

بررسی طیف خاموشی لایه‌های نازک THTS منگنز و مقایسه آن با نتایج شبیه‌سازی شده تقریب دوقطبی منفصل

مهسا فخرپور

گروه علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی واحد میبد، میبد

پست الکترونیکی: mahsa.fakharpour@maybodiu.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۶/۰۱/۲۶؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۷/۰۷/۱۴)

چکیده

در این مقاله طیف خاموشی نانوساختار برج‌های مارپیچ کج و پله‌مانند لایه‌های نازک منگنز با استفاده از شبیه‌سازی تقریب دوقطبی منفصل (DDA) برای دوقطبش نور فرودی s و p در دو زاویه تابش 10° و 60° برای زوایای سمتی مختلف برای سه نمونه با شیب مختلف به دست آورده شده است. سپس نتایج به دست آمده با نتایج تجربی مقایسه می‌شود. قله‌های پلاسمونی ایجاد شده در هر دو حالت تجربی و نظری حوالی 600 nm است، که در نتایج تجربی تغییراتی در طیف‌ها در بعضی زوایای سمتی مشاهده می‌شود که آنها را ناهنجاری‌هایی طیفی می‌نامیم. این ناهنجاری‌ها به دلیل تغییر شیب ساختار و افزایش اثر سایه‌افکنی در ساختار است که این نیز باعث افزایش تخلخل سطحی و ایجاد نقص در ساختار می‌شود. در حالی که در نتایج شبیه‌سازی شده به دلیل صرف‌نظر از کردن از تخلخل و نقص‌ها در ساختار این ناهنجاری‌ها در طیف‌ها مشاهده نمی‌شود و این مهم‌ترین اختلاف در طیف‌های به دست آمده از هر دو نتایج تجربی و نظری است.

واژه‌های کلیدی: نانوساختار، برج‌های مارپیچ کج و پله‌مانند، تقریب دوقطبی منفصل، طیف خاموشی

۱. مقدمه

[۱ و ۲]، که می‌تواند ویژگی‌های اپتیکی ذرات کروی را به دست آورد. اما به طور واضح می‌توان گفت که بسیاری از ذرات در محیط، غیرکروی هستند و خواص اپتیکی غیرهمسانگرد دارند. بنابراین، نمی‌توان از نظریه مای استفاده کرد و در نتیجه نتایج پیچیده‌ای به دست می‌آید.

در سال ۱۹۷۳ روشی به نام تقریب دوقطبی‌های منفصل^۲

محاسبه نظری سطح مقطع‌های پراکندگی، جذب و خاموشی برای ذرات جامد بسیار محدود است. برای ذرات کروی همگن و همسانگرد در صورتی که ذرات کروی در مقایسه با طول موج چندان بزرگ نباشند، نظریه‌ای به نام نظریه مای^۱ ارائه شد

۲. Discrete dipole approximation

۱. Mie

مستطیلی و پنج ضلعی منگنز بدون استفاده از جسم سایه افکن و با روش لایه‌نشانی زاویه مایل تهیه و طیف خاموشی آنها بررسی کردند [۸]. از آنجا که محققان زیادی روی ساختارهای متخلخل و کامپوزیت منگنز و خواص آنها مطالعاتی انجام داده‌اند [۹ و ۱۰] تصمیم بر آن شد که در این پژوهش بر روی خواص اپتیکی لایه نازک سه‌بعدی منگنز تهیه شده به روش لایه‌نشانی خراشی که یک ساختار متخلخل است تحقیق شود. علاوه بر آن از تابش مایل بر نمونه و چرخش نگه دارنده زیرلایه و جسم سایه‌افکن استفاده شده است، که جسم سایه‌افکن در مرکز نگه دارنده زیرلایه‌ها ثابت شده تا لایه‌های نازک نانومجمعه‌سازی شده مارپیچی منگنز با سطح مقطع مربعی ساخته شود. مارپیچ‌هایی که در نزدیک جسم سایه‌افکن هستند مایل‌تر و مارپیچ‌های دورتر، به خط عمود نزدیک‌تر هستند. ضمناً سطح مقطع (طول ضلع) در هر پیچ مارپیچ نسبت به پیچ قبلی نیز کاهش یافته و ساختارهای پله‌مانند ساخته شد. بنابراین، لایه‌های نازک منگنز با ساختار برج‌های مارپیچ کج و پله‌مانند^۹ با نام اختصاری THST در این پژوهش نامگذاری شده است. مشخصات این نانوساختار را می‌توان با میکروسکوپ روبشی الکترون (SEM)، میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) و نتایج اپتیکی به دست آورد. برای مطالعه بیشتر رفتار اپتیکی لایه‌های نازک نانوساختار THST از دو قطبش نور فرودی s و p در زوایای تابش و سمتی مختلف برای تمام نمونه‌ها که در فواصل مختلف از جسم سایه‌افکن قرار دارند استفاده شده است تا بتوان قله‌های پلاسمونی ایجاد شده برای نانوساختار THST را بررسی و با نتایج شبیه‌سازی شده تقریب دوقطبی منفصل مقایسه کرد.

۲. مدل‌سازی

۲.۱. روش محاسبات

برای انجام محاسبات در تقریب دوقطبی منفصل هندسه ساختار نمونه را با N دوقطبی محدود می‌کنیم، که $z = 0, 1, \dots, N$ جایگاه‌های اشغال شده به وسیله دوقطبی‌ها است. هر دوقطبی z

(DDA) توسط پنی‌پکر^۱ و پورسل^۲ [۳] پیشنهاد و توسط درین^۳ و فلاتو^۴ [۴] فرمول‌بندی شد. در این روش نمونه را به صورت N دوقطبی نقطه‌ای که فاصله بین دوقطبی‌ها نسبت به طول موج بسیار کوچک باشد در نظر می‌گیریم. هر دوقطبی دارای قطبش نوسانی است که ناشی از موج تخت تابشی و میدان‌های الکتریکی ناشی از دوقطبی‌های دیگر است و بدون پرداختن به حل صریح معادلات پیچیده ماکسول می‌توان جذب و پراکندگی را براساس معادلات الکترودینامیک کلاسیک به دست آورد. ابتدا از معادله سلسیوس-موساتی آغاز کرده و با توجه به اندرکنش‌های میدان الکتریکی تابشی و دوقطبی‌های دیگر، میدان الکتریکی محلی و قطبش را به دست می‌آوریم. سپس می‌توان جذب، پراکندگی و خاموشی را محاسبه کرد. همچنین با محاسبه میدان الکتریکی در هر نقطه، میدان الکتریکی افزایشی^۵ برای هر صفحه عبوری از نمونه یا نانوساختار در طول موجی که قله پلاسمونی ایجاد شده، می‌توان پربندهای توزیع میدان الکتریکی نزدیک^۶ آن را رسم کرد.

