



Numerical investigation of the effect of dielectric nanoholes on the optical response of aluminum metal layer

Nasrin Sepahvand¹, Abdol Mohammad Ghalambor Dezfuli ^{2,3} Mohsen Bahrami^{4*}

¹PhD Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran.

²Associate Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran.

³Center for Research on Laser and Plasma, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran.

⁴Assistant Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Lorestan University, Khorramabad, Iran.

ARTICLE INFO

ABSTRACT

Article Type:

Original Research

Received:

Revised:

Accepted:

Keyword:

Aluminum
Finite Difference Time Domain
Nanohole
Plasmonic
Sensor

*Corresponding Author:

Mohsen Bahrami

Email: Bahrami.m@lu.ac.ir

Periodic arrays of dielectric nanoholes have received much attention due to their high ability to control the interaction of plasmonic modes. This research studies the arrangement and composition of plasmonic two-dimensional periodic arrays of cylindrical nanoholes made of air in the Al metal layer. We investigate the plasmonic modes of this nanostructure using the time domain finite difference numerical method under normal s-polarized radiation in the range of 300-750 nm. In this work, we try to create strong surface lattice plasmon modes in the attenuated total reflection spectrum in the visible region by using appropriate dimensions of nanoholes. By changing the period and radius of the nanoholes in the periodic period of 300 nm and the radius of 80 nm in the wavelength of 477 nm, the Lowest amount of reflection is created near the diffraction modes of the dielectric substrate. The plasmonic mode allows us to obtain strong alternating fields. In this regard, by changing the refractive index of nanoholes and the surrounding environment, we observe noticeable changes in the position and intensity of the modes by changing to higher wavelengths. The sensitivity of the mode is equal to 20 nm/RIU. Therefore, the results of this research can show the designed nanostructure as a suitable option for use in refractive index sensors.

EXTENDED ABSTRACT

Introduction

Surface lattice resonance (SLR) modes have a significant effect on the performance of plasmonic devices by improving near-field intensity, reducing line width along with increasing light energy storage. In this research, using FDTD numerical method, we study the attenuated total reflection (ATR) spectrum in the visible region with the aim of investigating the plasmonic performance of aluminum thin metal layer coupled to periodic arrays of nanoholes with the aim of improving absorption.

Methodology

Figure 1 (a, and b) shows a schematic of the proposed plasmonic nanostructure. In this research, we have used different sizes and periods of nanoholes to reduce light reflection.

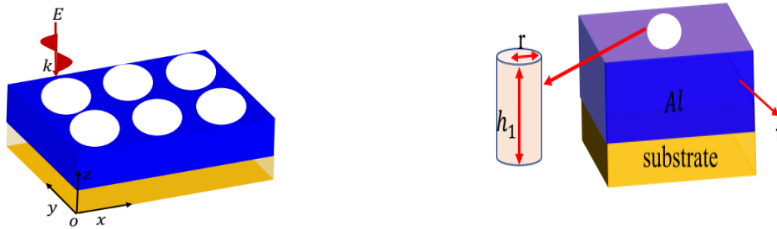


Figure 1 a) Schematic of a nanostructure with Al metal layer and air nanoholes located on a transparent dielectric substrate, b) A view of the designed unit cell

We calculated the light absorption using the relationship $A=1-R-T$, where R and T are the reflected and transmitted light, respectively. The amount of absorption in this nanostructure is equal to $A=1-T$. The following equations calculate the value of the resonance wavelength in periodic nanoarrays and the wavelength of Rayleigh anomalies, respectively.

$$\lambda_{res} = \frac{\Lambda}{\sqrt{i^2 + j^2}} \sqrt{\frac{\epsilon_m \epsilon_d}{\epsilon_m + \epsilon_d}} \quad (1)$$

$$\lambda_R^{air.sub} = \frac{p}{m} [n_{air.sub} \pm \sin(\theta)] \quad (2)$$

Results and discussion

In the first step, in order to understand the role of dielectric nanoholes, we calculated the reflection and optical response of the Al metal layer with a thickness of 100 nm with and without nanoholes. We designed the nanoholes with a height of 100 nm and a radius of 60 nm. The main peak and the highest amount of absorption is located at the wavelength of 465nm, close to the diffraction modes in the period of 300nm of nanoholes. At this wavelength, surface plasmon modes and nanoarray plane diffraction modes interact, resulting in the formation of SLR hybrid modes.

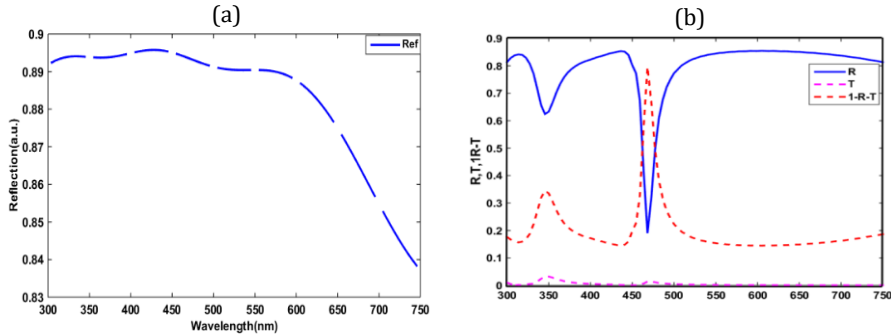


Figure 2 a) Reflection spectrum diagram in Al metal layer, b) Reflection, transmission and absorption spectrum diagram in Al metal layer with the presence of air nanoholes

Next, we examine the period changes of air nanoholes, a key parameter for amplifying electromagnetic resonances in the spectral region (Figure 3a, b). In the periodic period of 300nm, when the λ_{LSPR} of the nanoholes is in wavelengths shorter than the diffraction, the light scattered on the nanoarray plane leads to the strengthening of the plasmonic modes. By reducing the distance between the nanotubes, dipole plasmons interact in phase with the metal-dielectric interface, which enhances this near-field process and improves the localizing and absorption of light in the nanostructure.

In the continuation of the calculations, with the increase in the radius of the nanoholes, the resonance wavelength changes from 465 nm to 477nm and the amount of light reflection decreases. At a radius of 80nm, we obtain the attenuated total reflection (ATR) spectrum. By increasing the radius of dielectric nanocavities, the plasmon resonance of one nanoparticle overlaps spectrally with the resonance of another nanoparticle. This coupling enables more energy storage in the nanostructure. In this regard, the localizing fields caused by the Coulomb interaction between the surface charges of two particles are strengthened and lead to a decrease in reflection and an increase in light absorption (Figure 4 (b)).

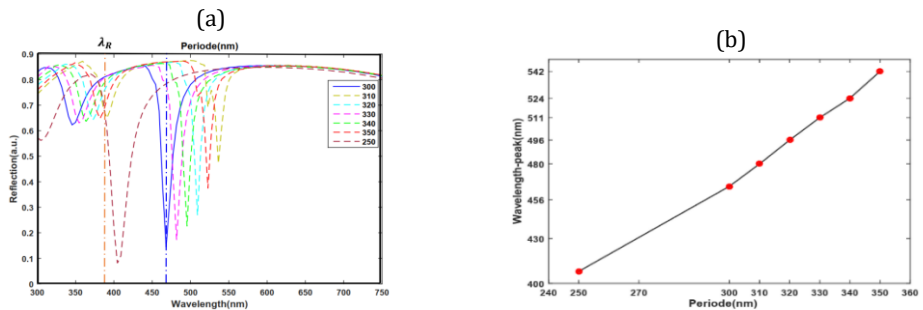


Figure 3 a) reflection spectrum, b) resonance wavelengths according to different periods of air nanoholes

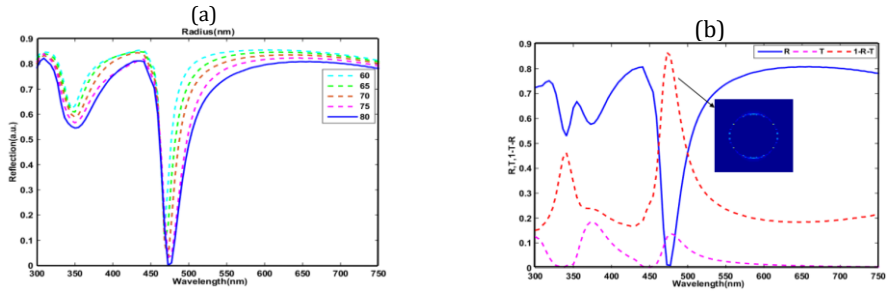


Figure 4 a) reflection spectrum, b) reflection, transmission, and absorption spectra at 477 nm wavelength

In this step, we changed the refractive index of dielectric nanoholes to MgF_2 ($n = 1.3$), Al_2O_3 ($n = 2.89$), and Si ($n=3.44$) (figure 5a). According to the quasi-electrostatic approximation, as the refractive index of nanoholes increases, their dielectric constant also increases. This increase leads to a decrease in resonant frequencies and a shift to higher wavelengths. Then, to use the designed nanostructure in sensors, we changed the refractive index of the surrounding environment (figure 5b). According to the figure, with the increase of the refractive index of the environment from 1 to 1.45, the resonance peaks change to higher wavelengths and the resonance wavelength changes from 477 nm to 486 nm. In this regard, we calculated the sensitivity in different environments according to the table below. Based on this, our proposed nanostructure has a good sensitivity in this wavelength range compared to previous studies.

