس نانوذره فلزی بیضوی در جذب و پاشندگی نشان داده شده است و مشاهده شده هنگامی که جنس نانوذره فلزی نقره باشد [۱]، حداکثر جذب برابر 9.419×10^8 و در انرژی 5.599 eV رخ می‌دهد و FWHM برابر با 0.024 eV می‌باشد. هنگامی که جنس نانوذره فلزی نقره باشد نسبت به زمانی که جنس نانوذره طلا باشد، جذب و پاشندگی هر دو در انرژی‌های بیشتر، افزایش می‌یابند و در نمودار جذب FWHM کاهش می‌یابد. در واقع، به دلیل اینکه فرکانس پلاسمونیک نقره از طلا بیشتر است، به سبب برهم کنش پلاسمون-اکستون در فرکانس بالاتر، وقتی که جنس نانوذره نقره باشد، حداکثر جذب و پاشندگی در فرکانس بیشتری رخ می‌دهد.



شکل ۶ اثر تغییر جنس نانو ذره فلزی بر (الف) جذب و (ب) پاشندگی برای سیستم هیبرید نقطه کوانتومی-نانوذره بیضوی فلزی: $\mu = 0.25, I = 1 \frac{W}{cm^2}, \epsilon_s = 6, R_{min} = 3 \text{ nm}, R_{max} = 5 \text{ nm}, d = 13 \text{ nm}, \epsilon_h = 1$
 $\omega_0 = 2.5 \text{ eV}$ و $\tau_0 = 0.9 \text{ ns}, T_{20} = 0.3 \text{ ns}$,

در شکل ۷ الف و ۷ ب جذب و پاشندگی برای نانو ذره فلزی کروی و نانو ذره فلزی بیضوی با هم مقایسه شده‌اند. نشان داده شده که با تغییر شکل هندسی نانو ذره از ساختار بیضوی با شعاع‌های $R_{min} = 3 \text{ nm}$ و $R_{max} = 5 \text{ nm}$ به کره‌ای با شعاع 3 nm ، بدون جابه‌جایی در انرژی، میزان جذب از 8.063×10^7 به 5.964×10^7 کاهش می‌یابد و FWHM همان 0.087 eV خواهد بود. لازم است ذکر کنیم که محل پیک موجود در نمودار جذب یا پاشندگی به ویژگی‌های فلز مانند جنس، فرکانس پلاسمون و... بستگی دارد و به شکل نانو ذره بستگی ندارد. شکل نانو ذره تنها در شدت برهمکنش تاثیر گذار است که به تغییر در مقدار بیشینه در نمودار می‌انجامد.



شکل ۷ اثر تغییر شکل هندسی نانو ذره فلزی بر (الف) جذب و (ب) پاشندگی برای سیستم هیبرید نقطه کوانتومی-نانوذره فلزی (طلا): $\mu = 0.25, \epsilon_s = 6, R_{min} = 3 \text{ nm}, R_{max} = 5 \text{ nm}, d = 13 \text{ nm}, \epsilon_h = 1$
 $\omega_0 = 2.5 \text{ eV}$ و $I = 1 \frac{W}{cm^2}, \tau_0 = 0.9 \text{ ns}, T_{20} = 0.3 \text{ ns}$,

۴. نتیجه گیری

در این مقاله، جذب و پاشندگی در یک سیستم هیبریدی نقطه کوانتومی-نانوذره فلزی و در نتیجه اثر پارامترهایی همچون اندازه، جنس، شکل هندسی نانو ذره فلزی، فاصله‌ی بین دو نانو ذره و جنس محیط اطراف در خواص نوری بررسی شد. مشاهده شد که با افزایش فاصله‌ی بین نقطه کوانتومی و نانو ذره فلزی، به علت کاهش برهمکنش پلاسمون-اکسیتون، جذب و پاشندگی

افزایش می‌یابند. با افزایش شعاع نانوذره فلزی (افزایش سطح نانوذره)، برهمکنش پلاسمون-اکسیتون افزایش یافته لذا جذب و پاشندگی کاهش می‌یابند. همچنین با افزایش ثابت دی‌الکتریک محیط (تغییر جنس محیط) و با تغییر جنس نانوذره فلزی از طلا به نقره، جذب و پاشندگی افزایش می‌یابند و به سمت فرکانس‌های بیشتر (انتقال آبی) جابه‌جا می‌شوند. همانگونه که نتایج نشان می‌دهد جابه‌جایی فرکانسی رخ می‌دهد که این خاصیت را می‌توان برای ساخت نوسنورها و سنسورهای زیستی استفاده کرد.

مراجع

- [1] A. Ridolfo, O. Di Stefano, N. Fina, R. Saijaj, and S. Savasta, "Quantum Plasmonics with Quantum Dot-Metal Nanoparticle Molecules: Influence of the Fano Effect on Photon Statistics", *Phys. Rev. Lett.* **26** 263601 (2010).
- [2] R. D. Artuso and G. W. Bryant, "Optical Response of Strongly Coupled Quantum Dot-Metal Nanoparticle Systems: Double Peaked Fano Structure and Bistability", *Nano Lett.* **8** 2106 (2008).
- [3] W. Zhang and A. O. Govorov, "Quantum theory of the nonlinear Fano effect in hybrid metal-semiconductor nanostructures: The case of strong nonlinearity", *Phys. Rev. B* **84** 081405(R) (2011).
- [4] A. O. Govorov, "Semiconductor-metal nanoparticle molecules in a magnetic field: Spin-plasmon and exciton-plasmon interactions", *Phys. Rev. B* **82** 155322 (2010).
- [5] S. M. Sadeghi, L. Deng, and X. Li; W. P. Huang, "Plasmonic (thermal) electromagnetically induced transparency in metallic nanoparticle-quantum dot hybrid systems", *Nanotechnology* **20** 365401 (2009).
- [6] W. Zhang, A. O. Govorov, and G. W. Bryant, "Semiconductor-Metal Nanoparticle Molecules: Hybrid Excitons and the Nonlinear Fano Effect", *Phys. Rev. Lett.* **97**(14) 146804 (2006).
- [7] R. D. Artuso and G. W. Bryant, "Optical Response of Strongly Coupled Quantum Dot-Metal Nanoparticle Systems: Double Peaked Fano Structure and Bistability", *Nano Lett.* **8**(7) 2106 (2008).
- [8] M. O. Scully and M. S. Zubairy, *Quantum Optics* (Cambridge: Cambridge University Press, 1997).
- [9] R. D. Artusoa and G. W. Bryant, "Hybrid Quantum Dot Metal Nanoparticle Systems: Connecting the Dots", *Acta Physica Polonica A.* **122** 289 (2012).
- [10] 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** 668 (2003).
- [11] P. B. Johnson and R. W. Christy, "Optical Constants of the Noble Metals", *Phys. Rev. B* **6** 4370 (1972).