نانوساختارهایی که در این پژوهش مورد بررسی قرار می‌گیرند نانوساختارهای مارپیچی با میل متغیر هستند. این نانوساختارها با استفاده از لایه‌نشانی خراشی^۷ (GLAD) با یک جسم خارجی سایه‌افکن که در مرکز نگه دارنده زیرلایه‌ها قرار می‌گیرد تهیه می‌شوند. کرواس و برت با استفاده از همین روش نانوساختارهای مجسمه‌ای مارپیچی مایل TiO_2 که پارامترهای ساختاریشان با فاصله از لبه جسم سایه‌افکن تغییر می‌کند ساختند [۵]. این نوع از نانوساختارها، لایه‌های نازک نانومجمعه‌ای مارپیچی با میل متغیر^۸ معروف هستند [۵]. سوالونی و همکارانش نیز نانوساختارهای مارپیچی با میل متغیر زیگزاگی لایه نازک نقره با این روش تهیه کردند [۶] و [۷]. همچنین آنها لایه‌های نازک نانومجمعه‌ای مارپیچی

۱. Pennypacker

۲. Purcel

۳. Drain

۴. Flatau

۵. E-filed enhancement

۶. Electric Near-Field Distribution contours

۷. Glancing Angle Deposition

۸. Graded chiral nano – sculptured thin film

۹. Tilt Helical and Stair-like Towers

$$-A_{jk}P_k = \frac{\exp(ikr_{jk})}{r_{jk}^2} \left\{ k^2 r_{jk} \times (r_{jk} \times P_k) + \frac{(1-ikr_{jk})}{r_{jk}^2} \times (r_{jk}^2 P_k - r_{jk} (P_k \cdot r_{jk})) \right\}, \quad (7)$$

که در آن $k \neq j$ و $r_{jk} = r_j - r_k$ است. با تعریف $A_{jj} = \alpha_j^{-1}$ می‌توان مسئله را به صورت N معادله با بردار مختلط خطی غیرهمگن بازنویسی کرد. بنابراین، مسئله به یک معادله ماتریسی کاهش می‌یابد.

$$\begin{pmatrix} (\alpha)^{-1} & \dots & (A_{1,N})_{1,N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (A_{N,1})_{1,1} & \dots & (\alpha)^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_1 \\ P_1 \\ \vdots \\ P_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{1,1} \\ E_{r,1} \\ \vdots \\ E_{N,1} \end{pmatrix}, \quad (8)$$

عناصر ماتریس ستونی P مجهول هستند که باید آنها را به دست آوریم. حل مسئله پراکنده با $3N$ معادله خطی همزمان برای N ‌های بزرگ مدت زمان زیادی طول می‌کشد.

از قطبش P_j و با استفاده از نظریه اپتیکی، سطح مقطع خاموشی به دست می‌آید:

$$C_{\text{ext}} = \frac{4\pi k}{|E_{\text{inc}}|^2} \sum_{j=1}^N \text{Im}(E_{\text{inc},j}^* \cdot P_j), \quad (9)$$

برای کاهش خطا و دقت بیشتر در محاسبات باید تعداد N را افزایش داد. اما، حد اعتباری وجود دارد که باید $N > \left(\frac{4\pi}{3}\right) |n|^3 (ka_{\text{eq}})^3$ باشد (n ضریب شکست ماده است).

۲.۲. پربندهای میدان الکتريکی

در طول موج تابشی مشخصی، تشدید پلاسمون سطحی میدان الکتريکی افزایش یافته نزدیک سطح رخ می‌دهد که یک سازوکار اصلی برای طیف رامان افزایش یافته سطحی است. پدیده پلاسمون‌های سطحی به توزیع میدان الکتريکی افزایش یافته بستگی دارد. معمولاً بیشینه میدان در سطح یا نوک‌ها اتفاق می‌افتد. تشدید پلاسمون سطحی جایگزیده به شدت به نوع ساختار، محیط، قطبش نور تابشی و هندسه ساختار فلزی بستگی دارد. برای نشان دادن نوسانات پلاسمونی در اطراف و داخل ساختار از پربندهای توزیع میدان الکتريکی نزدیک استفاده می‌شود.

دارای یک تانسور قطبش پذیری α_j است و قطبش لحظه‌ای دوقطبی j با:

$$P_j = \alpha_j E_{\text{ext},j} \quad (1)$$

داده می‌شود. $E_{\text{ext},j}$ میدان الکتريکی لحظه‌ای در مکان j است که ناشی از میدان الکتريکی خارجی و میدان الکتريکی $N-1$ دوقطبی دیگر در حال نوسان است.

طبق رابطه سلسیوس-موساتی وقتی کره دی‌الکتريکی در یک میدان الکتريکی یکنواخت قرار گیرد، کره قطبیده می‌شود که می‌توان آن را به صورت مجموعه‌ای از دوقطبی‌ها در نظر گرفت. با محاسبه قطبش حاصل از میدان‌های خارجی P ، قطبش پذیری برابر است با:

$$\alpha^0 = \frac{3}{4\pi} \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} d^3, \quad (2)$$

که در آن d شعاع کره و ϵ نسبت ثابت دی‌الکتريک ماده به ثابت دی‌الکتريک خلأ است. این رابطه برای بسامدهای در حد صفر دقیق است [۱۱-۱۳]. حال در یک حجم مشخص V تعداد زیادی از این دوقطبی‌ها را در نظر می‌گیریم:

$$a_{\text{eq}} = \left(\frac{3N}{4\pi n}\right)^{\frac{1}{3}} \quad \text{و} \quad d = \left(\frac{V}{N}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (3)$$

که در آن a_{eq} شعاع معادل برای نمونه‌ای است که دارای N دوقطبی است و برای بسامدهای در حد صفر $ka_{\text{eq}} \rightarrow 0$ و $n = \frac{N}{V}$ چگالی تعداد دوقطبی‌هاست.