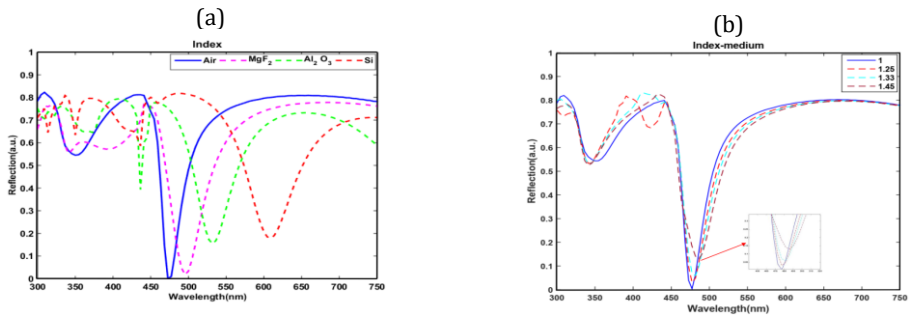


Figure 5 Reflection spectrum diagram in different refractive index a) dielectric nanoholes, b) dielectric environments

Table 1. Sensitivity of nanostructure with different refractive index of environment

Refractive index	λ (nm)	$\Delta\lambda$ ((nm)	S(nm/ RIU)
1	477	-	-
1.25	479	2	8
1.33	481	2	25
1.45	486	5	41

Conclusion

Our calculations showed that the presence of cylindrical dielectric nanoholes made of air in the aluminum metal layer minimizes the amount of light reflection. By using appropriate dimensions of nanoholes, we created strong SLR modes in the attenuated total reflection spectrum in the visible spectrum region. In the period of 300 nm and the

radius of 80 nm at the wavelength of 477 nm, the highest amount of absorption was observed near the diffraction modes of the dielectric substrate. With the presence of nanoholes in the metal layer, the amount of light reflection decreased and high absorption was obtained in the created hybrid mode. Then, by changing the periodicity and radius of the nanoholes, we observed that the amount of the reflection spectrum was weakened and the position of the wavelength of the resonant modes was changed. By changing the refractive index of the surrounding environment, we achieved the sensitivity in this mode equal to 41nm/RIU. Therefore, the results of this research can show the designed nanostructure as suitable option for use in refractive index sensors.



بررسی عددی تأثیر نانوحفره‌های دی‌الکتریک بر پاسخ اپتیکی لایه فلزی آلومینیوم

نسرین سپهوند^۱، عبدالمحمد قلمبردزفولی^{۲،۳}، محسن بهرامی^۴

- ۱- دکتری فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران.
- ۲- دانشیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران.
- ۳- مرکز تحقیقات لیزر و پلاسما، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران.
- ۴- استادیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه لرستان، خرم‌آباد، ایران.

چکیده

اطلاعات مقاله

آرایه تناوبی نانوحفره‌های دی‌الکتریک به دلیل توانایی بالا در کنترل برهم‌کنش مدهای پلاسمونی بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند. این پژوهش، به مطالعه آرایش و ترکیب پلاسمونیک آرایه تناوبی دو بعدی نانوحفره‌های استوانه‌ای شکل از جنس هوا در لایه فلزی آلومینیوم می‌پردازد. مدهای پلاسمونی در این نانوساختار با استفاده از روش عددی تفاضل متناهی حوزه زمان و تحت تابش نورمال قطبش s- در محدوده طیفی ۷۵۰-۳۰۰ nm بررسی می‌شود. در این کار تلاش می‌گردد، با به‌کارگیری ابعاد مناسبی از نانوحفره‌ها، تشدید پلاسمون شبکه سطحی را در کمینه طیف انعکاس در ناحیه طیف مرئی ایجاد نماییم. با تغییر دوره تناوب و شعاع نانوحفره‌ها در دوره تناوب ۳۰۰ nm و شعاع ۸۰ nm در طول موج ۴۷۷ nm کم‌ترین مقدار انعکاس در نزدیکی مدهای پراش زیرلایه دی‌الکتریک ایجاد می‌شود. این مد پلاسمونی امکان دست‌یابی به میدان‌های جایگزیده قوی را در نانوساختار طراحی شده فراهم می‌کند. در این راستا، با تغییر ضریب شکست نانوحفره‌ها و محیط اطراف، تغییرات محسوسی در جایگاه و شدت مدها با تغییر به طول موج‌های بالاتر مشاهده می‌کنیم. میزان حساسیت این مد برابر ۲۰ nm/RIU است. نتایج حاصل از این پژوهش می‌تواند نانوساختار طراحی شده را به عنوان گزینه مناسبی برای کاربرد در حسگرهای ضریب شکست نشان دهد.

نوع مقاله: مقاله پژوهشی

دریافت مقاله: ۱۴۰۲/۰۲/۱۴

بازنگری مقاله: ۱۴۰۲/۰۴/۱۱

پذیرش مقاله: ۱۴۰۲/۰۴/۱۷

کلید واژگان:

آلومینیوم
پلاسمونیک
تفاضل متناهی حوزه زمان
حسگر
نانوحفره

*نویسنده مسئول: محسن بهرامی

پست الکترونیکی:

Bahrani.m@lu.ac.ir



مقدمه

در سال‌های اخیر، پاسخ نوری نانوساختارهای فلزی در برهم‌کنش با امواج الکترومغناطیسی به دلیل مدهای پلاسمون سطحی^۱، بسیار مورد توجه قرار گرفته است [۱]. مدهای پلاسمون سطحی جایگزیده (LSP)^۲ و پلاریتون پلاسمون سطحی (SPP)^۳ انتشاری در سطح مشترک فلز - محیط دی‌الکتریک به دلیل تغییر تابع دی‌الکتریک آن‌ها ایجاد می‌شوند [۲؛ ۳]. مدهای پلاسمونی ایجاد شده توانایی متمرکز کردن انرژی الکترومغناطیسی نور در محدوده‌ای با مقیاس نانومتر و کوچک‌تر از آن (حد پراش نور) را دارند. با جایگزیده شدن نور، میدان‌های الکترومغناطیسی در نزدیکی سطح فلز تقویت می‌شوند [۴]. در این راستا، خواص نوری ساختار از جمله جذب، انعکاس و عبور با توجه به شکل، اندازه، محیط اطراف نانوساختار فلزی، تغییرات قابل توجهی می‌یابد [۵]. از طرفی، وجود اتلاف‌های اهمی و تابشی در نانوساختارهای فلزی منجر به پهنای طیفی گسترده با طول عمر کوتاه، فاکتور کیفیت پایین مدها و باعث محدودیت در تشدیدهای LSP می‌گردد [۶]. یکی از روش‌های مؤثر برای جبران این محدودیت‌ها و تقویت مدهای پلاسمونی، به کارگیری آرایه تناوبی از نانوحفره‌های دی‌الکتریک در ساختار فلزی است [۷]. گروه تحقیقاتی ماسون^۴، با به کارگیری نانوحفره‌ها، در لایه‌های فلزی ضخیم یک افزایش شدت قابل توجه نور عبوری، را در مقایسه با نور فرودی هنگامی که به نانوحفره‌ها به صورت نرمال (عمودی) تابیده می‌شود، گزارش کردند [۸]. شوئند^۵ و همکاران، ایجاد مدهای پلاسمون سطحی در لایه‌های نازک (۲۰ nm) آلومینیوم و طلا را با ایجاد نانوحفره‌ها در لایه‌های نازک، مورد مطالعه قرار دادند. در هر دو فلز، دو مد تشدیدی SPP و LSP را به ترتیب در بیشینه و کمینه طیف خاموشی با تغییر قطر نانوحفره‌ها گزارش کردند [۹]. سانگ^۶ و همکاران، با استفاده از نانوحفره‌ها در یک لایه فلزی طلا، انتقال نوری قابل توجهی را در ناحیه فرکانسی تراهرتز گزارش کردند. آن‌ها انتقال نور را تا ۰/۹۷ با پهنای طیفی ۹ nm به دلیل جفت شدگی مدهای SPP و LSP در حضور نانوحفره‌ها نشان دادند [۱۰].

نانوساختارهای طراحی شده، شامل آرایه‌ای با حفره‌های نانومقیاس در یک لایه فلزی به دلیل خواص نوری مناسب، نسبت سطح به حجم بالا و توانایی تقویت مدهای LSP جایگزیده و SPP انتشاری از اهمیت بالایی بهره‌مند هستند [۱۱]. این ویژگی‌ها امکان انتقال نوری فوق‌العاده^۷ و یا انعکاس کلی ضعیف شده^۸ را به دلیل تحریک مؤثر پلاسمون‌ها فراهم می‌سازند. با قرارگیری و آرایش تناوبی نانوحفره‌ها در فاصله بسیار نزدیک به یکدیگر (فاصله بسیار کوچک‌تر از طول موج نور فرودی) و جفت‌شدگی میدان نزدیک می‌توان شدت میدان‌های الکترومغناطیسی جایگزیده را نیز بهبود بخشید [۱۲]. در این راستا، هنگامی که دوره تناوب آرایه قابل مقایسه با طول موج نور فرودی باشد، پاسخ پلاسمونیک نانوذرات تحت اثرات پراش ناشی از الگوی فضایی نانوآرایه قرار می‌گیرد. امواج پراش شده، در امتداد صفحه آرایه در نزدیکی طول موج ناهنجاری‌های ریلی با مدهای LSP نانوذرات منفرد با یکدیگر جفت شده و باعث ایجاد تشدید شبکه سطحی (SLR)^۹ می‌شوند [۱۳؛ ۱۴]. با ایجاد مدهای SLR و تقویت شدت میدان نزدیک، از این مدها می‌توان

¹ Surface plasmon (SP)

² Localized Surface Plasmon (LSP)

³ Surface Plasmon Polariton (SPP)

^۴ Masson

^۵ Shoend

^۶ Song

⁷ Extraordinary optical transmission (EOT)

⁸ Attenuated Total Reflectance (ATR)

⁹ Surface Lattice Resonance

برای بهبود انواع کاربردهای اپتوالکترونیکی از قبیل: نانولیزرها [۱۵]، حسگرها [۱۶]، طیف‌سنجی رامان تقویت شده [۱۷]، فتوولتائیک [۱۸] و غیره استفاده کرد.

