

مدل سازی نانواتن ها با روش BOR-FDTD و بررسی تاثیر فاصله بر فلوتورسانس

احمد محمدی^{۱*}

چکیده	اطلاعات مقاله
<p>در این مطالعه با استفاده از روش BOR-FDTD، چگونگی افزایش سیگنال فلوتورسانس به کمک نانواتن 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 نانواتن، محیط پیرامون، طول موج نور و فاصله ی گسیل کننده از نانواتن 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 نانواتن می توان به بالاترین میزان افزایش (که می تواند چند هزار برابر باشد) دست یافت.</p>	<p>واژگان کلیدی: نانواتن، روش BOR-FDTD، فلوتورسانس.</p>

۱- مقدمه

فلوتورسانس نانواتن 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^۱ 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^۲ 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، ائتلاف 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، نانواتن و یا آنتن اپتیکی گفته می شود. نانواتن 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 نانواتن 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 نانواتن 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

¹ Decay rate

² Surface Plasmon

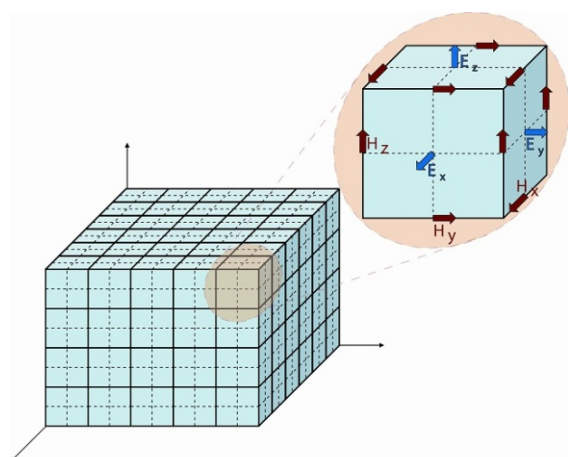
* پست الکترونیک نویسنده مسئول: mohammadi@pgu.ac.ir

۱. استادیار، دانشکده علوم پایه، دانشگاه خلیج فارس

مسئله تابش یک مولکول در کنار نانوذره را می توان در حوزه الکترودینامیک کلاسیک مورد بررسی قرار داد [۱۲]. برای این منظور حل دقیق معادلات تمام برداری ماکسول برای محاسبه میزبان تابش توسط مولکول مورد نیاز است که به صورت تحلیلی جز برای موارد ساده و خاص امکان پذیر نمی باشد. بنابراین نیاز است که از تکنیک های محاسباتی استفاده شود. یکی از این روش ها، روش تفاضل متناهی دامنه زمان^۳ (FDTD) می باشد که به دلیل توانایی حل معادلات ماکسول در دامنه زمان برای ساختارهای پیچیده با ابعاد و شکل دلخواه از اهمیت ویژه ای برخوردار است [۱۳]. در بخش بعد قسمت های مختلف این روش که برای مدل سازی نانواتن مورد نیاز می باشند، به طور خلاصه معرفی می گردند.

۳- روش FDTD استاندارد

در این روش با شبکه بندی فضای مدل سازی و اختصاص خواص اپتیکی به سلول های این شبکه، ساختار مورد مطالعه و میدان های برهم کنش کننده تعریف می شوند. 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 نانواتن ها باید پارامترهای گوناگون آن را به دقت تنظیم نمود، به گونه ای که با کمترین اتلاف انرژی بیشترین افزایش آهنگ فلئورسانس را امکان پذیر سازد. با مدل سازی نانواتن ها چندین قاعده کلی را برای طراحی آن ها پیشنهاد کرده ایم، که شامل تنظیم شکل نانوذره [۲ و ۳]، جنس نانوذره [۴] و استفاده از نانوذرات جفت شده [۵] می باشد. نتایج مدل سازی ها با نتایج آزمایشگاهی که در همین راستا انجام شد مطابقت بسیار خوبی دارند [۷]. در این مقاله با ارائه جزئیات مدل سازی نانواتن به کمک روش Bor^۱-FDTD، و نوشتن کدهای مورد نیاز برای پیاده سازی آن، نشان می دهیم که با تنظیم دقیق فاصله مولکول از نانوذره می توان آهنگ فلئورسانس را به طور چشمگیری افزایش داد.