میدان الکتريکی خارجی در محل دوقطبی j :

$$E_{\text{inc},j} = E_0 \exp(ik \cdot r_j - i\omega t), \quad (4)$$

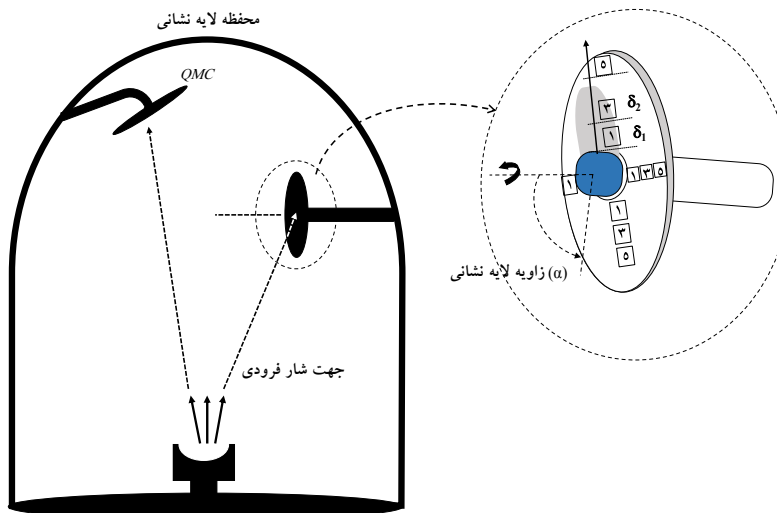
و میدان الکتريکی که هر دوقطبی در اثر برهم‌کنش میدان‌های الکتريکی دوقطبی‌های دیگر خواهد داشت به صورت [۱۱]:

$$E_{\text{rad},j} = \frac{2}{3} ik^3 P_j, \quad (5)$$

است. حال می‌خواهیم قطبش دوقطبی‌های لحظه‌ای را به دست آوریم:

$$P_j = \alpha_j E_{\text{ext},j} = \alpha_j (E_{\text{inc},j} - \sum_{k \neq j} A_{jk} P_k), \quad (6)$$

$-A_{jk} P_k$ سهم میدان الکتريکی در مکان j به دلیل دوقطبی است که در مکان k قرار دارد و ضرایب A ثابت‌هایی هستند که مربوط به برهم‌کنش دوقطبی‌هاست:



شکل ۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) لایه‌نشانی خراشی با یک جسم سایه‌افکن در مرکز صفحه نگه دارنده زیرلایه‌ها. زیرلایه‌های ۱، ۳ و ۵ به ترتیب در فاصله‌های ۱، ۳ و ۵ سانتی‌متری از جسم سایه‌افکن روی آن ثابت شده‌اند. ناحیه δ_6 ناحیه‌ای که سایه کم یا بدون سایه است و ناحیه δ_1 ناحیه‌ای که سایه ایجاد می‌شود.

ساختار، دوقطبی‌ها و چند قطبی‌های ایجاد شده در اطراف ساختار را شناسایی و نقاطی که در آنجا جفت‌شدگی‌های قوی و ضعیف اتفاق افتاده است را مشخص کرد.

۳. روش آزمایش

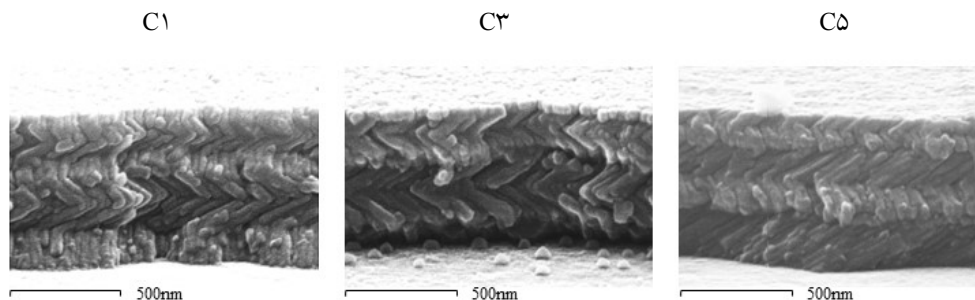
پیش از لایه‌نشانی تمام زیرلایه‌های شیشه به صورت فراصوتی ابتدا در استن گرم و سپس در اتانول در دستگاه اولتراسونیک به مدت مورد نیاز تمیزکاری شدند. لایه‌های نازک نانومجمعه‌سازی شده ماریچی با سطح مقطع مربعی روی زیرلایه شیشه (لام میکروسکوپی) (به ابعاد $18 \text{ mm} \times 18 \text{ mm}$) به وسیله باریکه الکترونی در دستگاه ادوارد (Edward E19A3) با فشار پایه $2 \times 10^{-7} \text{ torr}$ و آهنگ لایه‌نشانی 1 \AA s^{-1} در دمای اتاق لایه نشانی شدند. ماده لایه‌نشانی منگنز دارای خلوص ۹۹.۹۹٪ است. زاویه لایه‌نشانی ثابت و برابر $\alpha = 80^\circ$ است که برای تشکیل هر بازوی مربع، زیرلایه را به اندازه 90° درجه به طور پاد ساعتگرد باید چرخاند. طوری که اضلاع مربع ماریچی دوم ساخته شده کوچک‌تر از اضلاع مربع اول است. بدین ترتیب نانوساختارهای ماریچی مربعی THST تهیه می‌شود. شکل ۱ الگوی دستگاه تبخیر با امکان چرخش زیرلایه

با محاسبه قطبش P از رابطه (۸) می‌توان میدان الکتریکی در هر نقطه طبق رابطه زیر به دست آورد [۱۱]:

$$\vec{E}_j = \vec{E}_0 \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_j) + \sum_{k \neq j} \left[\frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_{jk})}{r_{jk}^3} \times k^2 (\vec{r}_{jk} \times \vec{P}_k) \times \vec{r}_{jk} + \frac{(1 - ikr_{jk})}{r_{jk}^3} \left(\vec{r}_{jk} \cdot \vec{P}_k \right) \right], \quad (10)$$

میدان الکتریکی افزایشی $\gamma = \log \left(\frac{|E|}{|E_0|} \right)$ برای هر صفحه عبوری از نمونه یا نانوساختار در طول موجی که قله پلاسmoni ایجاد شده است به دست آورده و سپس پرنده آن را رسم می‌کنیم. $|E_0|$ دامنه میدان تابشی و $|E|$ دامنه میدان الکتریکی محلی در اطراف نانوساختار است که به وسیله تقریب دوقطبی منفصل محاسبه می‌شود. با رسم پرنده، تصویری به دست می‌آید که شامل نواحی رنگی در قسمت‌های مختلف ساختار است. همراه با پرنده، نوار رنگی نشان داده می‌شود که این نوار مشخص کننده شدت است. همچنین از روی پرنده‌ها می‌توان نقاط داغ^۱

۱. Hot spot



شکل ۲. تصاویر FESEM لایه‌های نازک نانوساختار منگنز THST در فواصل مختلف از لبه جسم سایه‌افکن.

جدول ۱. زاویه شیب ستون‌های ماریپیچی و ضخامت لایه نازک نانوساختارهای منگنز THST در فواصل مختلف از لبه جسم سایه‌افکن.