بسیاری از پژوهشگران در تحقیقات خود، بر روی فلزات نجیب مانند طلا و نقره، به دلیل پاسخ‌های نوری قوی در طول موج‌های مرئی و فروسرخ نزدیک متمرکز شده‌اند. اما گران قیمت و کمیاب بودن این فلزات، استفاده از آن‌ها را در مقیاس‌های بزرگ محدود نموده است [۱۹]. اخیراً، فلز آلومینیوم (Al)، سومین عنصر فراوان بر روی زمین، به دلیل ارزان قیمت بودن و بخش‌های حقیقی منفی و موهومی مثبت تابع دی‌الکتریک در ساختارهای پلاسمونیک بسیار مورد توجه قرار گرفته است. اگرچه Al جزء فلزات نجیب نیست، اما تراز انرژی d آن که بالاتر از انرژی فرمی قرار دارد به ایجاد پلاسمون‌های قابل تنظیم در ناحیه طیف مرئی کمک می‌کند. علاوه بر این، فرکانس پلاسما بالا (eV ۱۲/۷) و انرژی انتقال بین‌باندی (eV ۱/۵) آن، منجر به اتلاف غیرتابشی پایین در ناحیه ماوراءبنفش تا فروسرخ نزدیک می‌شود. از اینرو، نانوساختارهای پلاسمونیک مبتنی بر Al می‌توانند بالاترین افزایش میدان الکتریکی و راندمان جذب در این ناحیه طیفی را داشته باشند [۲۰].

در راستای مطالعات انجام شده و به کارگیری نانوحفره‌ها در ساختارهای فلزی، ایبسن^۱ و همکاران عبور نوری بالایی را به وسیله حفره‌هایی با اندازه زیر طول موج در لایه فلزی نقره با تشدیدهای تیز و حساس به زاویه در طیف‌های عبور مشاهده کردند [۲۱]. در مطالعه دیگر، ماسون و همکاران خواص نوری آرایه‌های نانوحفره‌های طلا و نقره را با دوره تناوب ثابت و اندازه‌های مختلف مطالعه کردند و با بهینه‌سازی ترکیب فلز و اندازه نانوحفره این خواص را افزایش دادند [۲۲]. ستین^۲ و همکاران با ایجاد نانوحفره‌ها در لایه فلزی طلا بر روی یک زیرلایه هیبریدی حساسیت بالایی را در ناحیه فروسرخ نزدیک ایجاد کردند [۲۱]. گزارش‌های عده دیگری از پژوهشگران، از جمله لیاو^۳ و همکاران بهینه‌سازی عملکرد نانولیزر را با جفت‌شدگی نانوحفره‌های فلزی به عنوان تشدیدگر در محیط بهره نشان دادند [۲۳]. در گزارشی دیگر لوسپین‌سو^۴ و همکاران به صورت تجربی و عددی با تقویت میدان دور و نزدیک نانوحفره‌ها در لایه فلزی طلا آن‌ها را برای کاربردهای حسگری بهینه‌سازی کردند [۲۴].

در این پژوهش، به منظور ارزیابی عملکرد پلاسمونیک (نوری) لایه فلزی نازک Al جفت شده با آرایه‌های تناوبی نانوحفره‌ها طیف انعکاس کلی ضعیف شده را مورد مطالعه قرار می‌دهیم. نانوحفره‌ها استوانه‌ای شکل با آرایش مربعی بر روی یک زیرلایه دی‌الکتریک قرار دارند. در این طراحی، کمینه مقدار طیف انعکاس را در مدهای SLR مرتبه اول در کمینه طیف انعکاس نور مشاهده می‌کنیم. به منظور کنترل مقدار انعکاس نور، تغییرات پارامتر ساختاری نانوحفره‌ها (شعاع)، جنس و دوره تناوب آن‌ها را در ناحیه مرئی مورد بررسی قرار می‌دهیم. همچنین، اثرات تغییرات ضریب شکست محیط بر تشدید پلاسمونی نانوساختار و عملکرد حسگری آن نیز بررسی می‌شود. انتظار می‌رود، نتایج حاصل از این پژوهش، به کارگیری لایه فلزی Al با نانوحفره‌های فوق‌الذکر را به عنوان گزینه مناسبی برای کاربرد در حسگرها و سایر دستگاه‌های اپتوالکترونیکی مطرح سازد.

این پژوهش در چهار بخش مجزا بیان شده است. بخش اول، با معرفی کلی پدیده پلاسمون سطحی و اهمیت آن در نانوفوتونیک، زمینه را برای ارائه یک روش جدید در کنترل مدهای پلاسمونی فراهم می‌کند. در بخش بعد، به طراحی ساختار مورد نظر پرداخته شده و روابط تئوری حاکم بر برهم‌کنش نور با نانوذرات فلزی و تشکیل مدهای هیبریدی بیان می‌گردد. همچنین، روش شبیه‌سازی عددی به کار رفته در این پژوهش معرفی می‌شود. در بخش سوم، نتایج

¹ Ebbesen

² Cetin

³ Liao

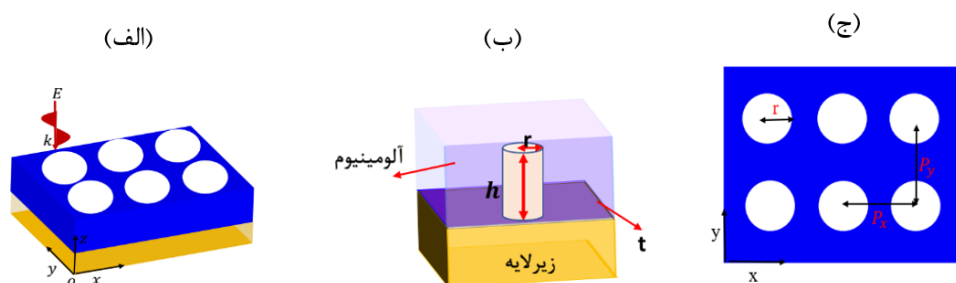
⁴ Lospinoso

شبه‌سازی‌های عددی و تحلیل پاسخ نوری ساختارهای طراحی شده ارائه شده و کاربردهای آن‌ها در حوزه حسگرها مورد بررسی قرار می‌گیرد.

تئوری و روش

۱. طراحی نانو ساختار

شکل ۱- (الف) طرحواره‌ای از نانو ساختار پلاسمونیک پیشنهادی را نشان می‌دهد. نانو ساختار طراحی شده، شامل آرایه دو بعدی مربعی از نانوحفره‌های استوانه‌ای با سطح مقطع دایره شکل می‌باشد که بر روی یک زیرلایه دی‌الکتریک با ضریب شکست n_{sub} در یک محیط نامتقارن قرار گرفته است. یک هندسه واحد از این نانو ساختار در شکل ۱- (ب) نشان داده شده است. نانوحفره‌ها با شعاع r و ارتفاع h به ترتیب، در لایه فلزی Al با ضخامت t طراحی شده‌اند و مطابق شکل ۱- (ج) با یک دوره تناوب مشخص ($p_x = p_y$) آرایش یافته‌اند. تابع دی‌الکتریک وابسته به فرکانس نانوذرات که در محاسبات اعمال می‌شود از مرجع پالیک گرفته شده است [۲۵].



شکل ۱. (الف) طرحواره‌ای از پیکربندی با قطبش نور فرودی شامل، لایه Al و نانوحفره‌های هوا که بر روی یک زیر لایه دی‌الکتریک شفاف قرار دارند، (ب) نمایی از سلول واحد با زیرلایه دی‌الکتریک، ضخامت معین لایه Al و نانوحفره هوا (ج) نمای بالایی لایه Al و نانوحفره‌های هوا با قطر و دوره تناوب معین

۲. برهم‌کنش نور با نانوارایه

برهم‌کنش نور با نانوذرات فلزی عمدتاً توسط الکترون‌های رسانش، نزدیک به سطح فلز صورت می‌گیرد. برای بیان وابستگی طول موج مد LSPR آن‌ها، به تابع دی‌الکتریک محیط اطراف، می‌توان رابطه تابع دی‌الکتریک وابسته به فرکانس ($\epsilon(\omega)$) مدل درود^۱، را اعمال کرد [۲۶]:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma_b)} \quad (1)$$

که ω_p فرکانس پلازما ($\omega_p = \sqrt{\frac{ne^2}{\epsilon_0 m}}$)، γ_b ثابت میرایی حجمی و ω فرکانس نور فرودی است. خواص نوری نانوذرات فلزی با بخش‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک آن‌ها بیان می‌شود. بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک فلز، توانایی قطبش‌پذیری فلز را توصیف می‌کند و بخش موهومی آن اتلاف ماده را نشان می‌دهد [۲۳]. از طرفی، میدان الکترومغناطیسی نور فرودی $|E_0|$ یک گشتاور دوقطبی را در نانو ساختار ایجاد می‌کند که بزرگی آن متناسب با شدت میدان الکتریکی اعمال شده است [۱۴]:

^۱Drude

$$\alpha = 4\pi a^3 \frac{\varepsilon(\omega)-1}{\varepsilon(\omega)+2} \quad (2)$$

که شعاع نانوذرات فلزی است. هنگامی که مخرج کسر رابطه (۲) به صفر نزدیک می‌شود، با افزایش قطبش‌پذیری نانوذرات با تقویت مدهای LSP در نانو ساختار همراه است. در این صورت، موقعیت طیفی مدهای LSP را می‌توان از شرط فرولیش، $\text{Re}[\varepsilon(\omega)] = -2$ ، تعیین کرد. $\text{Im}[\varepsilon(\omega)]$ را با توجه به صفر بودن ثابت دی‌الکتریک محیط اطراف نیز صفر در نظر می‌گیریم. برهم‌کنش تشدید نور فرودی با پلاسمون‌های سطحی در سطح مشترک لایه فلز - دی‌الکتریک آرایه‌های تناوبی هنگامی حاصل می‌شود که پایستگی تکانه به صورت رابطه زیر برقرار باشد [۳]:

$$K_{SP} = k_0 \sin\theta \pm iG_x \pm jG_y \quad (3)$$

که i و j به ترتیب مرتبه‌های پراش بردارهای شبکه G_x و G_y ($|G_x| = |G_y| = \frac{2\pi}{p}$) که دوره تناوب آرایه و θ زاویه برخورد نور فرودی است) می‌باشد. آرایه نانوحفره‌های تناوبی عمدتاً امکان انتقال نوری فوق‌العاده را از طریق حفره‌های موجود در لایه نازک فلز در طول موج‌های تشدید نشان می‌دهند. خواص نوری این سیستم به پارامترهای هندسی آرایه نانوحفره و رفتار دی‌الکتریک لایه نازک و محیط اطراف آن بستگی دارد که طول موج تشدید، آرایه نانوحفره‌ها با رابطه زیر بیان می‌شود [۲۸]:

$$\lambda_{res} = \frac{p}{\sqrt{i^2+j^2}} \sqrt{\frac{\varepsilon_m \varepsilon_d}{\varepsilon_m + \varepsilon_d}} \quad (4)$$

که p دوره تناوب، ε_m و ε_d ثابت دی‌الکتریک محیط فلز و دی‌الکتریک است.

