



## مطالعه‌ی اثرات غیرموضعی بر دیم‌های فلزی

سیده طاهره گلستانی زاده<sup>۱</sup> | ته‌مینه جلالی\*<sup>۲</sup> | عباس ظریفی<sup>۱</sup>

<sup>۱</sup> گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه یاسوج، یاسوج، ایران

<sup>۲</sup> گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه خلیج فارس، بوشهر، ایران

**چکیده:** در این مقاله، رفتار نانوذرات جفت شده‌ی فلزی تحت تاثیر نور تابشی با مدل‌های متفاوت بررسی شده است. برای بررسی اثرات غیرموضعی از مدل ساده‌ی پیشنهادی و مدل هیدرودینامیکی استفاده می‌شود. به‌منظور شبیه‌سازی نانوذرات فلزی، مدل ساده اثرات غیرموضعی را با جایگزین کردن فلز با لایه‌ی نازک کامپوزیت در مرز فلز-دی‌الکتریک بررسی می‌کند. شبیه‌سازی نانوذرات براساس روش المان متناهی انجام می‌شود. طیف سطح مقطع خاموشی برای ساختار مورد نظر در مدل موضعی، غیرموضعی و مدل پیشنهادی مقایسه شده است. مدل‌های غیرموضعی جابجایی آبی را نسبت به مدل موضعی نشان می‌دهند که برای ساختار مورد بررسی، جابجایی آبی قله‌ی اول طیف سطح مقطع خاموشی ۰/۱۹ الکترون ولت است. در شعاع‌های کوچک جابجایی آبی مدل غیرموضعی نسبت به مدل موضعی به‌طور آشکار بزرگ‌تر می‌شود. طیف سطح مقطع خاموشی برای شکاف‌های متفاوت رسم شده است. همچنین، تاثیر افزایش شعاع نانوذرات نقره بر پارامتر مقدار خاموشی مطالعه شده است. کاهش فاصله‌ی جدایی و شعاع نانوذرات موجب بزرگ‌تر شدن قله‌های پلاسمون سطحی می‌شود که علت آن قوی‌تر شدن اثرات غیرموضعی است.

**واژگان کلیدی:** اثرات غیر موضعی، پلاسمونیک، دیم‌ر، نانوذرات جفت شده .

jalali@pgu.ac.ir

علاقه به اندازه‌گیری و کنترل نور در ابعاد کوچک پژوهش‌ها را به سمت نانوذرات پلاسمونیک هدایت کرده است [۵]. بنابراین، با این چالش روبرو می‌شویم که برای ساختارهای با ابعاد زیرنانومتر، توصیف نوری فلزات با تابع دی‌الکتریک دیگر دقیق نیست [۶]. به‌طور معمول، توصیف نظری پلاسمون‌های سطحی براساس معادلات کلاسیکی ماکسول بوده است [۷]. موفقیت دیدگاه کلاسیکی در توجیه بیشتر اثرهای مربوط به پلاسمون سطحی به‌ویژه در سامانه‌های با ابعاد بیشتر از ۱۰ نانومتر و همچنین، حتی در برخی موارد در توصیف سامانه‌های زیر این ابعاد است. با توجه به آزمایش‌ها و اندازه‌گیری‌های اخیر، باوجود موفقیت‌های چشمگیر

### ۱- مقدمه

علم پلاسمونیک به بررسی برخورد امواج الکترومغناطیسی با الکترون‌های رسانشی در فلزات براساس پلاسمون‌های سطحی می‌پردازد. به بیان ساده، پلاسمون سطحی عبارت است از تحریک جمعی الکترون‌های نوار رسانش در سطح مشترک فلز و دی‌الکتریک است. از ویژگی‌های جالب توجه پلاسمون‌های سطحی قابلیت هدایت و متمرکز کردن نور در ابعاد زیر طول موج ( فراتر از حد پراش) و افزایش شدید شدت میدان الکتریکی در مقیاس نانو است [۱]. این ویژگی‌ها کاربردهای بسیاری را در زمینه‌های متفاوتی از قبیل نانوآنتن‌های نوری، تشخیص سرطان [۲]، جایگزینی نور [۳]، طیف‌سنجی [۴] ایجاد کرده است.

$$\vec{J}(\vec{r}, \omega) = \varepsilon_0 \int dr' \sigma(\vec{r}, \vec{r}', \omega) \vec{E}(\vec{r}', \omega) \quad (1b)$$

معادلات غیرخطی بالا بیان می‌کند که پاسخ فلز در نقطه  $\vec{r}$  به میدان الکتریکی نقاط همسایه‌ی  $\vec{r}'$  از طریق ضرب نفوذپذیری و رسانش غیرموضعی وابسته است. ابتدا، تقریب پاسخ موضعی که به طور رایج برای ساختارهای با ابعاد چندین نانومتر به کار می‌رود را توضیح داده، سپس از مدل LRA فراتر رفته و پاسخ غیرموضعی را به حساب می‌آوریم [۱۶].