نمونه	فاصله از جسم سایه‌افکن (mm)	ضخامت لایه (nm)	زاویه میل ستون ماریپیچی (α_t)
C1	۱۰	۴۱۷,۴	۱۲
C3	۳۰	۴۴۱,۰	۵
C5	۵۰	۵۲۵,۰	۳

10° و 60° به دست آمد.

۴. نتایج و بحث

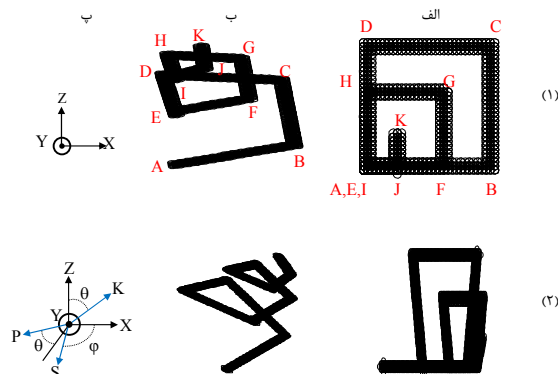
۴.۱. نتایج حاصل از تصاویر میکروسکوپ الکترون

رویشی لایه‌های نازک منگنز THST

شکل ۲ تصاویر FESEM از سطح مقطع لایه‌های نازک منگنز THST با شیب‌های مختلف در فواصل ۱، ۳ و ۵ cm از لبه جسم سایه‌افکن را نشان می‌دهد. در این تصاویر مشاهده می‌کنیم که قسمت انتهایی نانوستون‌های رشد یافته در ساختار ماریپیچی، چگال‌تر و به هم فشرده‌تر هستند [۱۴ و ۱۵]. همچنین می‌توان بازوهای رشد یافته در هر پیچ مربعی، شیب ساختار و زاویه رشد ستون‌ها را به خوبی مشاهده کرد. همان‌طور که در بخش قبل توضیح داده شد طول بازوها در هر پیچ ماریپیچی متفاوت است، طوری که در پیچ اول که در قسمت پایینی ساختار قرار دارد طول بازوها ۱۱۰ nm و در پیچ بعدی طول بازوها ۷۲ nm در نظر گرفته شده است. بنابراین، طول بازوها در طول لایه‌نشانی از انتهای ساختار به سمت سطح در هر پیچ کاهش می‌یابد. زاویه شیب نانوستون‌های ماریپیچی به دست آمده از تصاویر FESEM برای لایه‌های نازک منگنز THST در فواصل مختلف ۱، ۳ و ۵ cm از

برای رشد لایه نازک نانومجمعه‌سازی شده ماریپیچی را نشان می‌دهد. طبق شکل ۱ صفحه‌ای که زیرلایه‌ها روی آنها قرار دارند یک صفحه دایره‌ای از جنس فولاد ضد زنگ با قطر ۱۴ سانتی‌متر است که در مرکز این صفحه یک استوانه به قطر ۲ سانتی‌متر و ارتفاع ۲ سانتی‌متر به عنوان جسم سایه‌افکن ثابت شده است. زیرلایه‌ها در فاصله‌های ۱، ۳ و ۵ سانتی‌متری از لبه جسم سایه‌افکن در راستای شعاع صفحه دایره‌ای در چهار جهت عمود برهم قرار گرفته‌اند و آنها را به ترتیب C5، C3 و C1 نامگذاری می‌کنیم.

آهنگ لایه‌نشانی به وسیله بازرس کنترل‌کننده آهنگ لایه‌نشانی بلور کوارتز اندازه‌گیری می‌شود (SQM-۱۶۰-USA, Sigma) که نزدیک نگه‌دارنده زیرلایه و در همان زاویه سمتی زیرلایه قرار گرفته است. همچنین می‌توان ضخامت لایه نازک به دست آمده را با SEM اندازه‌گیری کرد و صحت آنرا تأیید کرد. ضخامت لایه نازک، شکل‌ها و اندازه ستونی آنها و همچنین زاویه میل ستون‌ها با تصاویر FESEM (Japan, Hitachi S-۴۱۰۰) آنالیز شدند. با استفاده از اسپکتروسکوپی تک باریکه‌ای (Aquila nkd-۸۰۰۰) طیف‌های بازتاب و عبور در گستره طیفی (۱۰۵۰-۳۵۰ nm) برای هر دو قطبش s و p با گام‌های طول موج ۵ nm و در زوایای فرود



شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) الگوی شبیه‌سازی شده از هندسه نانوستون ساختار برج‌های مارپیچی پله‌مانند ردیف ۱) با زاویه شیب صفر درجه ردیف ۲) با زاویه شیب α_1 الف) دید از بالا ب) دید از پهلو پ) جهت‌گیری‌های ساختار و میدان الکتریکی قطبش s و p

موج ۳۰۰ تا ۱۰۰۰ نانومتر که طبق نتایج تجربی حاصل شده‌اند، استفاده شده است. از آنجا که زاویه لایه‌نشانی $\alpha=80^\circ$ در نظر گرفته شده است و طبق رابطه تیت برای زوایای بزرگ‌تر از 60° زاویه رشد بازوها با سطح لایه از رابطه

$$\chi = 90 - \beta = 90 - \left[\alpha - \sin^{-1} \left(\frac{1 - \cos \alpha}{2} \right) \right]$$

می‌آید بنابراین، $\chi=34^\circ$ است. سطح مقطع خاموشی C_{ext} طبق رابطه (۹) برای توضیح نتایج اپتیکی ساختار استفاده می‌شود. شکل هندسی را به صورت مارپیچ با سطح مقطع مربعی در نظر می‌گیریم. طول بازوها در اولین پیچ L_1 و با افزایش ارتفاع در پیچ دوم طول بازوها $L_2 = \frac{L_1}{1/5}$ در نظر گرفته شده است. در این پژوهش طول بازوها را طبق آنچه در لایه‌نشانی انجام شده است به ترتیب ۷۲ و ۱۱۰ nm انتخاب شده است. علاوه بر آن طبق نتایج تجربی، در فواصل مختلف از لبه جسم سایه‌افکن ساختار مارپیچی نسبت به محور عبوری از مارپیچ مایل شده‌اند، بنابراین، مارپیچ‌ها را نسبت به محور عبوری از مارپیچ طبق زاویه شیب به دست آمده در تصاویر FESM مایل می‌کنیم. حال تأثیر نور فرودی تحت دو زاویه تابش 10° و 60° با جهات سمتی مختلف $0^\circ, 45^\circ, 90^\circ$ می‌آید بررسی می‌کنیم. به طوری که در قطبش s تحت دو زاویه تابش 10° و 60° میدان الکتریکی روی سطح مقطع مارپیچ مربعی عمودی (زاویه شیب صفر) است (شکل ۴).