۲- افزایش فلئورسانس به کمک نانواتن

افزایش سیگنال فلئورسانس در مجاورت نانواتن (S) نسبت به سیگنال فلئورسانس در محیط همگن (S₀) از رابطه (۱) قابل محاسبه می باشد [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 η_0 بهره ی کوانتومی گسیل کننده، E و E₀ به ترتیب میدان الکتریکی در محل گسیل کننده در حضور نانواتن و بدون آن، η_a بهره ی آنتن و F عامل پورسل^۲ می باشند. بهره ی آنتن به صورت نسبت آهنگ واپاشی تابشی به آهنگ کل تعریف می شود و مشخص کننده بخشی از انرژی کل تابش شده توسط گسیل کننده است که به خارج از مجموعه نانواتن- گسیل کننده تابش می شود. لازم به ذکر است که بخش دیگر انرژی درون نانوذره اتلاف می شود. عامل پورسل به صورت نسبت آهنگ واپاشی تابشی گسیل کننده در حضور نانوذره به آهنگ واپاشی تابشی در محیط همگن تعریف می شود.

¹ Body of Revolution

² Purcell factor

³ Finite Difference Time Domain

که ϵ_0 و μ_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^۱ گفته می‌شود. در این مسئله، از شرایط مرزی جاذب PML^۲ 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 ρ چگالی بار الکتریکی می‌باشند.

علاوه بر معادلات ماکسول به معادلات ساختمندی نیز نیازمندیم:

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

¹ Absorbing Boundary Condition

² Perfectly Matched layer

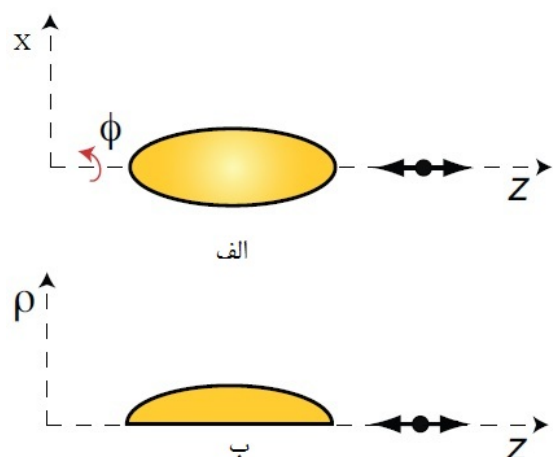
می باشد. بنابراین می توان بستگی میدان های الکتریکی و مغناطیسی به مختصه ϕ را با استفاده از سری فوریه به صورت رابطه (۵) بسط داد [۱۳]:

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

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

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 ϕ را می توان به صورت تحلیلی و به کمک روابط (۵) محاسبه کرد.

شکل ۳ شبکه بندی فضای FDTD سه بعدی در دستگاه استوانه ای و معادل دوبعدی آن در فضای BOR-FDTD را نشان می دهد. در این شکل همچنین محل قرارگیری میدان های الکتریکی و مغناطیسی بر روی هر سلول BOR-FDTD مشخص شده است. با تکرار فرآیندی مشابه با روش FDTD استاندارد می توان معادلات به هنگام سازی میدان ها را به دست آورد.