$$\text{با در نظر گرفتن } \varepsilon(\vec{r}, \vec{r}', \omega) = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \varepsilon(\omega) \text{ و}$$

$$\sigma(\vec{r}, \vec{r}', \omega) = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \sigma(\omega) \text{ معادله‌ها (۱) به صورت زیر ساده}$$

می‌شوند:

$$\vec{D}(\vec{r}, \omega) = \varepsilon_0 \varepsilon(\omega) \vec{E}(\vec{r}, \omega) \quad (2)$$

$$\vec{J}(\vec{r}, \omega) = \varepsilon_0 \sigma(\omega) \vec{E}(\vec{r}, \omega) \quad (3)$$

با وارد کردن روابط (۲) و (۳) در معادلات ماکسول خواهیم داشت

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}, \omega) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \varepsilon(\omega) \vec{E}(\vec{r}, \omega) + i\omega\mu_0 \vec{J}(\vec{r}, \omega) \quad (4)$$

در غیاب چشمه‌های خارجی، میدان الکتریکی در LRA همیشه شرط  $\vec{\nabla} \cdot \vec{E}(\vec{r}, \omega) = 0$  را ایجاب می‌کند. (باوجود اینکه وقتی که پاسخ غیرموضعی را در نظر می‌گیریم) در محیط همگن با جایگزین کردن گرادیان در رابطه‌ی بالا با  $i\vec{k}$ ، معادله  $\vec{k} \cdot \vec{E}(\vec{r}, \omega) = 0$  نتیجه می‌شود که بیان می‌کند، میدان الکتریکی در فلزات همگن همیشه عرضی است. به عبارت دیگر، تغییرات در میدان الکتریکی عمود بر راستای انتشار (جهت  $\vec{k}$ ) به وجود می‌آید. در معادله بالا،  $\varepsilon(\omega)$  ثابت گذردهی فضایی فلز است که به طور معمول با تابع دی الکتریک شبه-درود به صورت زیر بیان می‌شود [۱۷].

$$\varepsilon_D(\omega) = \varepsilon_{core}(\omega) - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \quad (5)$$

از دیدگاه نظری مدل درود در مورد فلزات ساده به خوبی با نتایج تجربی همخوانی دارد. برای مطالعه‌ی اثرات غیرموضعی از مدل هیدرودینامیکی برای مدلسازی گاز الکترونی در فلزات که در ابتدا توسط بلوخ و همکارانش ارائه شده است، استفاده می‌کنیم [۱۸]. بلوخ، انرژی گاز الکترونی همگن را با هامیلتونین آن در نظر گرفت.

تقریب پاسخ موضعی (LRA<sup>۱</sup>) در توصیف ویژگی‌های نوری فلزات که از تابع دی الکتریک درود استفاده می‌کند، این مدل در توجیه برخی پدیده‌ها به چالش کشیده می‌شود [۸ و ۹]. به عنوان مثال، می‌توان پهن‌شدگی و وابستگی مکانی قله‌ی تشدید پلاسمونیک به ابعاد نانوذرات کوچک فلزی را بیان کرد [۶]. به دلیل موفقیت‌های اخیر در ساخت نانوساختارهای پلاسمونیک با ابعاد پایین پاسخ غیرموضعی در توصیف ویژگی‌های نوری این ساختارها نقش مهمی دارد [۱۰]. دیدگاه‌هایی از قبیل نظریه تابعی چگالی DFT<sup>۲</sup> می‌تواند اثرهای غیرکلاسیکی مشاهده شده را توصیف کند [۷]، اگرچه به خاطر پیچیدگی‌های محاسباتی فقط توانایی بررسی ساختارهای بسیار کوچک را دارد. مدل‌های تقریبی ساده‌تری برای توجیه اثرات غیرموضعی در ساختارهای با ابعاد پایین وجود دارد [۱۱-۱۳] که می‌توان به مدل هیدرودینامیکی خطی اشاره کرد [۱۴ و ۱۵].

در این مقاله، نانوذرات جفت شده‌ی فلزی براساس روش المان محدود، شبیه‌سازی شده است. ابتدا، با استفاده از مدل هیدرودینامیکی اثرات غیرموضعی را مورد بررسی قرار داده، سپس نتایج مدل ساده‌ی پیشنهاد شده با مدل موضعی و غیرموضعی مقایسه می‌شود. همچنین، چیدمان مدل در فضای شبیه‌سازی و مشخصات ساختار برای مدلسازی آن با احتساب مدل‌های گفته شده، بیان می‌شود. سپس، به بحث و بررسی نتایج پرداخته و در نهایت نتیجه‌گیری کلی ارائه می‌شود.

