

## خواص اپتیکی مولکول‌های $C_{60}$ : تقریب شبه ایستایی

افشین مرادی

گروه فیزیک مهندسی، دانشگاه صنعتی کرمانشاه، کرمانشاه

پست الکترونیکی: a.moradi@kut.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۸/۰۱/۲۹؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۸/۰۶/۱۰)

### چکیده

در این مقاله، خواص اپتیکی مولکول‌های  $C_{60}$  در تقریب شبه ایستایی مطالعه شده است. بدین منظور یک مولکول  $C_{60}$  به صورت یک پوسته کروی بی‌نهایت نازک از الکترون‌های  $\pi$  و  $\sigma$  مدل شده است و تحریکات الکترونی بر روی سطح این پوسته به وسیله تئوری هیدرودینامیک دو شماره‌ای دو بعدی توصیف شده است. در ابتدا عبارت کلی برای قطبش‌پذیری سیستم با حل معادله لاپلاس در ترکیب با معادلات هیدرودینامیک و شرایط مرزی مناسب، به دست آمده است. سپس با استفاده از رابطه قطبش‌پذیری، طیف خاموشی سیستم بررسی شده است که در توافق کامل با نتیجه تئوری مای است. همچنین با توسعه تئوری ماکسول-گارنت برای تقریب محیط مؤثر مواد کامپوزیتی، تابع دی‌الکتریک مؤثر کامپوزیتی از مولکول‌های  $C_{60}$  به دست آمده است.

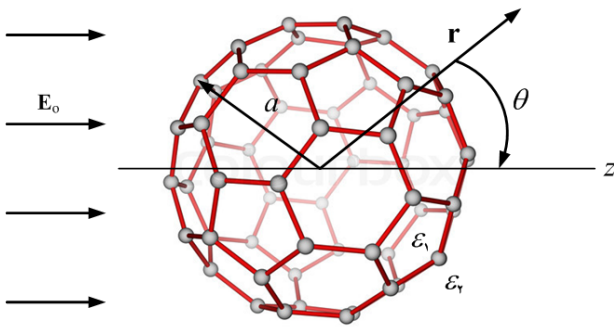
واژه‌های کلیدی: مولکول  $C_{60}$ ، تقریب شبه ایستایی، تئوری ماکسول-گارنت

### ۱. مقدمه

در ناحیه با انرژی  $20 \text{ eV}$  رخ می‌دهند. در مرجع [۳] تحریک‌های پلاسمونی مولکول‌های  $C_{60}$  و  $C_{70}$  با استفاده از یک مدل هیدرودینامیک دو شماره‌ای مطالعه شده است. نتایج این تحقیق، نشان دهنده یک تشدید پلاسمونی  $\pi$  در محدوده انرژی‌های  $8-6 \text{ eV}$  و یک تشدید پلاسمونی  $\pi + \sigma$  در محدوده انرژی‌های نزدیک به  $25 \text{ eV}$  است.

برخی از محققین نیز مولکول  $C_{60}$  را به صورت یک پوسته کروی با ضخامت بسیار نازک در نظر گرفته و تحریک‌های تجمعی آن را بررسی کردند [۴ و ۵]. همچنین، پاسخ فولرن‌های کربنی به میدان الکترومغناطیسی در [۶] مطالعه شده است و

از زمان کشف مولکول  $C_{60}$  (با  $60$  الکترون نوع  $\pi$  و  $180$  الکترون  $\sigma$  در تراز ظرفیت) در سال ۱۹۸۵ میلادی [۱]، کارهای تجربی و تئوری بسیاری در حوزه خواص اپتیکی این ساختار مولکولی کربنی صورت گرفته است. در میان این تلاش‌ها، مطالعه تحریک‌های تجمعی به صورت تجربی و تئوری مورد توجه بیشتری قرار گرفته است. به عنوان مثال، در مرجع [۲]، تابع پاسخ الکترومغناطیسی و تحریک‌های تجمعی مولکول  $C_{60}$  با استفاده از تئوری پاسخ خطی مطالعه شده است. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که تحریک‌های تجمعی به طور معمول



شکل ۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) مولکول C<sub>60</sub> در یک میدان الکتروستاتیک خارجی.