۳. طول موج ناهنجاری ریلی

با قرارگیری نانوحفره‌ها در لایه فلزی و جفت‌شدگی مدهای LSPR با مدهای پراش صفحه آرایه تناوبی، یک مد SLR با شدت بالا ایجاد می‌شود. با این جفت‌شدگی که در نزدیکی طول‌موج‌های ناهنجاری ریلی در محیط زیرلایه (معمولاً شیشه) یا در لایه پوشاننده (گاهی اوقات هوا) صورت می‌گیرد، می‌توان طول موج‌های ناهنجاری‌های ریلی را با رابطه زیر تعیین کرد:

$$\lambda_{R-m}^{air} = \frac{p}{m} [n_{air} \pm \sin(\theta)] \quad (5)$$

$$\lambda_{R-m}^{sub} = \frac{p}{m} [n_{sub} \pm \sin(\theta)] \quad (6)$$

که m عدد مرتبه پراش در جهت x یا y و n_{sub} ضریب شکست زیرلایه است. θ زاویه تابش نور فرودی، p دوره تناوب و λ_R طول موج پراش (ناهنجاری ریلی) است. در طول موج‌های پراش کمتر از طول موج مد LSPR ($\lambda_R < \lambda_{LSPR}$)، جفت‌شدگی‌های تابشی به دلیل این‌که مرتبه‌های پراش انرژی بالاتری نسبت به تشدید پلاسمون دارند، بسیار ضعیف می‌باشند. در شرایطی که λ_{LSPR} نانوذرات منفرد در طول موج‌هایی کمتر از طول موج‌های پراش ($\lambda_{LSPR} < \lambda_R$) قرار گیرد، نور پراکنده شده در صفحه نانوآرایه منجر به تقویت مدهای پلاسمونی و کاهش میرایی تابشی فلز می‌شود [۲۹].

۴. روش محاسبات

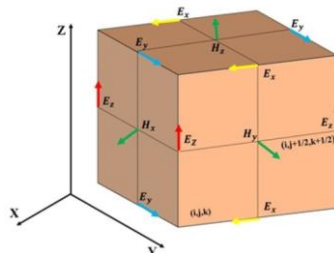
برای مطالعه خواص نوری نانو ساختار طراحی شده در این پژوهش، از نرم‌افزار لومریکال واحد عددی تفاضلات محدود حوزه زمان (FDTD)^۱ استفاده می‌کنیم. این روش مستقیماً معادلات کرل ماکسول، یعنی معادلات مربوط به قوانین آمپر و فارادی را حل می‌کند و نیازی به تعریف پتانسیل ندارد. نرم‌افزار لومریکال، در ماژول^۲ FDTD،

¹ Finite-Difference Time-Domain

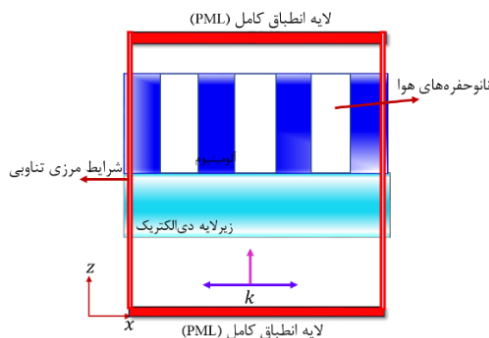
² Solution

امکان شبیه‌سازی دقیق و سریع ساختارهای نانوفوتونیک در گستره وسیعی از طول موج‌ها را فراهم می‌کند. این ماژول، با حل عددی معادلات ماکسول در حوزه زمان، امکان تحلیل دقیق رفتار نور در ساختارهای پیچیده را ایجاد می‌کند. از جمله مزایای نرم‌افزار لومریکال می‌توان به دقت بالا، قابلیت شبیه‌سازی ساختارهای سه بعدی، موازی‌سازی محاسبات و عدم نیاز به حل معادلات انتگرالی پیچیده اشاره کرد. با در نظر گرفتن تقریب اختلاف مرکزی برای مشتقات زمانی و مکانی معادلات ماکسول، می‌توان به طور مستقیم کل مقادیر مؤلفه‌های میدان الکتریکی و مغناطیسی را در هر سه بعد فضایی محدوده محاسباتی (x, y, z) محاسبه کرد. در ماژول FDTD، مطابق شکل ۲، فضای شبیه‌سازی به سلول‌های مکعبی (سلول بی^۱) تقسیم می‌شود. ساختار مورد نظر به تعدادی سلول به ابعاد $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ تقسیم می‌شود که هر بعد باید به اندازه $\lambda/10$ باشد [۳۰].

هنگام استفاده از روش FDTD، برای انجام محاسبات مطابق شکل ۳، در مرزهای بالا و پایین ناحیه شبیه‌سازی (جهت Z) به منظور جلوگیری از ایجاد انعکاس غیر واقعی از مرزها، شرایط مرزی لایه انطباق کامل^۲ را اعمال کردیم [۳۰]. در مرزهای لایه انطباق کامل، امواج خروجی از داخل ناحیه محاسباتی به طور کامل بدون انعکاس در آن جذب می‌شوند. در مرزهای طرفین (جهت‌های X و Y)، چون ساختار شبیه‌سازی مورد نظر در این راستاها متناوب است و از طرف دیگر شبیه‌سازی کل نانوساختار به‌طور مستقیم بسیار زمان‌بر و نیاز به حافظه رایانه‌ای بسیار زیادی دارد، برای انجام شبیه‌سازی یک سلول واحد با شرایط مرزی تناوبی در راستای محور X و Y به کار گرفته می‌شود تا بتوانیم کل ساختار را راحت‌تر شبیه‌سازی نمائیم. از منبع نور موج تخت با قطبش s در راستای محور Z برای تحریک تشدید پلاسمون‌ها در سطح مشترک لایه فلزی Al و ناحیه‌ها از سمت زیرلایه دی‌الکتریک استفاده می‌شود.



شکل ۲. طرحواره‌ای از سلول بی



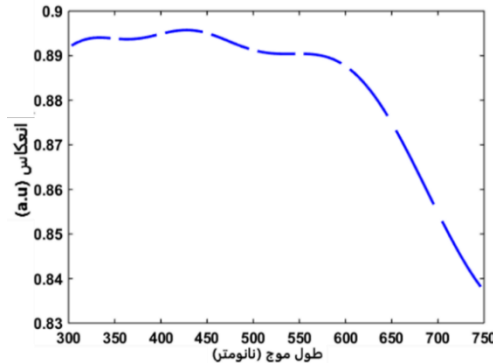
¹ Yee

² Perfect Match Layer (PML)

شکل ۳. نمای جانبی مدل شبیه‌سازی در صفحه $x-z$ ، شامل لایه انطباق کامل با شرایط مرزی تناوبی

نتایج و بحث

مطابق با مطالب بیان شده، یک نانوساختار پلاسمونیک به منظور کنترل و برهم‌کنش مدهای پلاسمونی مطابق شکل ۱ طراحی کردیم. این نانوساختار شامل، زیرلایه دی‌الکتریک با ضریب شکست $n_{\text{sub}} = 1/55$ ، یک لایه فلزی Al و آرایه تناوبی مربعی از نانوحفره‌های استوانه‌ای است. نانوحفره‌ها را با ارتفاع 100 nm و شعاع 60 nm طراحی کردیم. نانوحفره‌ها در دوره تناوب 300 nm ، به گونه‌ای طراحی شده‌اند که در جهت‌های x و y در تابش نرمال مستقل از نوع قطبش نور فرودی می‌باشند. ضخامت لایه فلزی Al، برابر با 100 nm ، که بسیار ضخیم‌تر از عمق نفوذ آن (13 nm) در ناحیه طیفی مورد استفاده است، می‌باشد. نسبت ارتفاع نانواستوانه‌ها به ضخامت لایه فلزی Al (h/t) برابر با ۱ است. بدین معنا، نانوحفره‌ها تا عمق لایه فلزی Al نفوذ کرده و به سطح زیرین آن می‌رسند. این نسبت، می‌تواند تأثیر قابل توجهی بر خواص نوری ساختار، از جمله شدت میدان الکتریکی جایگزیده، جفت‌شدگی مدهای نانوحفره‌ها و فرکانس تشدید پلاسمون سطحی لایه فلزی Al داشته باشد. جذب نور در این نانوساختار را می‌توان با رابطه $A = 1 - R - T$ محاسبه کرد که در آن R و T به ترتیب نور منعکس شده و عبوری هستند. لازم به ذکر است، هر کدام از اجزاء سازنده نانوساختار طراحی شده، عملکرد متفاوتی در برهم‌کنش با نور فرودی دارند که این عملکرد تابعی از شکل، ترکیب و اندازه آن‌ها می‌باشد. از اینرو، به منظور بررسی تأثیر نانوحفره‌ها بر ایجاد مدهای پلاسمونی در لایه فلزی Al، ابتدا پاسخ نوری این لایه را مورد بررسی قرار می‌دهیم. سپس در مرحله بعد، با اضافه نمودن نانوحفره‌ها به آن و برای درک بهتر این که هر این جزء چه تأثیری بر پاسخ نوری نانوساختار طراحی شده دارد، مدهای ایجاد شده مطالعه می‌شوند. بدین منظور، مطابق شکل ۴، ابتدا، طیف انعکاس لایه Al تحت تابش نرمال با قطبش s را در محیط هوا مطالعه می‌کنیم.