## ۱-۲ مدل هیدرودینامیکی

برای بررسی رفتار ساختارهای فلزی در برهم‌کنش با امواج الکترومغناطیسی، معادلات ماکسول در نظر گرفته می‌شود. در غیاب بارها و جریان‌های خارجی پاسخ فلز به میدان الکتریکی  $\vec{E}(\vec{r}, \omega)$ ، با میدان جابجایی  $\vec{D}(\vec{r}, \omega)$  و چگالی جریان القایی  $\vec{J}(\vec{r}, \omega)$  به صورت زیر توصیف می‌شود.

$$\vec{D}(\vec{r}, \omega) = \varepsilon_0 \int dr' \varepsilon(\vec{r}, \vec{r}', \omega) \vec{E}(\vec{r}', \omega) \quad (الف)$$

در معادله‌ی (الف) پاسخ غیرموضعی، وابستگی تابع پاسخ در نقطه‌ی  $\vec{r}$  را به نقاط همسایه بیان می‌کند که در حالت کلی به شکل یک تانسور است. تبدیل فوریه تابع پاسخ در فضای  $\vec{k}$  به صورت زیر خواهد بود:

$$\bar{D}(\vec{k}, \omega) = \varepsilon_0 \varepsilon(\vec{k}, \omega) \bar{E}(\vec{k}, \omega) \quad (10)$$

وابستگی  $\varepsilon(\vec{k}, \omega)$  به  $\vec{k}$  نشان‌دهنده‌ی پاسخ غیرموضعی در فضای حقیقی است. برای مشخص کردن تابع دی‌الکتریک در مدل هیدرودینامیکی با گرفتن تبدیل فوریه از معادله (۹) در محیط همگن خواهیم داشت:

$$\omega(\omega + i\gamma) \bar{J}(\vec{k}, \omega) - \beta^2 (\vec{k} \cdot \bar{J}(\vec{k}, \omega)) \vec{k} = i\omega \omega_p^2 \varepsilon_0 \bar{E}(\vec{k}, \omega) \quad (11)$$

جمله‌ی دوم سمت چپ فقط در مولفه‌ای از  $\bar{J}$  که موازی  $\vec{k}$  است حضور دارد. می‌توان میدان الکتریکی و معادلات جریان را به صورت دو قسمت طولی و عرضی با توجه به معادله (۱۱) نوشت. در نتیجه مولفه‌های عرضی و طولی میدان جابجایی به صورت زیر خواهد شد:

$$\bar{D}^T(\vec{k}, \omega) = \varepsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma}\right) \bar{E}^T(\vec{k}, \omega) \quad (\text{الف } 12)$$

$$\bar{D}^L(\vec{k}, \omega) = \varepsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma - \beta^2 k^2}\right) \bar{E}^L(\vec{k}, \omega) \quad (\text{ب } 12)$$

با در نظر گرفتن روابط (الف ۱۲) و (ب ۱۲) و (۱۰) تانسور تابع دی‌الکتریک را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\varepsilon(\mathbf{k}, \omega) = \begin{pmatrix} \varepsilon_T & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_T & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_L \end{pmatrix} \quad (\text{الف } 13)$$

$$\varepsilon_T(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma} \quad (\text{ب } 13)$$

$$\varepsilon_L(\mathbf{k}, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma - \beta^2 k^2} \quad (\text{ج } 13)$$

با احتساب انرژی کل گاز الکترونی غیرهمگن و محاسبه معادلات هلمهولتز، معادله هیدرودینامیکی را می‌توان به صورت زیر نوشت [۱۷].

$$[\partial_t + \vec{v} \cdot \nabla] \vec{v} = -\gamma \vec{v} - \frac{e}{m} [\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}] - \frac{\delta G[n]}{\delta n} \quad (6)$$

همچنین، معادله پیوستگی به صورت  $\delta_t n = -\nabla \cdot (n\vec{v})$  است. جمله‌ی اول سمت راست معادله (۶)، ضریب خاموشی و جمله دوم نیروی لورنتس و جمله‌ی سوم انرژی همبستگی، تبادل و جنبشی داخلی گاز الکترونی را با توجه به تعریف تابع  $G[n]$  نشان می‌دهد. ساده‌ترین دیدگاه، مدل توماس فرمی برای تابع  $G[n]$  است [۱۹]

$$G[n(r, t)] = \int \frac{3h^2}{10m} \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{2}{3}} n^{\frac{5}{3}}(r, t) dr \quad (7)$$

با در نظر گرفتن انحراف کوچکی از حالت تعادل و وارد کردن  $\frac{\delta G[n]}{\delta n}$  در معادله (۶) معادله مشخصه‌ی مدل هیدرودینامیکی به صورت زیر خواهد بود:

$$[\partial_t + \vec{v} \cdot \nabla] \vec{v} = -\gamma \vec{v} - \frac{e}{m} [\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}] - \frac{\beta^2}{n} \nabla n \quad (8)$$