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

به عنوان مثال معادله به هنگام سازی مؤلفه r میدان الکتریکی به صورت رابطه (۶) به دست می آید [۱۳]:

می شود. برای محاسبه فلونورسانس دو نوع چشمه مورد نیاز است:

۱. چشمه ی نقطه ای: با قرار دادن یک دوقطبی در محل گسیل کننده می توان تابش توسط ملکول را شبیه سازی کرد.
۲. موج تخت: از روش میدان کل-میدان پراکنده شده (TFSF¹) برای تولید موج تخت استفاده می شود. در این تکنیک فضای شبیه سازی به دو بخش میدان کل و میدان پراکنده شده تقسیم می گردد. با اعمال شرایط مرزی مناسب در مرز میان دو بخش می توان میدان فرودی مورد نظر را بوجود آورد.

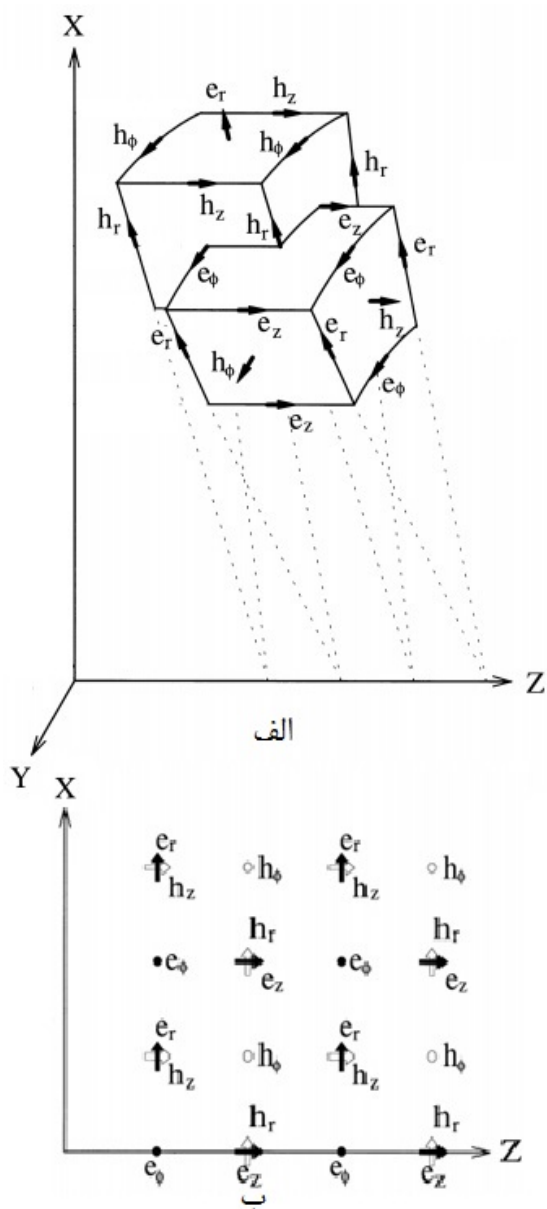
۴- روش BOR-FDTD

یکی از ایرادهای روش FDTD استاندارد نیاز به استفاده از سلول های بسیار ریز برای به دست آوردن جواب های دقیق می باشد. به عنوان نمونه برای مدل سازی دقیق نانوآنتن مورد بحث به سلول هایی به اضلاع یک نانومتر نیاز داریم. بنابراین فضای محاسباتی برای شبیه سازی 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 می شود که انجام چنین مدل سازی بر روی کامپیوترهای معمولی بسیار وقت گیر می باشد. به ویژه در مواردی که نیاز به تکرار شبیه سازی می باشد (مانند مسئله حاضر)، عملاً استفاده از روش FDTD امکان پذیر نمی باشد.

با بهره گیری از تقارن دورانی نانوآنتن در کنار گسیل کننده می توان با روش BOR-FDTD ضمن کاهش فضای سه بعدی به دوبعد، مدل سازی را بر روی کامپیوترهای معمولی انجام داد. همان گونه که در شکل ۲-الف نشان داده شده است، مسئله دارای تقارن دورانی حول محور Z

¹ Total Field/Scattered Field

برای نرخ فلئورسانس به دست می آید. برای مدل سازی از یک نانوذره ی طلا به شعاع ۵۰ نانومتر که در محیطی با ضریب گذردهی ۲/۲۵ قرار دارد، استفاده می شود.