لبه جسم سایه‌افکن در جدول ۱ آورده شده است. جسم سایه‌افکن ماکروسکوپی باعث تغییر در رشد نانوساختار مارپیچی می‌شود. با افزایش فاصله از لبه جسم سایه‌افکن می‌توان مشاهده کرد که زاویه شیب نانوستون‌های مارپیچی (α_1) کاهش و ضخامت ساختارهای مارپیچی افزایش می‌یابد. جزئیات مربوط به اثر جسم سایه‌افکن روی فرایند لایه‌نشانی در مقاله‌های [۶ و ۱۶] آمده است.

با دور شدن از جسم سایه‌افکن ضخامت لایه افزایش می‌یابد. طبق شکل ۱ نمونه‌هایی که دور از جسم سایه‌افکن و در ناحیه‌ای که سایه ایجاد نشده یا سایه کمی وجود دارد، قرار گیرند (ناحیه ۵۲) ساختار مارپیچی عمودی ساخته می‌شود. در داخل ناحیه سایه (ناحیه ۵۱) شار نمی‌تواند از تمام جهات به طور مساوی بتابد و ساختار مارپیچی مایل ساخته می‌شود. از طرفی ستون‌های مارپیچی به طرفی که شار تابشی بیشینه است کج می‌شوند، پس کمترین شیب نسبت به خط عمود بر زیرلایه، برای زیرلایه‌های قرار گرفته در فاصله ۵ cm از لبه جسم سایه‌افکن و بیشترین شیب مربوط به نمونه‌هایی است که در فاصله ۱ cm از لبه جسم سایه‌افکن قرار دارند، است.

۲.۴. نتایج شبیه‌سازی شده مربوط به نانوساختارهای منگنز THST با استفاده از روش تقریب دوقطبی منفصل به منظور بررسی خواص اپتیکی لایه‌های نازک منگنز THST از ثابت‌های دی‌الکتریک منگنز از کتاب پالیک [۱۷] در ناحیه طول

نکته مهم که در مورد شبیه‌سازی تقریب دوقطبی منفصل مطرح است، تک‌ستون بودن ساختار مارپیچی است که از اثر ستون‌های مجاور صرف‌نظر شده است و طبق رابطه (۷) برهم‌کنش دوقطبی‌ها با فاصله افت می‌کند. این تک‌ستون‌های مارپیچی از تعداد مشخصی بازو با طول معین در جهت گیری‌های 90° نسبت به یکدیگر به دست آمده است. در حالی که طیف‌های تجربی از برهم‌نهی طیف‌های تک‌تک‌ستون‌ها با شعاع‌ها و طول‌های مختلف به دست می‌آید طوری که تمام ستون‌ها و جهت‌گیری‌های آنها کاملاً با یکدیگر یکسان نیستند، همچنین درهم‌رفتگی مارپیچ‌ها و تأثیر مارپیچ‌های مجاور وجود دارد. بنابراین، اختلافاتی در طیف‌های تجربی و شبیه‌سازی شده مشاهده می‌شود. نتایج محاسبات شبیه‌سازی شده دوقطبی منفصل در شکل‌های ۵ و ۶ آورده شده است. شکل ۵ طیف خاموشی مربوط به نانوساختار THST در فاصله ۵ cm از لبه جسم سایه‌افکن برای نور تابشی 10° با قطبش p در زوایای سمتی مختلف را نشان می‌دهد. شکل طیف خاموشی و محل قله‌ها برای زوایای سمتی مختلف تغییر چندانی نمی‌کند و این به دلیل تقارن نانوساختار THST است. برای نمونه‌های قرار گرفته در فواصل نزدیک از لبه جسم سایه‌افکن (۳ cm و ۱) نیز به دلیل شیب کم ستون‌ها تقارن ساختار چندان تغییری نمی‌کند. بنابراین، شکل طیف‌ها و محل قله‌ها تغییر قابل ملاحظه‌ای ندارد. به همین علت محاسبات برای تمام نمونه‌ها در فواصل مختلف از لبه جسم سایه‌افکن برای یک زاویه سمتی مشخص ($\varphi=0^\circ$) انجام شده است.

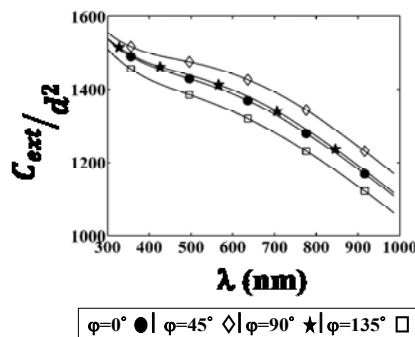
شکل ۶، نتایج شبیه‌سازی شده تقریب دوقطبی منفصل مربوط به نانوساختار THST در فواصل مختلف از لبه جسم سایه‌افکن برای زاویه سمتی $\varphi=0^\circ$ را نشان می‌دهد. دو زاویه تابش 10° و 60° برای نور فرودی با قطبش‌های s و p طبق نتایج تجربی انتخاب شده است. از طرفی دیگر ساختار THST شبیه‌سازی شده از تعدادی بازو با طول‌های مختلف تشکیل شده است که این بازوها نسبت به محور x یا y زاویه 34° و نسبت به یکدیگر زاویه 90° می‌سازند، بنابراین، در راستاهای x و y تعدادی بازو با طول‌های مختلف وجود دارد که با میدان

ساختار مارپیچ مربعی را به صورت میله‌هایی به طول L و شعاع r شبیه‌سازی می‌کنیم که دوقطبی‌ها در داخل این میله‌ها به فاصله d از یکدیگر قرار گرفته‌اند. فاصله بین دوقطبی‌ها $d = 2 \text{ nm}$ انتخاب شده است. طرحی از شبیه‌سازی آن در شکل ۴ آورده شده است. هندسه ساختار پله‌ای مربعی مایل برج‌مانند با استفاده از معادله زیر مشخص می‌شود:

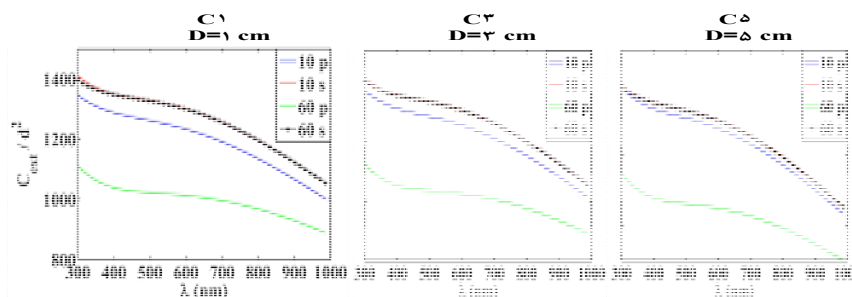
$$\begin{cases} x = (L - 2r) \cos(N \frac{\pi}{4}), \\ y = (L - 2r) \sin(N \frac{\pi}{4}), \\ z = \text{ثابت} \end{cases} \quad N = 0, 1, 2, 3 \quad (11)$$