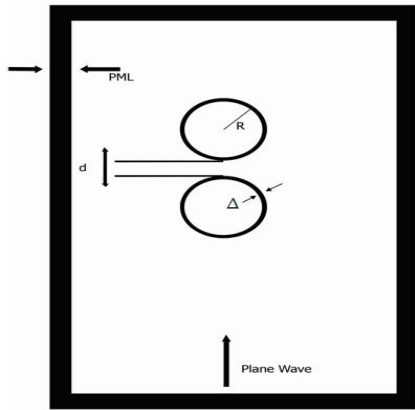
در معادله (۸) جمله‌ی سوم سمت راست، بیان‌کننده‌ی فشار هیدرودینامیکی است که از اختلالات کوچک در گاز الکترونی ایجاد شده است. با فرض کوچک بودن اختلال وارد شده به سامانه، معادله‌ی غیرخطی بالا به فرم خطی زیر نوشته می‌شود

$$\frac{\beta^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \nabla[\nabla \cdot \bar{J}(\vec{r}, \omega)] + \bar{J}(\vec{r}, \omega) = \varepsilon_0 \sigma_D(\omega) \bar{E}(\vec{r}, \omega) \quad (9)$$

$\bar{J}(\vec{r}, \omega)$  چگالی جریان القایی و  $\sigma_D(\omega)$  رسانش درود است. هنگامی که  $\beta = 0$  باشد، معادله بالا به قانون اهم کاهش می‌یابد. جمله‌ی شامل  $\beta$  در معادله‌ی بالا بیان‌کننده‌ی پاسخ غیرموضعی در مدل هیدرودینامیکی است.

## ۱-۳ تابع دی‌الکتریک در مدل هیدرودینامیکی

## ۳- چیدمان شبیه‌سازی



شکل ۱: الگوی چیدمان نانوذرات نقره با در نظر گرفتن لایه‌ی دی الکتریک بر نانوذرات

برای شبیه‌سازی نانوذرات جفت شده‌ی نقره و محاسبه‌ی طیف خاموشی و توزیع میدان آن‌ها با در نظر گرفتن اثرات غیرموضعی ساختار را به صورت شکل ۱ در نظر می‌گیریم. دو نانو ذره‌ی نقره با شعاع ۱۵ نانومتر که به فاصله‌ی  $d$  از یکدیگر قرار گرفته‌اند را در زمینه‌ی هوا قرار داده‌ایم. محیط زمینه را بسیار بزرگتر از ابعاد نانوذرات در نظر گرفته و لایه‌ای به‌عنوان  $PML$ ، برای جذب کامل نور فرودی اطراف آن قرار می‌دهیم. ضریب نفوذ پذیری فلز با مدل درود تعیین می‌شود. در مدل استفاده شده، لایه نازکی با ضخامت  $0.1$  نانومتر را حول نانوذرات قرار داده‌ایم (چند ضخامت دیگر را مورد بررسی قرار دادیم، با ضخامت  $0.1$  نانومتر، بهترین نتیجه در مقایسه با مدل غیرموضعی به‌دست می‌آید). ضریب نفوذ پذیری لایه‌ها از رابطه‌ی (۱۴) محاسبه می‌شود. موج تخت با قطبش  $TM$  را به ساختار تابانده‌ایم. مسئله براساس روش المان متناهی شبیه سازی می‌شود.

## ۴- نتایج و بحث

پس از مدل‌سازی ساختار نشان داده شده به پردازش اطلاعات به‌دست آمده می‌پردازیم. ابتدا، توزیع میدان در دو مدل موضعی و غیرموضعی برای نانوذرات نقره با شعاع ۱۵ نانومتر که به فاصله‌ی  $0.4$  نانومتر از هم قرار گرفته‌اند، در انرژی ۴ الکترون ولت به‌ترتیب در شکل ۲ و ۳ نشان داده شده است.

در اینجا با توجه به معادله‌های معرفی شده در بالا به بررسی چگونگی تاثیر پاسخ غیرموضعی بر پارامتر سطح مقطع خاموشی می‌پردازیم. هرگاه فاصله جدایی دایمتر کمتر از یک نانومتر شود اثرهای کوانتومی باید لحاظ شود. در این مقاله، از این اثرات صرف‌نظر شده است.

## ۲- مدل ساده‌ی پیشنهادی

از آنجا که در مدل موضعی میدان‌ها به‌طور کامل عرضی هستند و ضریب نفوذ پذیری فلز با  $\epsilon_m = \epsilon_T(\omega)$  بیان می‌شود، این مدل به دیدگاه‌های فیزیکی پلاسمونیک ساده می‌شود. به دلیل وابستگی ضریب نفوذ پذیری به  $\vec{k}$  در مدل غیرموضعی، برای جلوگیری از پیچیدگی محاسبات، در این مقاله اثرات غیرموضعی بارهای سطحی القایی را با تصحیحات هندسی (در نظر گرفتن لایه‌ی دی الکتریک نازکی بالای مرز فلز) بررسی می‌کنیم. تفسیر اثرات غیرموضعی به‌عنوان تغییر هندسه مرزهای فلزی فقط در بسامدهای پایین و هنگامی که ضخامت بارهای سطحی از عمق نفوذ فلز خیلی کوچک‌تر باشد، معتبر است.