شکل ۳- محل قرارگیری میدان الکتریکی و مغناطیسی بر روی هر سلول الف) فضای FDTD سه بعدی در دستگاه استوانه ای 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 می کنیم. با تکنیک TFSF یک موج تخت با طول موج ۶۵۰ نانومتر از سمت

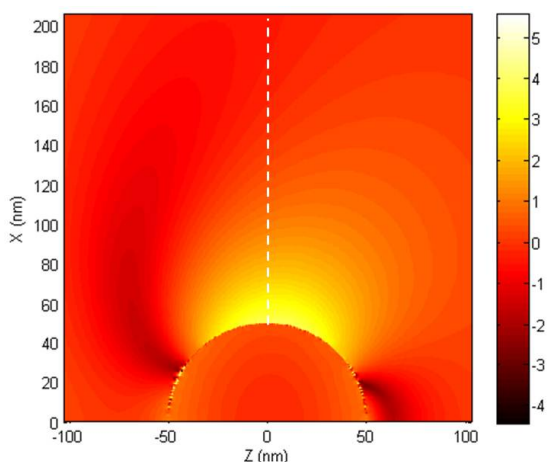
$$E_r^{n+1}(i,j) = \left(1 - \frac{\sigma \Delta t}{2\epsilon_r}\right) E_r^n(i,j) - \frac{\Delta t}{\epsilon_r \left(1 + \frac{\sigma \Delta t}{2\epsilon_r}\right)} \times \left[\frac{H_\phi^{n+1/2}(i,j) - H_\phi^{n+1/2}(i,j-1)}{\Delta z} \right] - \frac{m \Delta t}{\epsilon_r \left(1 + \frac{\sigma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

سایر معادلات به هنگام سازی برای دیگر مؤلفه های میدان های الکتریکی و مغناطیسی به طور مشابه به دست می آیند. بدین ترتیب، مسئله سه بعدی را به هم ارز دوبعدی آن (فضای دو بعدی با شش مؤلفه میدان) کاهش می دهیم که حاصل، کاهش قابل ملاحظه ای در حافظه کامپیوتر و زمان اجرای برنامه می باشد. قابل ذکر است که در مسائل سه بعدی حافظه مورد نیاز متناسب با N^3 و زمان اجرا متناسب با N^4 می باشد که N تعداد سلول های به کار رفته در راستای X, Y, Z می باشد. این در حالی 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 می باشد. کارایی و دقت این روش در مدل سازی مسائل گوناگون الکترومغناطیسی مانند پراکندگی امواج الکترومغناطیسی [۱۵]، رادار زیرسطحی [۱۶]، لنزهای اپتیکی [۱۷] و کاواک تشدید [۱۸] به تأیید رسیده است.

۵- مدل سازی و طراحی نانوانتن

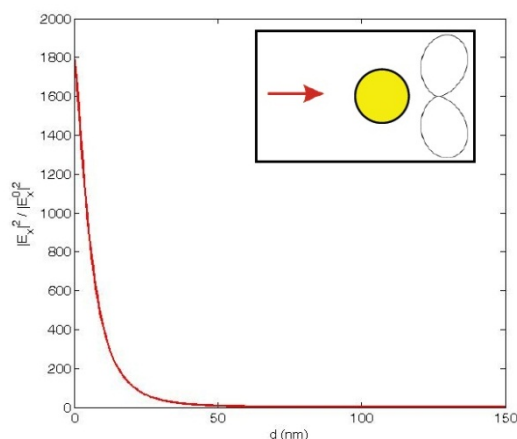
همان گونه که در بخش دوم اشاره شد نرخ فلئورسانس به میدان الکتریکی در محل گسیل کننده، بهره ی آنتن و عامل پورسل بستگی دارد. در این بخش به نحوه محاسبه این کمیت ها با روش BOR-FDTD و بررسی وابستگی آن ها به فاصله گسیل کننده از نانوانتن می پردازیم. نشان می دهیم که با انتخاب مناسب فاصله مقدار بیشینه ای