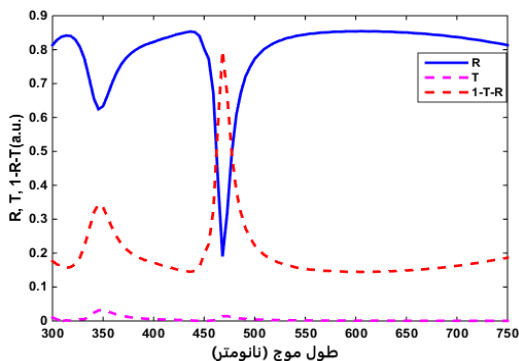


شکل ۴. نمودار طیف انعکاس در لایه فلزی Al

همان‌طور که مشاهده می‌شود، طیف انعکاس در محدوده طول موج 300 nm تا 600 nm تغییرات نسبتاً آرامی دارد، اما پس از آن با افزایش طول موج طیف انعکاس روندی کاهشی قابل توجهی دارد. این کاهش ناگهانی، را می‌توان با توجه به گذارهای بین نواری فلز Al که در ناحیه فرورسرخ نزدیک وجود دارد، توضیح داد. در این فرآیند، فوتون‌های نور با انرژی کافی، الکترون‌ها را از تراز انرژی d به نوار رسانش برانگیخته می‌کنند. این جذب انرژی نور توسط الکترون‌ها باعث کاهش تعداد فوتون‌های منعکس شده و در نتیجه کاهش طیف انعکاس می‌شود. از طرفی، با افزایش طول موج، نور فرودی در عمق بیشتری از فلز نفوذ می‌کند. در این لایه فلزی، امواج نوری با فرکانس‌ها

و طول موج‌های مختلف وجود دارند و هم‌چنین امواجی که از سطح فلز به عقب بازتاب می‌شوند. اگر این امواج با هم تداخل ویرانگر داشته باشند، دامنه نهایی موج کاهش یافته و انرژی کم‌تری به سمت بیرون منعکس می‌شود که منجر به کاهش انعکاس می‌گردد.

در ادامه محاسبات، با افزودن نانوحفره‌های هوا به لایه فلزی Al پاسخ نوری آن (انعکاس، عبور و جذب) بررسی می‌شود. به دلیل استفاده از تابع‌های دی‌الکتریک متمایز (حفره و Al) و الکترون‌های رسانش در سطح مشترک نانوحفره - لایه فلزی، این ساختار ویژگی‌های پلاسمونیک خاصی را مطابق شکل ۵ از خود نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، با وجود نانوحفره‌های دی‌الکتریک مدهای ضعیف در لایه فلزی Al به دلیل تأثیرپذیری از اثرات پلاسمونیک ایجاد شده در سطح مشترک فلز - دی‌الکتریک به طور قابل توجهی بهبود یافتند. تحت تقریب شبه الکترواستاتیک می‌توان بیان کرد، مد LSPR هنگامی روی می‌دهد که $\epsilon_m + 2\epsilon_d = 0$ باشد که در آن ϵ_m و ϵ_d به ترتیب ثابت‌های دی‌الکتریک لایه فلزی و محیط اطراف هستند. نتایج محاسبات نشان می‌دهد، دره اصلی طیف انعکاس و بالاترین میزان جذب در طول موج ۴۶۵ nm قرار دارد. در اولین مرتبه پراش درون صفحه نسبت به زیرلایه (n_{sub}) در دوره تناوب $p_x = p_y = 300$ nm، طول موج ناهنجاری‌های ریلی مطابق با روابط بیان شده نیز برابر با ۴۶۵ nm است. بنابراین، با طراحی این نانو ساختار، امکان تولید مدهای هیبریدی (پلاسمونیک - فوتونیک) SLR و بهبود میزان جذب نور ایجاد می‌شود. در این شرایط، مدهای پلاسمونی سطحی و مدهای پراش صفحه نانوارایه در این طول موج با یکدیگر تعامل داشته و امکان ایجاد مدهای هیبریدی شده جدیدی را فراهم می‌کنند.

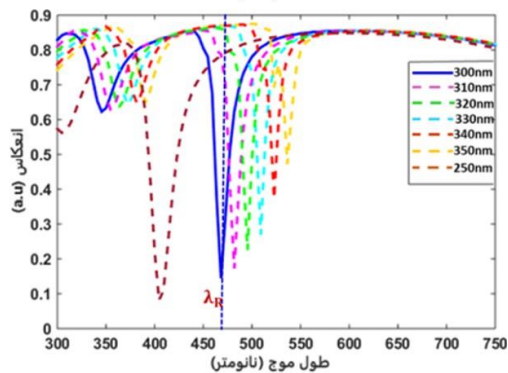


شکل ۵. طیف انعکاس (R)، عبور (T) و جذب ($1 - R - T$) در لایه فلزی Al با حضور نانوحفره‌های هوا

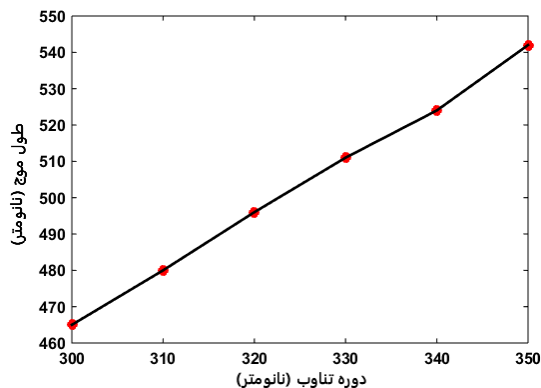
همان‌طور که بیان شد، طول موج تشدید LSP در نانو ساختارهای پلاسمونیک عمدتاً تحت تأثیر دوره تناوب نانوارایه، اندازه و ثابت دی‌الکتریک محیط اطراف است. جفت‌شدگی بین مدهای پلاسمونیک و فوتونیک نانوارایه می‌تواند شکل و موقعیت پیک تشدید را تغییر دهد. در اولین مرحله از محاسبات، تغییرات دوره تناوب نانوحفره‌های هوا را که پارامتر اساسی برای تقویت تشدیدهای الکترومغناطیسی در ناحیه طیفی است، مطالعه می‌شود. شکل ۶ - (الف)، تغییرات طیف انعکاس را در دوره تناوب مختلف از ۲۵۰ تا ۳۵۰ nm نشان می‌دهد. شکل ۶ - (ب) نیز طول موج‌های تشدید را در دوره‌های تناوب مختلف نشان می‌دهد که این دره‌های ایجاد شده، در نزدیکی مدهای پراش مربوط به زیرلایه دی‌الکتریک قرار دارند. همان‌طور که مشاهده می‌شود، با افزایش دوره تناوب، عمق دره طیف انعکاس کاهش یافته و به سمت طول موج‌های بلندتر تغییر پیدا می‌کند. در دوره تناوب‌های بالاتر از ۳۰۰ nm، دره‌های طیف انعکاس در جایگاه برابر با طول موج‌های پراش صفحه نانوارایه قرار دارند. در دوره تناوب ۲۵۰ nm،

دره انعکاس دارای عمق بیشتری است. اما با توجه به این‌که در این دوره تناوب، طول موج‌های پراش در طول موج‌های کم‌تر از مد $LSPR$ ($\lambda_R < \lambda_{LSPR}$)، قرار دارند، جفت‌شدگی‌های تابشی (دوقطبی) بین نانوحفره‌ها، به دلیل انرژی بالاتر مرتبه‌های پراش نسبت به تشدید پلاسمون، بسیار ضعیف می‌باشد. در ادامه محاسبات، تمرکز خود را بر روی دوره تناوب 300nm ، در شرایطی که λ_{LSPR} نانوحفره‌ها در طول موج‌هایی کم‌تر از طول موج‌های پراش ($\lambda_{LSPR} < \lambda_R$) قرار دارد و نور پراکنده شده در صفحه نانوأرایه منجر به تقویت مدهای پلاسمونی و کاهش اتلاف تابشی می‌شود، قرار می‌دهیم. از طرفی می‌توان بیان کرد، با کاهش فاصله بین نانوحفره‌ها، پلاسمون‌های دوقطبی در سطح مشترک فلز - دی‌الکتریک که نزدیک هم قرار دارند، به صورت هم‌فاز برهم‌کنش می‌کنند که این فرآیند باعث تقویت میدان نزدیک و بهبود جایگزیدگی نور و جذب در نانو ساختار می‌شود. علاوه بر این موارد باید بیان کرد، در طول موج‌های بلند مانند 750nm ، طول موج نور بسیار بزرگ‌تر از دوره تناوب ساختار نانوحفره‌ها می‌شود. در این حالت، لایه فلزی به عنوان یک محیط همگن‌تر دیده می‌شود و تأثیر دوره تناوب بر رفتار نوری ساختار کاهش می‌یابد. از طرفی، در این شرایط، پدیده تداخل و پراش که به دلیل وجود ساختارهای تناوبی ایجاد می‌شود، بسیار ضعیف شده و تأثیر قابل توجهی بر روی طیف انعکاس ندارد. علاوه بر این، با افزایش طول موج، عمق نفوذ نور به داخل فلز افزایش می‌یابد. در طول موج‌های بلند، نور به عمق بیشتری از فلز نفوذ می‌کند و در نتیجه، تأثیر سطح و ساختار نانوحفره‌ها بر پاسخ نوری نانو ساختار کاهش می‌یابد. در نتیجه در طول موج‌های بلند، نور حساسیت کم‌تری به جزئیات ریز نانو ساختار، از جمله دوره تناوب نشان می‌دهد. این نتایج نشانگر وابستگی موقعیت و شدت مدهای تشدید به دوره تناوب نانوحفره‌ها در لایه فلزی است.