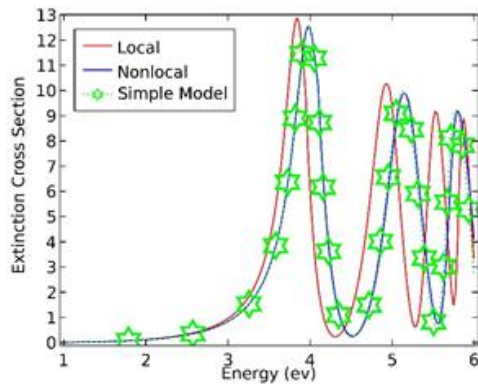
مدل پیشنهادی، هندسه‌ی جدیدی با جابجایی مرزهای فلز، برای نانوذرات جفت‌شده با شعاع  $R$  که به فاصله  $d$  از یکدیگر قرار گرفته‌اند با تغییر شعاع به  $R + \Delta$  و فاصله‌ی  $d - 2\Delta$  ارائه می‌دهد که در شکل (۱) نشان داده شده است. ضخامت لایه‌ی کامپوزیت  $\Delta$  و ضریب نفوذ پذیری آن با رابطه‌ی زیر محاسبه می‌شود [۲۰]:

$$\epsilon_t = \frac{\epsilon_b \epsilon_m q_L \Delta}{\epsilon_m - \epsilon_b} \quad (14)$$

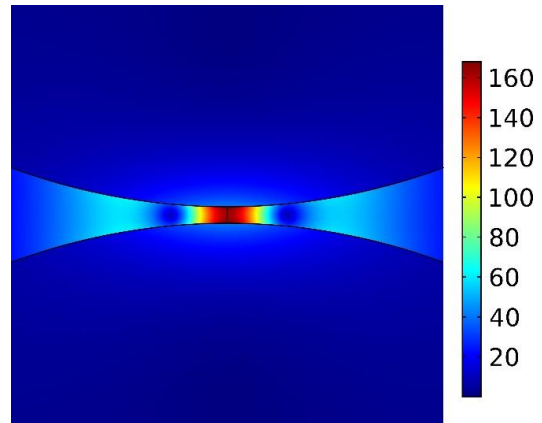
$\epsilon_m$  و  $\epsilon_b$  به ترتیب ضریب نفوذ پذیری محیط زمینه و فلز است.  $q_L$  بردار موج عمودی پلاسمون طولی از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید [۲۰]:

$$q_L = \frac{1}{\beta} \times \sqrt{\frac{\omega_p^2}{\epsilon_\infty} - \omega(\omega + i\gamma)} \quad (15)$$

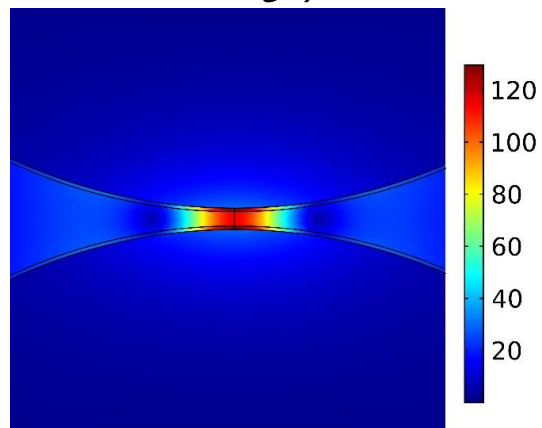
$\beta$  متناسب با سرعت فرمی الکترون‌ها و عامل ایجاد اثرات غیرموضعی است.



شکل ۴: طیف خاموشی برای نانوذرات نقره با سه مدل موضعی، غیرموضعی، (هیدرودینامیکی) و مدل ساده‌ی پیشنهادی



شکل ۲: توزیع میدان نانو ذرات نقره با فاصله‌ی ۰/۴ نانومتر در مدل موضعی



شکل ۳: توزیع میدان نانو ذرات نقره با فاصله‌ی ۰/۴ نانومتر در مدل غیرموضعی

با مقایسه شکل ۲ و ۳، مشاهده می‌شود که در هر دو مدل شدت میدان در مرز مشترک فلز و دی‌الکتریک متمرکز شده است اما کاهش شدت میدان در شکاف بین نانوذرات در مدل غیرموضعی به وضوح دیده می‌شود. دلیل آن این است که مدل غیرموضعی نشت و تونل‌زنی الکترون‌ها را در نظر می‌گیرد [۲۰]. طیف خاموشی برحسب انرژی برای نانوذرات نقره با شعاع ۱۵ نانومتر و فاصله‌ی جدایی ۱ نانومتر با سه مدل موضعی، غیرموضعی (هیدرودینامیکی) و مدل ساده‌ی پیشنهادی در شکل ۴ نشان داده شده است.