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 نانوانت‌ها به مولفه‌ی X میدان الکتریکی در محیط همگن

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

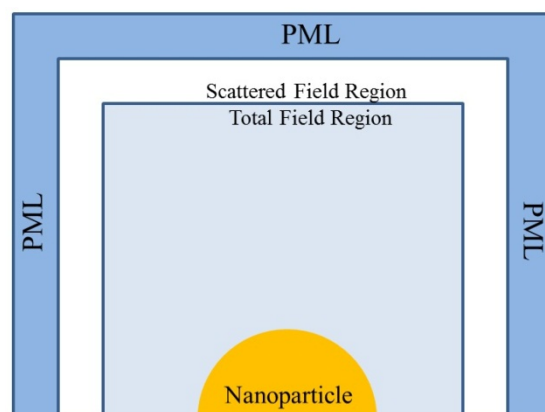


شکل ۶- تغییرات شدت میدان الکتریکی بهنجار برحسب فاصله از سطح نانوذره در امتداد خط چین (شکل ۵). در بالای شکل، الگوی تابشی ناشی از مولکول در مجاورت نانوکره طلا نشان داده شده است.

۲-۵- 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 به‌دست‌آورد:

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.

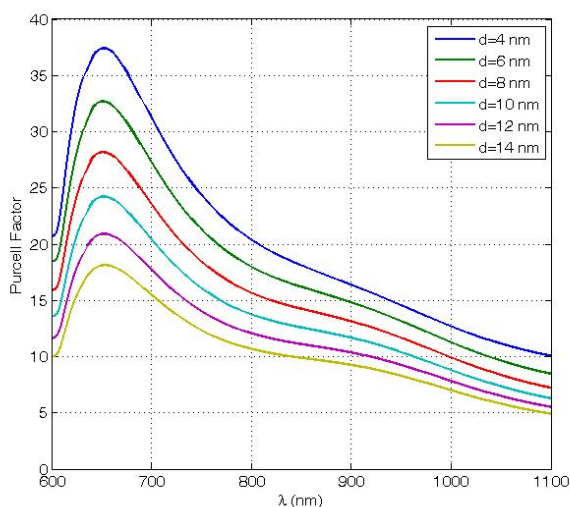


شکل ۴- فضای مدل‌سازی BOR-FDTD برای محاسبه میدان نزدیک در اطراف نانوذره طلا

در شکل ۶ تغییرات شدت میدان الکتریکی بهنجار به‌صورت 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 به‌سرعت کاهش می‌یابد.

نانوانت‌ها 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 نانوانت جفت‌شدگی قوی داشته باشد، انرژی به مدهای پلاسمون سطحی انتقال و به میدان دور تابیده می‌شود. بنابراین الگوی تابشی به‌طور کامل توسط نانوانت تعیین می‌شود [۱۹]. در سال‌های اخیر، تأثیر ساختارهای گوناگون بر روی الگوی تابشی و بهره‌گیری از آن به‌منظور کنترل گسیل مولکولی به‌صورت 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.