(الف)

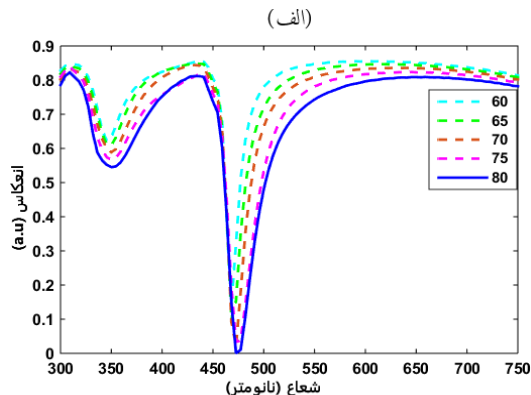


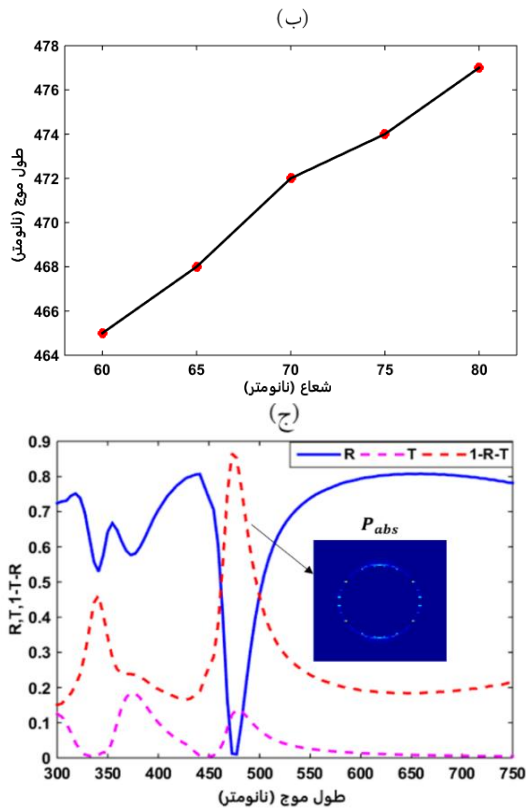
(ب)



شکل ۶. الف) طیف انعکاس و ب) طول موج‌های تشدید برحسب دوره تناوب مختلف نانوحفره‌های هوا

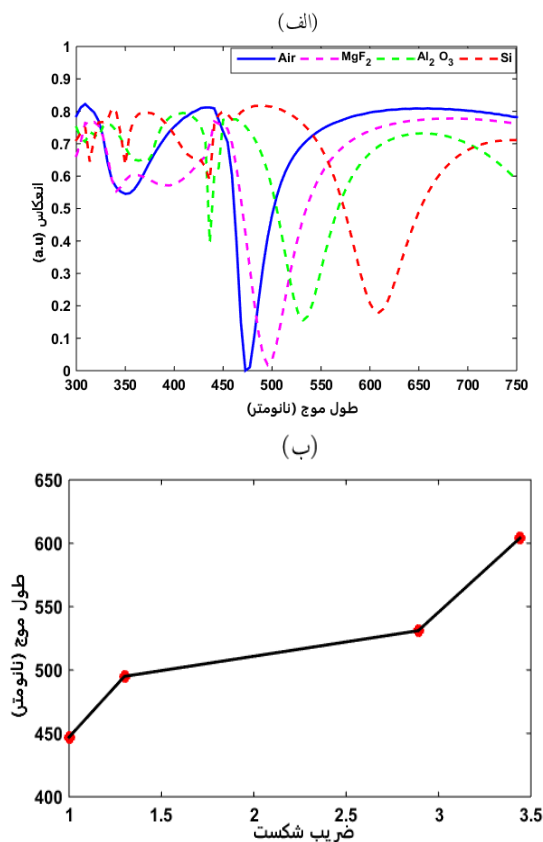
مطالعات پیشین نشان دادند که با افزایش اندازه نانوذرات، تشدیدهای دوقطبی درون صفحه اصلی آن‌ها تغییر می‌کند [۳۱]. بنابراین در ادامه محاسبات، تأثیر شعاع (r) نانوحفره‌های هوا را بر روی دره طیف انعکاس همراه با تغییر طول موج آن‌ها مورد بررسی قرار می‌دهیم. مطابق شکل ۷-الف) با افزایش شعاع نانوحفره‌ها، طول موج تشدید از ۴۶۵ nm به ۴۷۷ nm تغییر می‌نماید که به مراتب مقدار تغییر آن کم‌تر از جابه‌جایی طول موج تشدید در اثر تغییرات دوره تناوب است. با افزایش شعاع نانوحفره‌ها میزان انعکاس نور کاهش یافته و در شعاع ۸۰ nm به طیف انعکاس ضعیف شده دست می‌یابیم. در توضیح می‌توان بیان کرد، بدون حضور نانوحفره‌های هوا، لایه فلزی Al همانند یک آینه فلزی عمل می‌کند که دارای انعکاس بالایی است (شکل ۴). با قرارگیری نانوحفره‌های هوا، میزان انعکاس این لایه فلزی در نزدیکی مدهای پراش زیرلایه دی‌الکتریک کاهش می‌یابد. حضور نانوحفره‌ها دو قطبی‌هایی در سطح مشترک فلز - دی‌الکتریک (هوا) درون نانوآستوانه‌ها ایجاد می‌کند که میدان‌های جایگزیده را در نزدیکی سطح نانوذرات در واکنش با نور تقویت می‌کند. بنابراین، با توجه به مدهای LSPR و پراکندگی نور به جلو توسط این نانوذرات، آن‌ها را می‌توان به عنوان منبع نور ثانویه در نظر گرفت که مقدار فوتون و نور جذب‌شده را در لایه فلزی Al افزایش می‌دهند. همچنین، با افزایش شعاع نانوحفره‌های دی‌الکتریک تشدید پلاسمون یک نانوذره به‌طور طیفی با تشدید نانوذره دیگر هم‌پوشانی پیدا می‌کند. این جفت‌شدگی امکان ذخیره انرژی بیشتری را در نانو ساختار فراهم می‌کند. در این راستا، میدان‌های جایگزیده ناشی از برهم‌کنش کولنی بین بارهای سطحی دو ذره تقویت شده و در نهایت منجر به کاهش انعکاس و افزایش جذب نور می‌گردد [۳۲]. در این راستا، با هدف درک وابستگی طول موج‌های تشدید با اندازه نانوحفره‌ها، نمودار تغییرات طول موج را برحسب شعاع نانوحفره‌ها نیز نشان دادیم (شکل ۷-ب). رابطه تقریباً خطی بین شعاع نانوحفره‌ها و پیک طول موج در نمودار ارائه شده، مشاهده می‌شود. با افزایش شعاع نانوحفره، مطابق با روابط تئوری بیان شده، فرکانس تشدید به سمت فرکانس‌های پایین‌تر جابه‌جا می‌شود که باعث جابه‌جایی دره انعکاس به سمت طول موج‌های بلندتر می‌شود. البته باید بیان کرد، که به طور کلی این رابطه خطی نمی‌باشد و عوامل مختلفی مانند شکل نانوحفره‌ها، فاصله بین آن‌ها و ضخامت لایه فلزی می‌توانند بر این رابطه تأثیر بگذارند. توزیع میدان این طول موج در بخش‌های بعدی به تفصیل بیان خواهد شد. در ادامه محاسبات، طیف‌های انعکاس، عبور و جذب نور را در شعاع ۸۰ nm برای درک بیشتر رسم کردیم (شکل ۷-ج). مطابق شکل بیشینه طیف عبور با کمینه انعکاس و جذب مرتبط است. در کمینه طیف انعکاس، جذب نور به دلیل پلاسمون سطحی ایجاد شده در سطح مشترک فلز - دی‌الکتریک افزایش یافته که توزیع توان جذب شده در طول موج ۴۷۷ nm به صورت ضمیمه در نمودار نشان داده شده است.





شکل ۷. الف) طیف انعکاس و ب) تغییر طول موج‌های تشدید بر حسب شعاع مختلف نانوحفره‌های هوا، ج) طیف‌های طیف انعکاس (R)، عبور (T) و جذب (1 - R - T) در طول موج ۴۷۷ nm

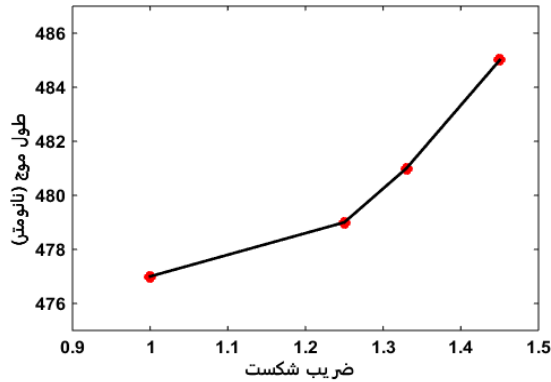
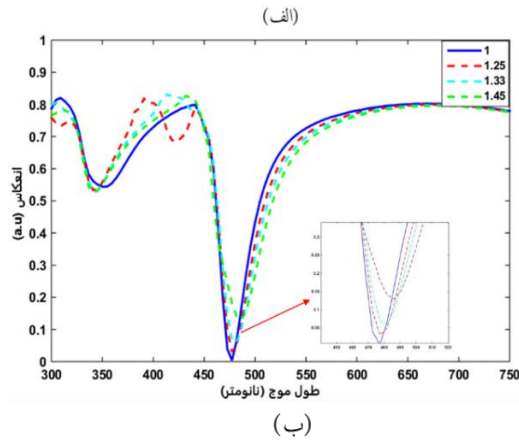
ضریب شکست یا جنس نانوحفره‌های دی‌الکتریک پارامتر مهم دیگری در تشدیدهای جفت‌شده با مدهای پراش صفحه آرایه در یک محیط نامتقارن می‌باشد. در این راستا، نانوحفره‌ها را با ضریب شکست‌های مختلف مورد بررسی قرار داده و وابستگی طول موج تشدید طیف انعکاس را به ضریب شکست مطالعه می‌کنیم. شکل ۸- الف) و ب)، طیف انعکاس و تغییرات طول موج تشدید را در شعاع بهینه نانوحفره ۸۰nm، با ضریب شکست‌های مختلف از جمله MgF_2 ($n=1/3$)، Al_2O_3 ($n=2/89$) و Si ($n=3/44$) نشان می‌دهد. مطابق شکل با افزایش ضریب شکست نانوحفره‌ها، پهنای باند طیفی گسترش یافته و به سمت طول موج‌های بالاتر منتقل می‌شود که افزایش مقدار طیف کمینه طیف انعکاس و کاهش جذب مؤثر نور را به همراه دارد. در توضیح این نتایج می‌توان بیان کرد، طبق تقریب شبه الکتروستاتیک با افزایش ضریب شکست نانوحفره‌ها، ثابت دی‌الکتریک آن‌ها نیز افزایش می‌یابد. این افزایش منجر به کاهش فرکانس‌های تشدید و تغییر به سمت طول موج‌های بالاتر می‌شود. با این تغییرات، دو قطبی‌های ایجاد شده در سطح مشترک فلز - دی‌الکتریک و میدان‌های الکتریکی جایگزیده تحت تأثیر قرار می‌گیرند و رفتار پلاسمون‌های شبکه و طول موج آن‌ها تغییر می‌کند. در نهایت، این تغییرات بر پهنای باند و شکل منحنی‌های طیفی نانو ساختار مطابق شکل تأثیر می‌گذارد.