که در آن r شعاع دوقطبی‌ها و L طول بازوی هر پیچ مربعی است. N دارای چهار مقدار است که تعداد بازوها در هر پیچ را نشان می‌دهد. معادلات بالا برای یک پیچ ساختار مارپیچی است. سپس این هندسه برای هر تعداد بازو با هر تعداد پیچ مربعی تکرار می‌شود. Z ارتفاع هر پیچ است که ثابت فرض گرفته می‌شود. دایره‌های کوچک مشخص شده در شکل ۴ نشان دهنده دوقطبی‌هاست که هر بازو به وسیله این دوقطبی‌ها در فواصل یکسانی پر شده است. بنابراین، با انتخاب $d = 2 \text{ nm}$ تعداد ۸۸۷۴ دوقطبی برای نانوساختار THST به دست می‌آید. سپس محاسبات بر اساس جهت میدان الکتریکی و جهت ساختار با توجه به قطبش s و p انجام می‌شود. شکل ۴ قسمت (پ) جهت‌گیری ساختار (ردیف ۱) و جهت‌گیری نور تابش فرودی بر ساختار (ردیف ۲) را نشان می‌دهد. نکته اصلی این است که تنها جهت میدان الکتریکی در طیف‌ها مهم است و بردار انتشار نور تابشی اهمیتی ندارد. با توجه به این تعداد دوقطبی باید 8874×3 معادله با همین تعداد مجهول برای میدان الکتریکی و قطبش حل شود.

برای شبیه‌سازی کامپیوتری باید هر سه نمونه در فواصل مختلف از لبه جسم سایه‌افکن در نانوساختار THST جداگانه شبیه‌سازی کرد. زیرا نمونه‌های قرار گرفته در فاصله ۵ cm از لبه جسم سایه‌افکن تقریباً عمود است (شکل ۴ ردیف ۱) و با کاهش فاصله از لبه جسم سایه‌افکن زاویه شیب نانوساختار مارپیچی طبق جدول ۱ افزایش می‌یابد (شکل ۴ ردیف ۲).



شکل ۵. طیف خاموشی THST در فاصله ۵ cm از لبه جسم سایه افکن در زوایای سمتی مختلف برای نور تابشی ۱۰° با قطبش p.



شکل ۶. (رنگی در نسخه الکترونیکی) طیف خاموشی نانو ساختار THST با زوایای تابش ۱۰° و ۶۰° برای هر دو قطبش s و p در فواصل مختلف از لبه جسم سایه افکن (الف) ۵ cm، (ب) ۳ cm، (پ) ۱ cm.

الکتریکی نور تابشی افزایش یافته و نور در عمق بیشتری نفوذ می کند، و از آنجا که در شبیه سازی از تخلخل، زمختی سطح و درهم رفتگی های مارپیچ ها صرف نظر شده و تنها برهم کنش نور با بازوها و اثر طول، قطر و زاویه بین میدان الکتریکی و بازوها در نظر گرفته می شود بنابراین، نور با طول های بزرگ تر برهم کنش کرده و قله به سمت طول موج های قرمز انتقال می یابد.

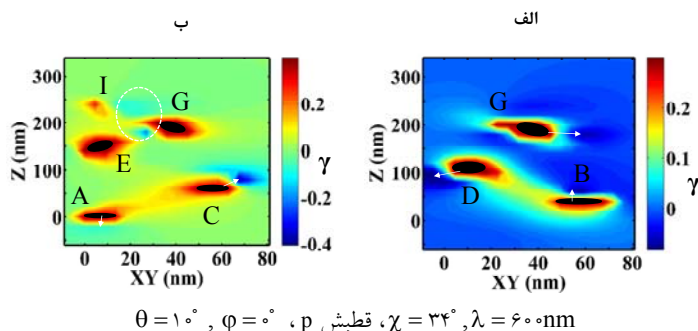
(ب) در نور تابشی با قطبش s، طیف های خاموشی در زوایای تابش ۱۰° و ۶۰° مشابه یکدیگرند و زاویه فرود روی قطبش s تأثیری ندارد. همان طور که در شکل ها نیز مشاهده می کنیم طیف خاموشی ۱۰° و ۶۰° در قطبش s روی یکدیگر قرار گرفته اند.

(پ) در نور تابشی با قطبش p و در زاویه تابش ۱۰° برای ساختار THST با کاهش فاصله از لبه جسم سایه افکن قله تقریباً به اندازه ۵۰ nm به سمت طول موج های کمتر انتقال می یابد. زیرا با کاهش فاصله از لبه جسم سایه افکن ساختار THST نسبت به محور عبوری از مارپیچ طبق جدول ۱ شیب پیدا کرده

الکتریکی نور تابشی برهم کنش می کنند. از طیف های به دست آمده بر اساس محاسبات شبیه سازی شده تقریب دو قطبی منفصل نتایج زیر حاصل می شود:

(الف) در نور تابشی با قطبش p با افزایش زاویه تابش از ۱۰° به ۶۰° قله کمی به سمت طول موج های قرمز انتقال یافته و شدت طیف خاموشی کاهش می یابد. همان طور که سیابی [۸] و سوالونی [۱۹] نیز در مقالات خود توضیح دادند که زاویه بین بازوها و میدان الکتریکی نور تابشی، طول و قطر بازوها در انتقال قله ها و تغییر شدت طیف خاموشی تأثیر می گذارد.

از آنجا که در شبیه سازی با تک ستون سروکار داریم با افزایش زاویه تابش بردار میدان الکتریکی به سمت خارج سطح لایه حرکت می کند (شکل ۴ ردیف ۲ قسمت پ) بنابراین زاویه بین میدان الکتریکی نور تابشی و بازوها افزایش می یابد در نتیجه نور با تعداد دو قطبی های کمتر برهم کنش داشته و شدت طیف کاهش می یابد. از طرفی دیگر، با افزایش زاویه تابش از ۱۰° به ۶۰° قله به سمت طول موج های قرمز انتقال می یابد. زیرا مؤلفه عمودی میدان



$$\theta = 1^\circ, \varphi = 0^\circ, p \text{ قطبش}, \chi = 34^\circ, \lambda = 600 \text{ nm}$$

شکل ۷. (رنگی در نسخه الکترونیکی) (الف) پربند توزیع میدان الکتریکی نزدیک در صفحه عبوری از قطر (نقاط B, D, G) (ب) پربند توزیع میدان الکتریکی نزدیک در صفحه عبوری از قطر (نقاط A, C, E, G, I).