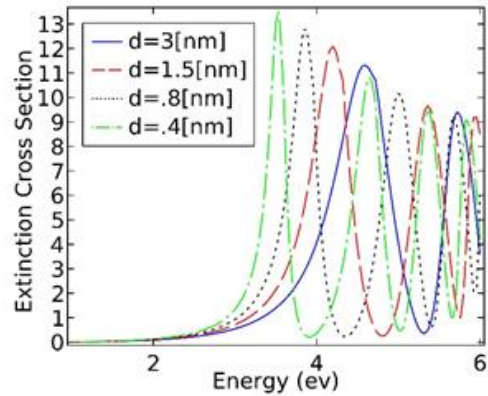
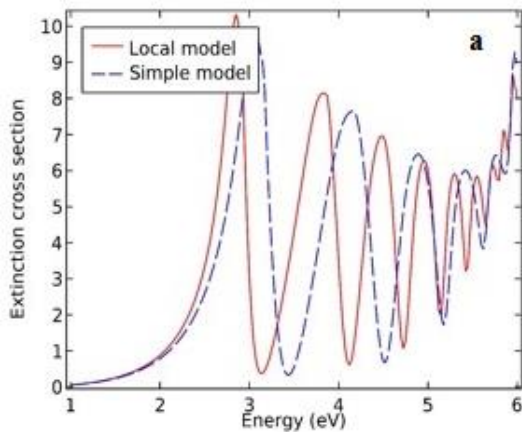
سطح مقطع خاموشی را به صورت  $s_{ext} = (|P_{abs}| + |P_{scat}|) / I_0$  در نظر گرفته‌ایم که  $I_0$  شدت نور فرودی،  $P_{abs}$  و  $P_{scat}$  به ترتیب توان جذب و پراکنده شده است [۲۱]. به صورت عددی توان با انتگرال‌گیری از بردار پوینتینگ بر بیضی که نانوذرات را احاطه کرده است، به دست می‌آید. محور عمودی تمام نمودارها با تقسیم بر شعاع دایره  $R$  بی‌بعد شده است.

جدول ۱: مقایسه قله پلاسمونیک در مدل‌های متفاوت برای دایمر با شعاع نانومتر ۱۵ نانومتر و فاصله جدایی ۱

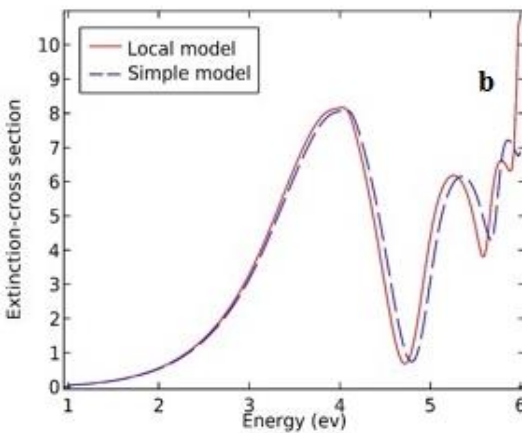
مدل	قله اول	قله دوم	قله سوم
غیرموضعی	۴ (eV)	۵٫۱۵ (eV)	۵٫۷ (eV)
مدل پیشنهادی ساده	۴ (eV)	۵٫۱۵ (eV)	۵٫۷ (eV)
مدل موضعی	۳٫۸۱ (eV)	۴٫۹ (eV)	۴٫۹۳ (eV)

در جدول ۱ مکان قله‌ها در سه مدل موضعی، غیرموضعی و مدل ساده با هم مقایسه شده است. همان‌طور که شکل ۴ و جدول ۱ نشان می‌دهند، مدل پیشنهادی [۲۰] به خوبی با مدل غیرموضعی همخوانی دارد. مدل‌های غیرموضعی جابجایی آبی را نسبت به مدل موضعی نشان می‌دهند. مدل ساده‌ی پیشنهادی افزون بر سازگاری خوب با مدل هیدرودینامیکی، با صرف زمان و حافظه محاسباتی کمتر ساختار را شبیه‌سازی می‌کند. برای مقایسه‌ی زمان محاسباتی رسم طیف خاموشی برحسب بسامد در شکل ۴، باید بیان کرد که با کامپیوتر شخصی core i7 و رم ۱۶، برای مدل غیرموضعی (هیدرودینامیکی) حدود ۹ ساعت و برای مدل ساده حدود ۵ ساعت زمان صرف شده است. در نتیجه در این مقاله این مدل برای تجزیه و تحلیل جفت‌شدگی نانوذرات مورد استفاده قرار گرفته است. تاثیر مقادیر متفاوت فاصله‌ی جدایی از ۰/۴ تا ۳ نانومتر بر مقدار خاموشی نانوذرات نقره با شعاع ۱۵ نانومتر در شکل ۵ نشان داده شده است.