شکل ۸. الف) طیف انعکاس، ب) تغییر طول موج‌های تشدید بر حسب ضریب شکست‌های مختلف نانوحفره‌های دی‌الکتریک

حساسیت مدهای پلاسمونی به تغییرات ضریب شکست محیط اطراف، آن‌ها را برای کاربرد حسگری مناسب می‌سازد. از اینرو، عملکرد نانوساختار فوق را در نور قطبیده S در محیط‌های مختلف مورد بررسی قرار می‌دهیم تا میزان حساسیت آنها را برای کاربرد در حسگرها محاسبه نماییم. در حسگرها، معمولاً از حساسیت ($S = \frac{\Delta\lambda}{\Delta n}$) برای ارزیابی عملکرد آن‌ها استفاده می‌شود. Δn تغییرات ضریب شکست و $\Delta\lambda$ تغییرات طول موج تشدید به دلیل تغییر ضریب شکست محیط می‌باشد [۳۲]. شکل ۹- الف) و ب) طیف انعکاس و تغییرات جایگاه طول موج‌های تشدید نانوساختار را در محیط‌هایی با ضرایب شکست مختلف شامل مایع شفاف ($n=1/25$)، آب ($n=1/33$) و PDMS ($n=1/45$) نشان می‌دهد. مطابق شکل، با افزایش ضریب شکست محیط از ۱ به $1/45$ ، دره‌های تشدید طول موج‌های بالاتر تغییر می‌یابند و طول موج تشدید از 477 nm به 486 nm تغییر می‌کند. این نتایج وابستگی قوی تشدیدهای پلاسمونی (مدهای پراش و LSP) به ضریب شکست محیط اطراف را نشان می‌دهند. حال با توجه به وابستگی محسوس این دره به تغییرات محیط اطراف می‌توان آن را به عنوان یک شاخص ناشی از جفت‌شدگی تشدید نانوساختار و محیط اطراف مورد توجه قرار داد. در این راستا، میزان حساسیت را در

محیط‌های مختلف مطابق با جدول ۱، محاسبه کردیم. براین اساس، نانو ساختار پیشنهادی ما از حساسیت مناسبی در این محدوده طول موجی نسبت به مطالعات قبلی برخوردار است [۲۴].



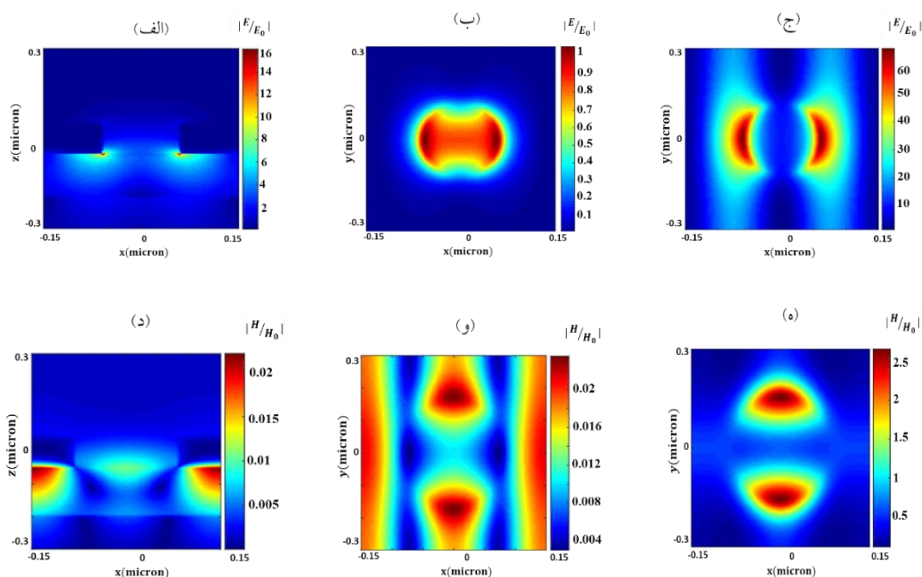
شکل ۹. الف) طیف انعکاس و ب) تغییر طول موج‌های تشدید بر حسب ضریب شکست محیط‌های مختلف دی‌الکتریک

جدول ۱. حساسیت نانو ساختار با ضریب شکست محیطی مختلف

حساسیت	تفاضل طول موج‌ها	طول موج (نانومتر)	ضریب شکست
-	-	۴۷۷	۱
۸	۲	۴۷۹	۱/۲۵
۱۲/۱۲	۴	۴۸۱	۱/۳۳
۲۰	۹	۴۸۶	۱/۴۵

از آن جایی که جذب نور با شدت میدان الکتریکی $|E|^2$ متناسب است (E توزیع شدت نور در اطراف نانوذرات را نشان می‌دهد)، میدان الکتریکی جایگزیده در اطراف نانوذرات جذب نور را در لایه فلزی Al افزایش می‌دهد. از

اینرو، محاسبه توزیع میدان نزدیک می‌تواند در درک بهتر منشأ مدهای پلاسمونی ایجاد شده و پاسخ نوری نانوساختار طراحی شده موثر باشد. شکل ۱۰ توزیع میدان‌های الکترومغناطیسی عبوری و منعکس شده را روی سطح‌های بالا و پایین نانوحفره‌ها با شعاع 80 nm در صفحه $x-y$ نشان می‌دهد. علاوه بر این توزیع میدان‌های الکترومغناطیسی را در صفحه $x-z$ رسم کردیم (شکل ۱۰- الف، ب). در شکل‌های ۱۰- (ج، د) و (و، ه) توزیع میدان را در روی سطح بالا و پایین نانوحفره‌ها نیز نشان دادیم. همان‌طور که مشاهده می‌شود، شدت میدان مغناطیسی از الکتریکی کمتر است و در سطح مشترک لایه فلز Al و زیرلایه دی‌الکتریک به صورت مدهای انتشاری SPP ظاهر می‌شود. میدان الکتریکی جایگزیده در گوشه‌های پایین نانوحفره‌های استوانه‌ای متمرکز است. به بیانی دیگر، مدهای LSPR نزدیک به مدهای پراش زیر لایه قرار می‌گیرند، که نشان دهنده توزیع متقارن میدان الکتریکی در سطح مشترک محیط فلز - دی‌الکتریک و انرژی در سمت زیرلایه دی‌الکتریک محدود می‌شود. به نظر می‌رسد، عدم تطابق ضریب شکست بین زیرلایه دی‌الکتریک و محیط نمی‌تواند مانعی جهت تشکیل مدهای تشدیدی شبکه باشد. به‌طور کلی، الگوی توزیع میدان را نیز می‌توان با یک برانگیختگی دوقطبی توصیف نمود. در این برانگیختگی، بارهای سطحی در سطح مشترک فلز - دی‌الکتریک توزیع شده، که این فرآیند منجر به ایجاد یک گشتاور دوقطبی خالص مؤثر می‌گردد. حال با جفت‌شدگی گشتاورهای دوقطبی درون صفحه، جذب نور فرودی افزایش می‌یابد.



شکل ۱۰. توزیع میدان الکترومغناطیسی در صفحه $x-z$ و $x-y$ در طول موج تشدید 477 nm

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، اثرات پلاسمونیک حاصل از تأثیر تابشی با قطبش s بر روی لایه فلزی Al شامل آرایه مربعی از نانوحفره‌های استوانه‌ای هوا که بر روی یک زیرلایه دی‌الکتریک شفاف قرار دارند، مورد مطالعه قرار گرفت. با طراحی این نانوساختار مدهای پلاسمونی SLR در طیف انعکاس کلی ضعیف شده در ناحیه مرئی ایجاد شد. میزان طیف عبور، انعکاس و جذب نور در لایه فلزی با و بدون نانوحفره‌های هوا محاسبه گردید. با حضور نانوحفره‌ها در

لایه فلزی میزان انعکاس نور کاهش یافت و جذب بالایی در مد هیبریدی ایجاد شده حاصل شد. سپس با تغییر دوره تناوب و شعاع نانوحفره‌ها، میزان طیف انعکاس ضعیف شده و تغییر جایگاه طول موج مدهای تشدیدی مورد بررسی قرار گرفت. با این تغییرات، اثرات تشدیدهای پلاسمونی سطحی و جفت‌شدگی بین لایه فلزی و زیرلایه دی‌الکتریک مشاهده شد. تغییرات ضریب شکست نانوحفره‌ها با مواد دی‌الکتریک با ضریب شکست بالاتر نیز مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج محاسبات، تغییر به سمت طول موج‌های بلندتر و پهن‌شدگی‌های طیفی را با افزایش ضریب شکست نشان دادند. علاوه بر این با تغییر ضریب شکست محیط اطراف، حساسیت مدهای ایجاد شده محاسبه گردید. با تغییر ضریب شکست محیط به $1/45$ در ناحیه مرئی مد پلاسمونی با حساسیت بالا $20\text{nm}/\text{RIU}$ ایجاد شد. هر یک از تغییرات اعمال شده بر نانوساختار نشان داد که این پارامترها چگونه بر رفتار کلی نانوساختار تأثیر می‌گذارند. انتظار می‌رود، نتایج این پژوهش بتواند به درک بهتر پدیده مدهای پلاسمونی هیبریدی و توسعه حسگرها با حساسیت مناسب کمک نماید.