احاطه کننده مولکول (شعاع مولکول C<sub>60</sub> برابر است با  $a = 6/683 a_B$  که در آن شعاع اتم بوهر است)، می توان از تقریب شبه ایستایی استفاده کرد. در این تقریب، در عمل نوسانات مکانی میدان خارجی توسط مولکول دیده نمی شود و در نتیجه می توان فرض کرد که مولکول در یک میدان الکتروستاتیکی وابسته به زمان هارمونیک قرار گرفته است. در نتیجه در تقریب شبه ایستایی، میدان الکتریکی می تواند توسط پتانسیل الکتریکی به شکل  $E = -\nabla\Phi$  نمایش داده شود.

بنابراین همان طور که در شکل ۱ نشان داده شده است، فرض می شود که مولکول C<sub>60</sub> در یک میدان الکتروستاتیکی قرار دارد که در آغاز یکنواخت و در راستای محور z به صورت  $E = E_0 \hat{e}_z$ ، در غیاب مولکول و یا در فاصله دوری از آن است. مختصات قطبی کروی  $r = (r, \theta, \phi)$  در نظر گرفته می شود و فرض می شود که مرکز مولکول در مبدأ آن باشد. همچنین، ثابت دی الکتریک داخل و بیرون مولکول به ترتیب  $\epsilon_1$  و  $\epsilon_2$  فرض می شود. با توجه به آرایش مسئله، پتانسیل های الکتریکی در داخل و خارج مولکول در معادله لاپلاس  $\nabla^2\Phi = 0$  صدق می کنند؛ افزون بر آن با توجه به تقارن سمتی سیستم، این پتانسیل ها به  $r$  و  $\theta$  بستگی دارند و در نتیجه جواب پتانسیل در نواحی داخل و خارج مولکول به صورت زیر نوشته می شوند:

$$\Phi(r, \theta) = \begin{cases} A_1 r \cos\theta, & r \leq a, \\ \left[ -E_0 r + A_4 r^{-2} \right] \cos\theta, & r \geq a, \end{cases} \quad (1)$$

که در آن ضرایب  $A_1$  و  $A_4$  می بایست تعیین شوند. توجه

قطبش پذیری ایستایی مولکول C<sub>60</sub> به دست آمده است. به علاوه، با استفاده از تقریب تصادفی فاز، تابع دی الکتریک C<sub>60</sub> در [۷] محاسبه شده است و با استفاده از تئوری هیدرودینامیک دو شماره ای دو بعدی، تحریکات تجمعی الکترون های  $\pi$  و  $\sigma$  در فولرن های تک لایه، نظیر مولکول C<sub>60</sub> و چند لایه در مرجع [۸] مطالعه شده است.

همچنین، توسط نویسنده حاضر در مرجع [۹] یک مولکول C<sub>60</sub> به صورت یک پوسته کروی بی نهایت نازک از الکترون های  $\pi$  و  $\sigma$  در نظر گرفته شده و با استفاده از تئوری هیدرودینامیک دو شماره ای دو بعدی برای توصیف تحریکات الکترونی بر روی سطح این پوسته، طیف خاموشی مولکول C<sub>60</sub> با استفاده از تئوری مای مورد بررسی قرار گرفته است و سپس با استفاده از نتایج به دست آمده در [۹]، تابع دی الکتریک مؤثر کامپوزیتی از مولکول های C<sub>60</sub> با توجه به یک تئوری محیط مؤثر در ترکیب با تئوری مای به دست آمده است [۱۰].

از آنجا که ابعاد یک مولکول C<sub>60</sub> در مقابل طول موج استفاده شده در محاسبات بسیار کوچک است، در کار حاضر برای بررسی خواص اپتیکی مولکول های C<sub>60</sub> از تقریب شبه ایستایی استفاده می شود. مزیت استفاده از روش حاضر سادگی توصیف مسئله، نمایش مناسب تر نتایج و همچنین تعمیم ساده تر مسئله است [۱۱ و ۱۲]. بدین منظور، در ابتدا پاسخ یک مولکول منفرد به یک میدان الکترومغناطیسی خارجی در تقریب شبه ایستایی مطالعه می شود و سپس با استفاده از تئوری ماکسول-گارتنت [۱۳ و ۱۴] تابع دی الکتریک مؤثر کامپوزیتی از این مولکول ها محاسبه می شود.