شکل ۵: طیف خاموشی نانوذرات با شعاع ۱۵ نانومتر با فاصله‌ی جدایی ۳، ۱/۵، ۰/۸ و ۰/۴ نانومتر



شکل ۶: طیف خاموشی نانوذرات با شعاع ۲۵ نانومتر با فاصله‌ی جدایی ۳ (a) و ۰/۴ (b) نانومتر

همان‌طور که در شکل ۵ مشاهده می‌شود، اثرات غیرموضعی با افزایش فاصله کاهش یافته‌اند، به طوری که در فاصله‌های بیشتر به طور کامل از بین رفته‌اند و فقط جفت‌شدگی پلاسمون سطحی دیده می‌شود. به نظر می‌رسد با افزایش فاصله‌ی نانوذرات نشت و تونل‌زنی الکترون‌ها کاهش می‌یابد. همچنین، پهن‌شدگی قله‌ها در فاصله جدایی بزرگتر به وضوح دیده می‌شود. با افزایش فاصله، تشدید پلاسمون‌های سطحی در بسامد بالاتری اتفاق می‌افتد. به عبارت دیگر، با کاهش فاصله، قله‌ها نسبت به فاصله جدایی‌های بزرگتر جابجایی قرمز دارد. طیف خاموشی در مدل موضعی و غیرموضعی در دو فاصله جدایی ۳ و ۰/۴ نانومتر برای نانوذرات با شعاع ۲۵ نانومتر در شکل زیر نشان داده شده است.

مطابق نتایج بدست آمده از شکل ۵، در شکل ۶ نیز مشاهده می‌شود که با کاهش فاصله، قله‌های غیرموضعی بزرگ‌تر می‌شوند که نشان دهنده‌ی قوی‌تر شدن اثرات غیرموضعی است. از مقایسه شکل ۶a و ۶b دیده می‌شود که جابجایی آبی مدل غیرموضعی نسبت به مدل موضعی، در شکاف ۰/۴ نانومتر بزرگتر از فاصله جدایی ۳ نانومتر است. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت، در فاصله جدایی‌های کمتر چون اثر غیرموضعی قوی‌تر می‌شود، جابجایی آبی مدل غیرموضعی نسبت به مدل موضعی بیشتر می‌شود. در ادامه، تاثیر شعاع نانوذرات نقره بر طیف خاموشی نانوذرات با فاصله‌ی ۰/۴ نانومتر در شکل ۷ بررسی شده است.

plasmonics,” arXiv preprint arXiv:1604.07389, 2016.

[4] A. Campion, P. Kambhampati, “Surface-enhanced Raman scattering,” Chemical society reviews, 27(4), 241-250, 1998.

[5] W.Chang, B.A. Willingham, Liane S. Slaughter, B. P. Khanal, L.Vigderman, E. R. Zubarev, S. LinkLow, “Low absorption losses of strongly coupled surface plasmons in nanoparticle assemblies,” Proceedings of the National Academy of Sciences, 108(50), 19879-19884, 2011.

[6] F.Abajo, “ Nonlocal effects in the plasmons of strongly interacting nanoparticles, dimers, and waveguides,” The Journal of Physical Chemistry C, 112(46), 17983-17987, 2008.

[7] W.L. Barnes, A.Dereux, T.W.Ebbesen, “ Surface plasmon subwavelength optics,” Nature, 424(6950), 824-830, 2003.

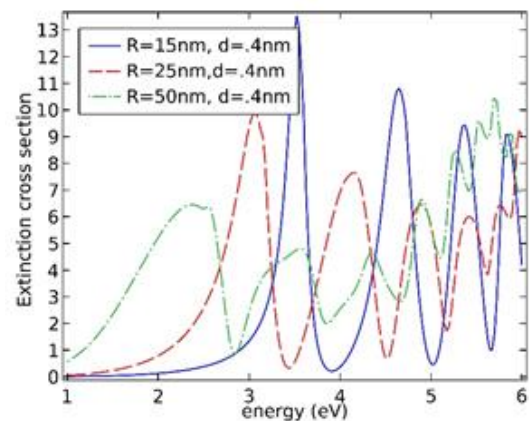
[8] C. David, F.J. García de Abajo, “Spatial nonlocality in the optical response of metal nanoparticles,” The Journal of Physical Chemistry C, 115(40), 19470-19475, 2011.

[9] S. Raza, S. I. Bozhevolnyi, M. Wubs, N. A. Mortensen, “Nonlocal optical response in metallic nanostructures,” Journal of Physics: Condensed Matter, 27(18), 183204, 2015.

[10] G. Toscano, S. Raza, W. Yan, C. Jeppesen, S. Xiao, M. Wubs, A. Jauho, S. I. Bozhevolnyi, N. A. Mortensen, “Nonlocal response in plasmonic waveguiding with extreme light confinement,” Nanophotonics, 2(3), 161-166, 2013.

[11] J.M. McMahon, S.K. Gray, G.C. Schatz, “ Optical properties of nanowire dimers with a spatially nonlocal dielectric function,” Nano letters, 10(9), 3473-3481, 2010.

[12] N.A Mortensen, S. Raza, M. Wubs, T. Sondergaard, S. I. Bozhevolnyi, “A generalized non-local optical response theory for plasmonic nanostructures,” Nature communications, 5, 2014.