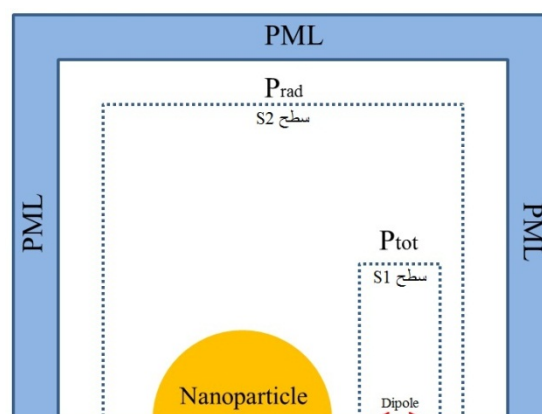
شکل ۹- عامل پورسل به ازای فواصل مختلف گسیل‌کننده از نانوانتِن

۵-۴- محاسبه بهره آنتن

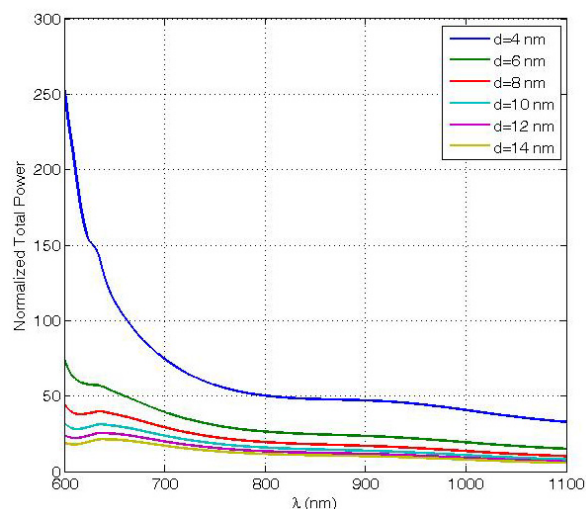
همان‌گونه که اشاره شد بخشی از انرژی تابش شده دوقطبی توسط نانوذره جذب و به گرما تبدیل می‌شود. بنابراین توان تابشی نانوانتِن کمتر از توان تابش شده توسط دوقطبی می‌باشد. برای محاسبه بهره آنتن از دو آشکارساز مطابق شکل ۷ استفاده می‌کنیم. آشکارسازی که دوقطبی و نانوذره را در برمی‌گیرد می‌تواند توان تابشی نانوانتِن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



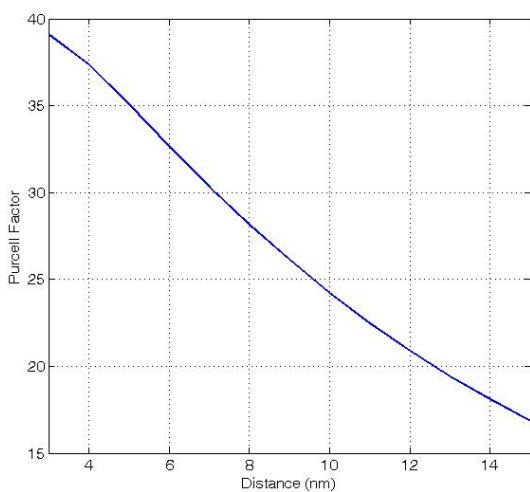
شکل ۸- توان تابش کل بهنجار به ازای فواصل مختلف گسیل‌کننده از نانوانتِن

۵-۳- 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].

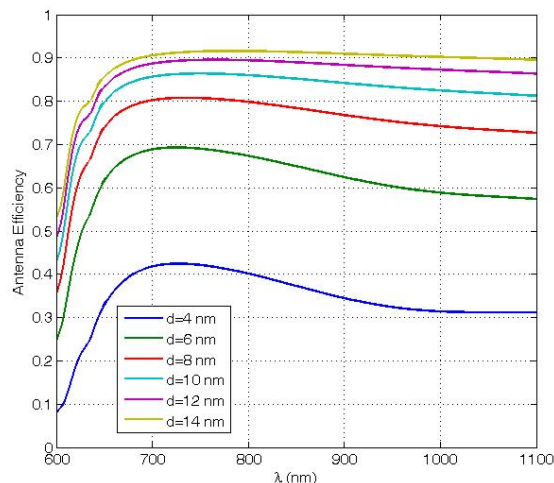
تاثیر نانوآنتن بر تقویت سیگنال فلئورسانس مولکول‌هایی با بهره‌ی کوانتومی پایین‌تر از یک بسیار چشمگیرتر می‌باشد. اندازه‌گیری سیگنال فلئورسانس تک مولکول به دلیل وجود نویز و مشکلات فنی دیگر امکان‌پذیر نمی‌باشد. اما با استفاده از نانوآنتن می‌توان این سیگنال را تا چند هزار برابر افزایش داد به‌گونه‌ای که توسط 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