بهرتر نمایان شود. پربندها با γ نشان می‌دهند و از رابطه

$$\gamma = \log \left(\frac{|E|^2}{|E_0|^2} \right)$$

تابشی است که یک انتخاب شده است. پیکان‌های مشخص شده در شکل بیانگر نوسانات دوقطبی الکتریکی هستند و ناحیه داخلی فضای بسته نوسانات هشت قطبی الکتریکی را نشان می‌دهد که این اطلاعات از تفاوت شدت رنگ‌ها حاصل می‌شود. اطلاعات مربوط به نانو ساختار در داخل کادر در زیر شکل آورده شده است. نزدیک گوشه‌های ساختار نوسانات دوقطبی الکتریکی به دلیل کنارهم قرار گرفتن شدت میدان الکتریکی قوی و ضعیف مشاهده می‌شود. همچنین در فضای بین ساختار در پیچ اول، گوشه‌های مقابل یکدیگر B, D (شکل ۷ الف) و A, C (شکل ۷ ب) نوسانات دوقطبی الکتریکی را نشان می‌دهند. در فضای بین ساختار و در پیچ دوم به دلیل کوچک بودن اضلاع و نزدیک بودن گوشه‌ها به یکدیگر دولکه آبی رنگ مشاهده می‌شود (شکل ۷ ب) که نشان از نوسانات هشت قطبی الکتریکی دارد. وجود چنین نوساناتی به دلیل تعداد لبه‌های بیشتر و متقارن‌تر در فضای میانی نانو ساختار است.

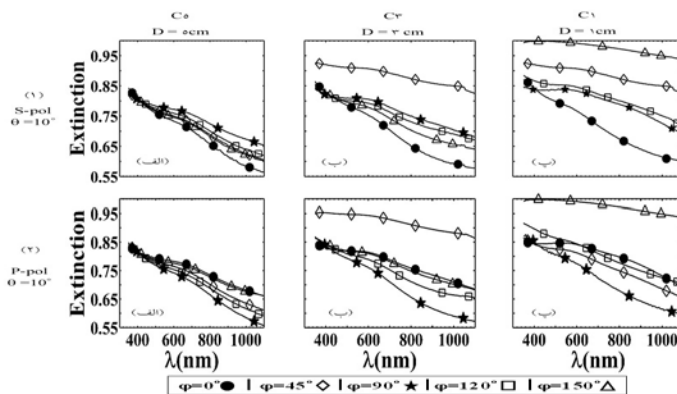
۳.۴. نتایج تجربی نانو ساختار THST

شکل ۸ طیف‌های خاموشی نانو ساختارهای THST برای نور تابشی با هر دو قطبش s و p در زاویه تابش 1° نشان می‌دهد.

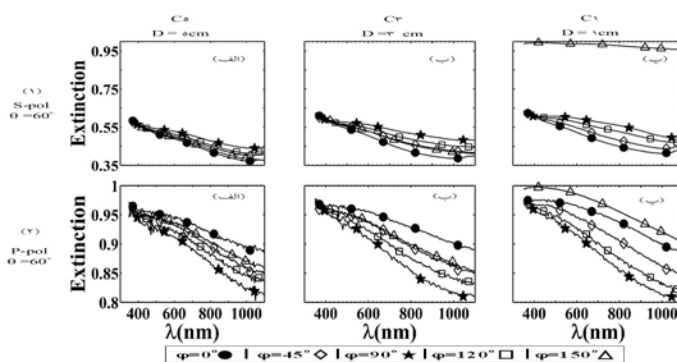
در نتیجه زاویه بین میدان الکتریکی نور تابشی و بازوی مؤثر افزایش می‌یابد و به دلیل این که این شیب کوچک است انتقال طیف نیز کم خواهد بود. به همین ترتیب در نور تابشی 60° با قطبش p با کاهش فاصله از لبه جسم سایه افکن قله به اندازه تقریباً 50 nm به سمت طول موج‌های بزرگ انتقال می‌یابد (انتقال قرمز).

ت) انتظار می‌رود طیف‌های خاموشی نهایی، از برهم‌نهی طیف‌های حاصل از نانومله‌هایی با طول‌های مختلف و در زوایای گوناگون به وجود آمده باشد و همین عامل باعث شده است تا طیف خاموشی نهایی با تغییر زاویه شیب مارپیچ حساسیتی نشان ندهد. در نتیجه تمامی طیف‌ها در فواصل مختلف از لبه جسم سایه افکن و برای هر سه نانو ساختار THST انتقالات کمی داشته باشند.

شکل ۷ پربند توزیع میدان الکتریکی برای نانو ساختار THST در $\lambda = 600 \text{ nm}$ در داخل صفحه عبوری از دو قطر (طبق شکل ۴) را نشان می‌دهد. شکل ۷ الف) پربند توزیع میدان الکتریکی در صفحه عبوری از نقاط B, D, G (طبق شکل ۴ ردیف ۱) و شکل ۷ ب) پربند توزیع میدان الکتریکی در صفحه عبوری از نقاط A, C, E, G, I در طول موج 600 nm را نشان می‌دهد. نقطه K در شکل ۴ ب) ردیف ۱ به دلیل دور بودن از صفحه در شکل ۷ ب) مشخص نشده است. با توجه به این که میدان الکتریکی در نزدیکی دوقطبی‌ها بسیار زیاد است مکان دوقطبی‌ها با لکه‌های سیاه‌رنگ پوشانده شده تا تفاوت رنگ‌ها در بقیه نقاط



شکل ۸. طیف‌های خاموشی با قطبش s و p و $\theta = 10^\circ$ مربوط به سه نمونه ساختارهای THST منگنز.



شکل ۹. طیف‌های خاموشی با قطبش s و p و $\theta = 60^\circ$ مربوط به سه نمونه ساختارهای THST منگنز.

زاویای سمتی به دام افتاده و جذب به شدت افزایش می‌یابد. از طرفی دیگر به دلیل ناهمسانگردی در ساختار با کاهش فاصله از لبه جسم سایه‌افکن زمختی سطح افزایش یافته در نتیجه بازتاب کاهش و خاموشی افزایش می‌یابد.