## ۲. مولکول C<sub>60</sub> در یک میدان خارجی: تقریب شبه

### ایستایی

یک مولکول C<sub>60</sub> به صورت یک پوسته کروی بی نهایت نازک و پوشیده شده از یک پلاسمای الکترونی حاوی الکترون های نوع  $\pi$  و  $\sigma$  در نظر گرفته می شود. فرض می شود که این مولکول تحت تأثیر یک میدان الکترومغناطیسی قرار گیرد. با توجه به کوچکی سیستم در مقابل با طول موج میدان الکترومغناطیسی

برهم‌کنش داخلی شاره‌ی الکترونی با ثابت  $\alpha_V = \frac{v_{FV}}{\sqrt{\epsilon_0}}$  است که در آن  $v_{FV} = \frac{\hbar k_{FV}}{m_V}$  نشان دهنده‌ی سرعت فرمی الکترون نوع  $V$  ( $\hbar$  برابر با ثابت پلانک  $h$  تقسیم بر  $2\pi$  است) و  $k_{FV} = (\pi n_{eV})^{1/2}$  معرف عدد موج فرمی الکترون  $V$  است. همچنین،  $-\omega_{rV}^{\gamma} (a \delta \theta_V)$  نیروی بازگشتی الکترون  $V$  است. جمله‌ی آخر بیانگر میرایی الکترون نوع  $V$  (با ضریب میرایی  $\gamma_V$ ) ناشی از پراکندگی آن با یون‌های زمینه است. در این مرحله، با فرض یک وابستگی به زمان هارمونیک برای همه کمیت‌ها به صورت  $e^{-i\omega t}$  (که در آن  $\omega$  نشان دهنده‌ی بسامد نوسان است)، با استفاده از روابط (۱)، (۳)–(۵)، بعد از حذف جابه‌جایی زاویه‌ای اختلالی  $\delta \theta_V$  می‌توان نوشت:

$$n_V = -2 \frac{\epsilon_0 \omega_{pV}^{\gamma}}{ea \Omega_V} \Phi|_{r=a}, \quad (7)$$

که در آن  $\Omega_V = \omega(\omega + i\gamma) - \omega_{rV}^{\gamma} - 2 \frac{\alpha_V^{\gamma}}{a}$  و  $\omega_{pV} = \left( \frac{e^{\gamma} n_{eV}}{\epsilon_0 m_V a} \right)^{1/2}$  با جایگذاری رابطه (۷) در رابطه (۳) و استفاده از روابط (۱) و (۲)، ثابت‌های  $A_1$  و  $A_2$  به شکل زیر بر حسب  $E_0$  نوشته می‌شوند:

$$A_1 = \frac{-3\epsilon_0}{\epsilon_1 + 2\epsilon_0 - 2 \sum_{v=\pi, \sigma} \frac{\omega_{pV}^{\gamma}}{\Omega_V}} E_0, \quad (8)$$

$$A_2 = a^3 \frac{\epsilon_1 - \epsilon_0 - 2 \sum_{v=\pi, \sigma} \frac{\omega_{pV}^{\gamma}}{\Omega_V}}{\epsilon_1 + 2\epsilon_0 - 2 \sum_{v=\pi, \sigma} \frac{\omega_{pV}^{\gamma}}{\Omega_V}} E_0, \quad (9)$$

پس از جایگذاری روابط (۸) و (۹) در رابطه (۱) نتیجه گرفته می‌شود که جمله‌ی دوم در پتانسیل خارج از مولکول حاصل از یک میدان دو قطبی است که توسط مولکول ایجاد شده است. با تعریف قطبش پذیری  $\alpha$  به صورت  $P = \epsilon_0 \epsilon_0 \alpha E$ ، می‌توان نوشت:

می‌کنیم که در رابطه (۱) در بیرون مولکول، برای پتانسیل دو جمله در نظر گرفته شده است. جمله اول به میدان بیرونی  $E = E_0 \hat{e}_z$  وابسته است و جمله دوم به حضور مولکول در میدان خارجی مربوط می‌شود. با توجه به شرایط مرزی حاکم بر مسئله، در سطح مولکول پتانسیل الکتریکی پیوسته است، اما به دلیل وجود چگالی بار قطبشی بر روی سطح مولکول مؤلفه عمودی میدان جابه‌جایی ناپیوسته است، بنابراین می‌توان نوشت:

$$\Phi_1|_{r=a} = \Phi_2|_{r=a}, \quad (2)$$

$$\epsilon_2 \frac{\partial \Phi_2}{\partial r} \Big|_{r=a} - \epsilon_1 \frac{\partial \Phi_1}{\partial r} \Big|_{r=a} = \frac{e}{\epsilon_0} \sum_{v=\pi, \sigma} n_V, \quad (3)$$

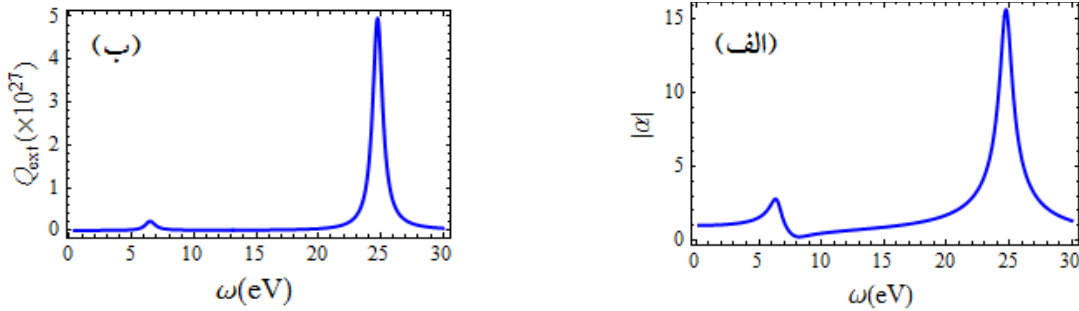
به طوری که شاخص‌های ۱ و ۲ به ترتیب معرف نواحی داخل و بیرون مولکول هستند. همچنین،  $e$  نشان دهنده بار الکتریکی الکترون،  $\epsilon_0$  ضریب گذردهی خلأ و  $n_V$  نمایش دهنده چگالی اختلالی مرتبه اول پلاسما الکترونی نوع  $V$ ، یعنی الکترون‌های  $\pi$  و  $\sigma$  است. برای محاسبه  $n_V$ ، با در نظر گرفتن  $n_{e\sigma} = \frac{180}{4\pi a^2}$  و  $n_{e\pi} = \frac{60}{4\pi a^2}$  به ترتیب به عنوان چگالی غیر اختلالی پلاسما الکترونی نوع  $\pi$  و  $\sigma$ ، با توجه به مدل هیدرودینامیک خطی شده برای سیستم حاضر می‌توان نوشت:

$$\frac{\partial^2 \delta \theta_V}{\partial t^2} = \frac{e}{m_V} \nabla \cdot \Phi|_{r=a} - \frac{\alpha_V^{\gamma}}{n_{eV}} \nabla \cdot \left( n_V - \omega_{rV}^{\gamma} \delta \theta_V - \gamma_V \frac{\partial \delta \theta_V}{\partial t} \right), \quad (4)$$

$$n_V + n_{eV} \nabla \cdot (\delta \theta_V \hat{e}_\theta) = 0, \quad (5)$$

$$\nabla^2 \Phi(r) = \begin{cases} 0, & r \neq a, \\ \sum_{v=\pi, \sigma} \frac{en_V}{\epsilon_0}, & r = a, \end{cases} \quad (6)$$