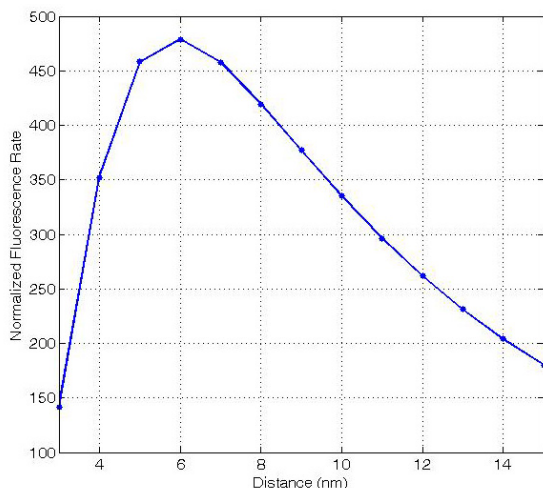
چگونگی تقویت سیگنال فلئورسانس به‌کمک نانوآنتن توسط روش FDTD مورد بررسی قرار گرفته است. از



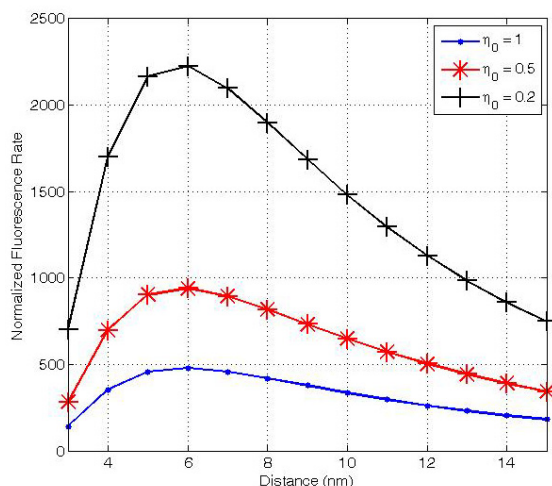
شکل ۱۰- بهره‌ی آنتن برای فواصل گسیل‌کننده از نانوآنتن

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 طول‌موج به‌ازای 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 نانوآپتیک دانشگاه ETH موفق شدند یک مولکول را در



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



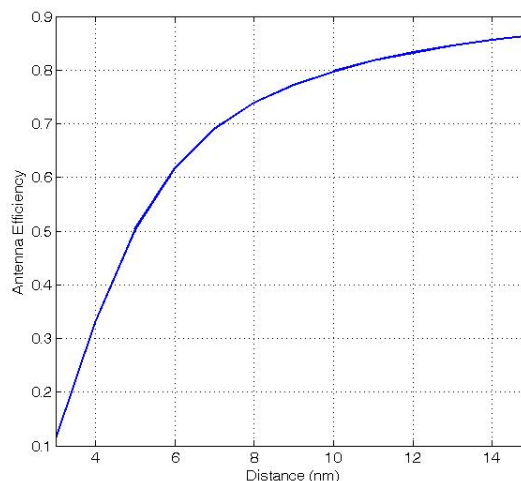
شکل ۱۴- مقایسه آهنگ فلوئورسانس بهنجار برای گسیل‌کننده‌هایی با بهره‌ی کوانتومی مختلف

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 فلوئورسانس 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 فلوئورسانس 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., Bharadway, 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., Garc'ia 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.