شکل ۹ طیف‌های خاموشی نانو ساختارهای THST برای نور تابشی با هر دو قطبش s و p در زاویه تابش 60° نشان می‌دهد. طیف‌های به دست آمده برای نور تابشی با قطبش s در زاویه تابش 60° نسبت 10° تغییر قابل ملاحظه‌ای ندارند و تنها شدت طیف کاهش می‌یابد. همان طور که سیاهی و سوالونی [۸] توضیح دادند این به دلیل نزدیکی زاویه تابش به زاویه برون‌ترازی است.

شدت طیف به دست آمده برای نور تابش با قطبش p و زاویه تابش 60° نسبت به 10° افزایش یافته و قله تشکیل شده به سمت طول‌موج‌های کوتاه‌تر انتقال یافته است. با افزایش زاویه تابش مؤلفه عمودی میدان الکتریکی افزایش یافته و نور

از آنجا که زاویه تابش کوچک است طیف خاموشی s و p تقریباً مشابه یکدیگر هستند. قله تشکیل شده در نانو ساختارهای THST برای نمونه قرار گرفته در $D = 5$ cm در محدوده 600 nm تا 700 nm است و شکل طیف برای تمام زاویای سمتی یکسان است. با کاهش فاصله از لبه جسم سایه‌افکن رفتار طیف در بعضی زاویای سمتی تغییر می‌کند. در $D = 3$ cm در زاویه سمتی 45° و در فاصله $D = 1$ cm در زاویای سمتی 45° و 15° شدت طیف افزایش قابل ملاحظه‌ای دارد. در جدول ۱ مشاهده می‌کنیم که با کاهش فاصله از لبه جسم سایه‌افکن زاویه شیب افزایش می‌یابد. همان طور که در مقاله قبلی [۱۹] نیز توضیح داده شده است با کاهش فاصله از لبه جسم سایه‌افکن به دلیل اثر سایه‌افکنی بعضی بازوها در آن زاویه سمتی تشکیل نمی‌شود یا به طور ناقص تشکیل می‌شود بنابراین، تخلخل‌هایی در ساختار به وجود می‌آید که نور در این

زاویه تابش 10° و 60° و زوایای سمتی مختلف برای سه نمونه از نانو ساختار THST با شیب مختلف به دست آورده شده است. قله‌های پلاسمونی حاصل از نتایج شبیه‌سازی شده حوالی 600 nm قرار دارد. به دلیل شیب کم ساختارها و کوچک بودن طول ساختار، قله‌های پلاسمونی ایجاد شده تغییر چندانی نخواهد داشت. سپس نتایج به دست آمده با نتایج تجربی مقایسه شده است، به طوری که قله‌های پلاسمونی ایجاد شده در حالت تجربی نیز حوالی 600 nm است. اما در نتایج تجربی تغییراتی در طیف‌ها در بعضی زوایای سمتی مشاهده شده است که به ناهنجاری‌ها شناخته شده است. این ناهنجاری‌های ایجاد شده در طیف‌های تجربی به دلیل تغییر شیب ساختار و افزایش اثر سایه‌افکنی در ساختار است که منجر به افزایش تخلخل سطحی و ایجاد نقص در ساختار می‌شود.

در لایه بیشتر نفوذ می‌کند، اما به دلیل تخلخل‌هایی که در ساختار وجود دارد جذب و در نتیجه شدت طیف خاموشی افزایش می‌یابد. از طرفی دیگر عمق نفوذ در لایه نازک فلزی در حدود 320 nm است [۲۰]، و از آنجا که ضخامت لایه نازک THST در حدود $400-500 \text{ nm}$ است بنابراین نور بیشتر با بازوهای سطحی برهم‌کنش می‌کند و به دلیل این که بازوهای سطحی طول کوتاه‌تری دارند و همچنین به دلیل اثر پخش سطحی قطر بازوها نیز افزایش یافته است بنابراین قله به سمت طول موج‌های آبی انتقال می‌یابد.

۵. نتیجه‌گیری

نانوساختارهای معرفی شده در این مقاله به نانو ساختار برج‌های ماریچ کج و پله‌مانند THST نامگذاری شده‌اند. طیف خاموشی لایه‌های نازک منگنز THST با استفاده از شبیه‌سازی تقریب دوقطبی منفصل (DDA) برای دوقطبش نور فرودی s و p در دو

مراجع

10. S Rhamezani Sani and A Morteza Ali, *Iranian Journal of Physics Research* **7**, 4 (2007) 205.
11. J D Jackson, "Classical Electrodynamics," 2nd Ed, Wiley, New York (1975).
12. C Kittel, "Introduction to Solid State Physics," 4th Ed, Wiley, New York (1971).
13. E M Purcell, "Electricity and Magnetism," Vol 1, 1st Ed, McGraw-Hill, New York (1965).
14. H Savaloni, F Babaei, S Song, and F Placido, *Appl. Surf. Sci.* **255** (2009) 8041.
15. H Alouach, and G J Mankey, *J. Vac. Sci. Technol. A* **22** (2004) 1379.
16. A Esfandiar, H Savaloni, and F Placido, *Physica E* **50** (2013) 88.
17. E D Palik, "Handbook of Optical Constants of Solids", Academic, New York (1985).
18. L Abelmane and C Lodder, "Thin Solid Films" **305** (1997) 1.
19. H Savaloni, M Fakharpour, A Siabi Gargan, F Placido, and F Babaei, *App. Surf. Sci.* **393** (2017) 234.
20. A Siabi-Garjan, and H Savaloni, *Eur. Phys. J. B* **86** (2013) 257.
1. P Debye, *Ann. Phys.* **30** (1909) 57.
2. G Mie, *Ann. Phys.* **25** (1908) 377.
3. E M Purcell and C R Pennypacker, *Astrophys. J.* **186** (1973) 705.
4. B T Draine and P J Flatau, *J. Opt. Soc. Am. A* **11** (1994) 1491.
5. K Krause and M Brett, *Adv. Funct. Mater.* **18** (2008) 3111.
6. H Savaloni and A Esfandiar, *App. Surf. Sci.* **257** (2011) 9425.
7. F Babaei, A Esfandiar, and H Savaloni, *Opt. Commun.* **283** (2010) 2849.
8. A Siabi-Garjan, and H Savaloni, *Plasmonics* **10** (2015) 861.
۹. ا عطاران کاخکی و م عادل‌فر، مجله پژوهش فیزیک ایران **۹**، ۲ (۱۳۸۸) ۱۹۵.
9. E Attaran Kakhki and M Adelifard, *Iranian Journal of Physics Research* **9**, 2 (2009) 195.
۱۰. س رضانی ثانی و ع مرتضی علی، مجله پژوهش فیزیک ایران **۷**، ۴ (۱۳۸۶) ۲۰۵.