References

- [1] Boroviks, S., Lin, Z.H., Zenin, V.A., Ziegler, M., Dellith, A., Gonçalves, P.A.D., Wolff, C., Bozhevolnyi, S.I., Huang, J.S. & Mortensen, N.A. (2022). Extremely confined gap plasmon modes: when nonlocality matters. *Nat. Commun.*, 13(1), 3105. <https://doi.org/10.1038/s41467-022-30737-2>
- [2] Bahrami, M., Sepahvand, N., & Moradpour, Z. (2022). Numerical study of short-circuit current density and absorption in the active layer of organic solar cells in the presence of cylindrical nanoparticles. *Karafan Quarterly Research Journal*, <https://doi.org/10.48301/kssa.2022.354897.2228>
- [3] Yang, K., Yao, X., Liu, B. & Ren, B. (2021). Metallic plasmonic array structures: principles, fabrications, properties, and applications. *Adv. Mater.*, 33(50), 2007988. <https://doi.org/10.1002/adma.202007988>
- [4] Cheng, Y. & Sun, M. (2021). Unified treatments for localized surface plasmon resonance and propagating surface plasmon polariton based on resonance modes in metal nanowire. *Opt., Commun.* 499, 127277. <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2021.127277>
- [5] Kasani, S., Curtin, K. & Wu, N. (2019). A review of 2D and 3D plasmonic nanostructure array patterns: fabrication, light management and sensing applications. *Nanophotonics*, 8(12), 2065-2089.
- [6] Sepahvand, N., Ghalambor Dezfuli, A. & Bahrami, M. (2024). Numerical Investigation of Surface Lattice Plasmonic Modes, Amplified in the Ultraviolet Spectral Regions, for Improved Ag@ Al Core-Shell Periodic Nanostructures. *Plasmonics*, 20(4), 1-12. <https://doi.org/10.1007/s11468-024-02385-3>
- [7] Guo, W., Xu, H., Yang, Z., Guo, S., Xie, W., Chee, K.W., Zeng, Y. & Ye, J., (2018). Performance enhancement of ultraviolet light emitting diode incorporating Al nanohole arrays. *Nanotechnol.*, 29(45), 45LT01. <https://doi.org/10.1088/1361-6528/aaddc8>

- [8] Correia-Ledo, D., Gibson, K. F., Dhawan, A., Couture, M., Vo-Dinh, T., Graham, D., & Masson, J. F. (2012). Assessing the location of surface plasmons over nanotriangle and nanohole arrays of different size and periodicity. *Phys. Chem. C*, 116(12), 6884-6892. <https://doi.org/10.1021/jp3009018>
- [9] Schwind, M., Kasemo, B., & Zoric, I. (2013). Localized and propagating plasmons in metal films with nanoholes. *Nano letters*, 13(4), 1743-1750. <https://doi.org/10.1021/nl400328x>
- [10] Song, J., Shi, Y., Liu, X., Li, M., Wang, X., & Yang, F. (2021). Enhanced broadband extraordinary terahertz transmission through plasmon coupling between metal hemisphere and hole arrays. *Optical Materials Express*, 11(8), 2700-2710. <https://doi.org/10.1364/OME.430500>
- [11] Cetin, A.E., Etezadi, D., Galarreta, B.C., Busson, M.P., Eksioglu, Y. & Altug, H. (2015). Plasmonic nanohole arrays on a robust hybrid substrate for highly sensitive label-free biosensing. *ACS photonics*, 2(8), 1167-1174. <https://doi.org/10.1021/acsphotonics.5b00242>
- [12] Yue, W., Wang, Z., Yang, Y., Li, J., Wu, Y., Chen, L., Ooi, B., Wang, X. & Zhang, X.X. (2014). Enhanced extraordinary optical transmission (EOT) through arrays of bridged nanohole pairs and their sensing applications. *Nanoscale*, 6(14), 7917-7923. <https://doi.org/10.1039/C4NR01001A>
- [13] Guo, R., Hakala, T.K. & Törmä, P. (2017). Geometry dependence of surface lattice resonances in plasmonic nanoparticle arrays. *Phys. Rev. B*, 95(15), 155423. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.155423>
- [14] Kravets, V.G., Kabashin, A.V., Barnes, W.L. & Grigorenko, A.N. (2018). Plasmonic surface lattice resonances: a review of properties and applications. *Chem. Rev.*, 118(12), 5912-5951. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.8b00243>
- [15] Hakala, T.K., Rekola, H.T., Väkeväinen, A.I., Martikainen, J.P., Nečada, M., Moilanen, A.J. & Törmä, P. (2017). Lasing in dark and bright modes of a finite-sized plasmonic lattice. *Nat. Commun.*, 8(1), 13687. <https://doi.org/10.1038/ncomms13687>
- [16] Chen, J., Zhang, H., Liu, G., Liu, J., Liu, Y., Tang, L. & Liu, Z., (2019). High-quality temperature sensor based on the plasmonic resonant absorber. *Plasmonics*, 14(2), 279-283. <https://doi.org/10.1007/s11468-018-0802-7>
- [17] Mehmandoust, S., Eskandari, V. & Karooby, E. (2024). A review of fabrication of DNA origami plasmonic structures for the development of surface-enhanced Raman scattering (SERS) platforms. *Plasmonics*, 19(3), 1131-1143. <https://doi.org/10.1007/s11468-023-02064-9>
- [18] Sepahvand, N., Bahrami, M., Moradpour, Z. & Dezfufi, A.G. (2023). Numerical Study of the Effect of Aluminum-Gold Nanorods on the Short-Circuit Current Density and the Absorption in Organic Solar Cells. *Plasmonics*, 18(4), pp.1337-1350. <https://doi.org/10.1007/s11468-023-01850-9>

- [19] Singh, G.P. & Sardana, N. (2022). Plasmonic response of metallic nanoparticles embedded in glass & a-Si. *Bull. Mater. Sci.*, 45(4), 241. <https://doi.org/10.1007/s12034-022-02812-3>
- [20] Yang, A., Hryn, A.J., Bourgeois, M.R., Lee, W.K., Hu, J., Schatz, G.C. & Odom, T.W. (2016). Programmable and reversible plasmon mode engineering. *PNAS*, 113(50), 14201-14206. <https://doi.org/10.1073/pnas.1615281113>
- [21] Ghaemi, H.F., Thio, T., Grupp, D.E.A., Ebbesen, T.W. & Lezec, H.J. (1998). Surface plasmons enhance optical transmission through subwavelength holes. *Phys. Rev. B*, 58(11), 6779. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.6779>
- [22] Murray-Méhot, M.P., Ratel, M. & Masson, J. F. (2010). Optical properties of Au, Ag, and bimetallic Au on Ag nanohole arrays. *Phys. Chem. C*, 114(18), 8268-8275. <https://doi.org/10.1021/jp101231c>
- [23] Liao, J.W., Huang, Z.T., Wu, C.H., Gagrani, N., Tan, H.H., Jagadish, C., Chen, K.P. & Lu, T. C. (2023). Highly localized surface plasmon nanolasers via strong coupling. *Nano Lett.* 23(10), 4359-4366. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.3c00614>
- [24] Lospinoso, D., Colombelli, A., Rella, R. & Manera, M.G. (2024). Rational Design and Optimization of Plasmonic Nanohole Arrays for Sensing Applications. *Chemosensors*, 12(8), 157. <https://doi.org/10.3390/chemosensors12080157>
- [25] Palik, E.D. ed. (1998). *Handbook of optical constants of solids* (Vol. 3): Academic press.
- [26] Collin, S. (2014). Nanostructure arrays in free-space: optical properties and applications. *Rep. Prog. Phys.* 77(12), 126402. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/77/12/126402>
- [27] Pescaglino, A. & Iacopino, D. (2015). Metal nanoparticle–semiconductor nanowire hybrid nanostructures for plasmon-enhanced optoelectronics and sensing. *Mater. Chem. C*, 3(45), 11785-11800. <https://doi.org/10.1039/C5TC01820J>
- [28] Günaydin, B.N., Gülmez, M., Torabfam, M., Pehlivan, Z.S., Tütüncüoğlu, A., Kayalan, C.I., Saatçioğlu, E., Bayazit, M.K., Yüce, M. & Kurt, H. (2023). Plasmonic titanium nitride nanohole arrays for refractometric sensing. *ACS Appl. Nano Mater.* 6(22), 20612-20622. <https://doi.org/10.1021/acsnm.3c03050>
- [29] Kravets, V.G., Schedin, F. & Grigorenko, A. N. (2008). Extremely narrow plasmon resonances based on diffraction coupling of localized plasmons in arrays of metallic nanoparticles. *PRL*, 101(8), 087403. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.087403>
- [30] Taflove, A., Hagness, S.C. & Picket-May, M. (2005). Computational electromagnetics: the finite-difference time-domain method. *Electric Eng Handbook*, 3(629-670), 15.
- [31] Muravitskaya, A., Gokarna, A., Movsesyan, A., Kostcheev, S., Rummyantseva, A., Couteau, C., Lerondel, G., Baudrion, A. L., Gaponenko, S. & Adam, P. M. (2020).

Refractive index mediated plasmon hybridization in an array of aluminium nanoparticles. *Nanoscale*, 12(11), 6394-6402. <https://doi.org/10.1039/C9NR09393A>

- [32] Shokova, M.A. & Bochenkov, V.E. (2023). Impact of Optical Cavity on Refractive Index Sensitivity of Gold Nanohole Arrays. *Biosensors*, 13(12), 1038. <https://doi.org/10.3390/bios13121038>