شکل ۷: طیف خاموشی نانوذرات با فاصله‌ی ۰/۴ نانومتر با شعاع ۱۵، ۲۵ و ۵۰ نانومتر

می‌شود که با کاهش شعاع نانوذرات قله‌های طیف میرایی بزرگتر شده‌اند و در بسامدهای بزرگتری اتفاق می‌افتند که علت آن قوی‌تر شدن اثرات غیرموضعی در شعاع‌های کوچکتر است.

## ۴- نتیجه‌گیری

در این مقاله، شبیه‌سازی دایمر نقره با فاصله‌ی زیرنانومتری و بررسی اثرات غیرموضعی انجام شده است. پروفایل میدان و نتایج به دست آمده به وضوح اثرات غیرموضعی در مدل پیشنهادی را نشان می‌دهد. با توجه به سازگاری میان نتایج مدل ساده پیشنهادی با مدل هیدرودینامیکی، با صرف زمان و حافظه محاسباتی کمتری می‌توان توسط این مدل به نتایج دقیقی دست یافت. مدل‌های غیرموضعی جابجایی آبی را نسبت به مدل موضعی به‌طور آشکار نشان می‌دهند. کاهش فاصله و شعاع نانوذرات موجب بزرگتر شدن قله‌های پلاسمون سطحی می‌شود که علت آن قوی‌تر شدن اثرات غیرموضعی است.

## مراجع

[1] S.A.Maier, H.A. Atwater, “Plasmonics: Localization and guiding of electromagnetic energy in metal/dielectric structures. Journal of Applied Physics,” 98(1), 011101, 2005.

[2] X.Huang, M.A. El-Sayed, “Gold nanoparticles: optical properties and implementations in cancer diagnosis and photothermal therapy,” Journal of advanced research, 1(1), 13-28. 2010.

[3] B.Dastmalci, P.Tassin, T. Koschny1, C.M. Soukoulis, “A new perspective on materials for

structures due to nonlocal response,” Physical Review B, 84(12), 121412, 2011.

[18] F. Bloch, “Bremsvermögen von Atomen mit mehreren Elektronen,” Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei, 81(5), 363-376, 1933.

[19] S. Lundqvist, N.H. March, “Theory of the inhomogeneous electron gas,” Springer Science & Business Media, 2013.

[20] Y. Luo, A. I. Fernandez-Dominguez, A. Wiener, S. A. Maier, J. B. Pendry “Surface plasmons and nonlocality: a simple model,” Physical review letters, 111(9), 093901, 2013.

[21] C.F. Bohren, D.R. Huffman “Absorption and Scattering of Light by Small Particles,” 82-129, 1983.

[13] G. Toscano, J. Straubel, A. Kwiatkowski, C. Rockstuhl, F. Evers, H. Xu<sup>1</sup>, N. A. Mortensen, M. Wubs, “Resonance shifts and spill-out effects in self-consistent hydrodynamic nanoplasmonics,” Nature communications, 6, 7132, 2015.

[14] G. Barton, “Some surface effects in the hydrodynamic model of metals,” Reports on Progress in Physics, 42(6), 963, 1979.

[15] A. Boardman, “Electromagnetic surface modes. Hydrodynamic theory of plasmon-polaritons on plane surfaces,” Chichester: John Wiley and Sons, 1982.

[16] S. Raza, W. Yan, N. Stenger, M. Wubs, N. A. Mortensen “Blueshift of the surface plasmon resonance in silver nanoparticles studied with EELS. Nanophotonics, 2(2), 131-138, 2013.

[17] S. Raza, G. Toscano, A. Jauho, M. Wubs, N.A. Mortensen, “Unusual resonances in nanoplasmonic



# Investigation of Nonlocal Effects On Metal Dimers

T.Golestanizadeh<sup>1</sup>, T.Jalali\*<sup>2</sup>, A.Zarifi<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Yasouj University, Yasouj

<sup>2</sup> Department of Physics, Persian Gulf University, Bushehr

**Abstract:** In this paper, the interaction of light with coupled metallic nanoparticles by different models are studied. To investigate nonlocal effects simple suggested model and hydrodynamic model are utilized. Metallic nanoparticles are simulated, by taking account nonlocal effects in a simple model. Therefore metal is replaced by a thin composite layer on the metal-dielectric interface. The simulation is done by finite element method. The extinction-cross section spectra of the desired structure comparison are calculated by a local, nonlocal and simple model. Nonlocal models have blue shift regarding local model, for desired structure the blue shift of the first peak in the extinction cross section spectra is 0.19 eV. The extinction-cross section spectra of various separation distance of nanoparticles are shown. Furthermore, the influence of increasing nanoparticles radius on extinction-cross section is analyzed in details. The results reveal that by reducing nanoparticles radius or gap, surface plasmon peaks are increased, due to the stronger nonlocal response. In a smaller radius, the blue shift is significantly larger by the nonlocal model relative to the local model.

**Keywords:** Nonlocal effects, Plamonics, dimer, Coupled nanoparticles.