به طوری که در روابط بالا  $\delta \theta_V$  معرف جابه‌جایی زاویه‌ای اختلالی مرتبه اول شاره الکترونی  $V$  در سطح پوسته  $r = a$ ،  $m_V$  معرف جرم مؤثر الکترون نوع  $V$  است و  $\nabla \cdot \left( \frac{1}{a} \frac{\partial}{\partial \theta} \hat{e}_\theta \right) = 0$ . جمله اول سمت راست رابطه (۴) نشان دهنده نیروی الکتریکی وارد بر شاره الکترونی  $V$  در سطح سیستم است. جمله دوم بیانگر فشار الکترونی ناشی از



شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) (الف) اندازه قطبش پذیری  $\alpha$  مربوط به یک مولکول  $C_6$  در یک میدان الکتروستاتیک خارجی نسبت به بسامد، وقتی که  $\varepsilon_1 = 1 = \varepsilon_2$ ،  $\gamma_\pi = \gamma_\sigma = \omega_p = \omega_p$ ،  $m_\pi = m_e = m_\sigma$ ، همچنین  $\omega_{r\pi} = 0$  و  $\omega_{\sigma\pi} = 16/2 \text{ eV}$  و (ب) تغییرات سطح مقطع خاموشی مولکول نسبت به بسامد، متناظر با شکل (الف).

$$\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 - 2 \sum_{\nu=\pi,\sigma} \frac{\omega_{p\nu}^2}{\omega^2 - \omega_{r\nu}^2 - 2(\alpha_\nu^2/a^2)} = 0, \quad (11)$$

که بیانگر رابطه پاشندگی پلاسماهای سطحی دو قطبی سیستم است. در شرایطی که  $\varepsilon_1 = 1 = \varepsilon_2$ ،  $m_\pi = m_e = m_\sigma$ ،  $\omega_{r\pi} = 0$  و  $\omega_{\sigma\pi} = 16/2 \text{ eV}$  [۳] است، با توجه به رابطه (۱۱) دو مقدار  $\omega_\pi = 6/5 \text{ eV}$  و  $\omega_{\sigma+\pi} = 24/7 \text{ eV}$  برای بسامدهای تشدید پلاسمونی به دست می آید. این نتیجه نشان می دهد که مولکول  $C_6$  دارای دو مد نوسانی پلاسمونی متفاوت  $\pi$  و  $\pi + \sigma$  است. در این مرحله، با توجه به رابطه قطبش پذیری سیستم، برای سطح مقطع پراکندگی و جذب توسط مولکول می توان نوشت [۱۲]:

$$C_{sca} = \frac{\varepsilon_1^2}{\varepsilon_2^2 a^2} \left( \frac{\omega}{c} \right)^4 |\alpha|^2 = \frac{\varepsilon_1^2}{\varepsilon_2^2} \left( a \frac{\omega}{c} \right)^4 \frac{\left| \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2 - 2 \sum_{\nu=\pi,\sigma} \frac{\omega_{p\nu}^2}{\Omega_\nu} \right|^2}{\left| \varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 - 2 \sum_{\nu=\pi,\sigma} \frac{\omega_{p\nu}^2}{\Omega_\nu} \right|^2}, \quad (12)$$

$$C_{abs} = \frac{\varepsilon_1^2}{\pi a^2} \left[ \frac{\omega}{c} \text{Im}[\alpha] \right] = \varepsilon_1 \varepsilon_2^2 \frac{\omega}{c} \text{Im} \left[ \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2 - 2 \sum_{\nu=\pi,\sigma} \frac{\omega_{p\nu}^2}{\Omega_\nu}}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 - 2 \sum_{\nu=\pi,\sigma} \frac{\omega_{p\nu}^2}{\Omega_\nu}} \right], \quad (13)$$

$$\alpha = \varepsilon_2 \pi a^3 \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2 - 2 \sum_{\nu=\pi,\sigma} \frac{\omega_{p\nu}^2}{\Omega_\nu}}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 - 2 \sum_{\nu=\pi,\sigma} \frac{\omega_{p\nu}^2}{\Omega_\nu}}. \quad (10)$$

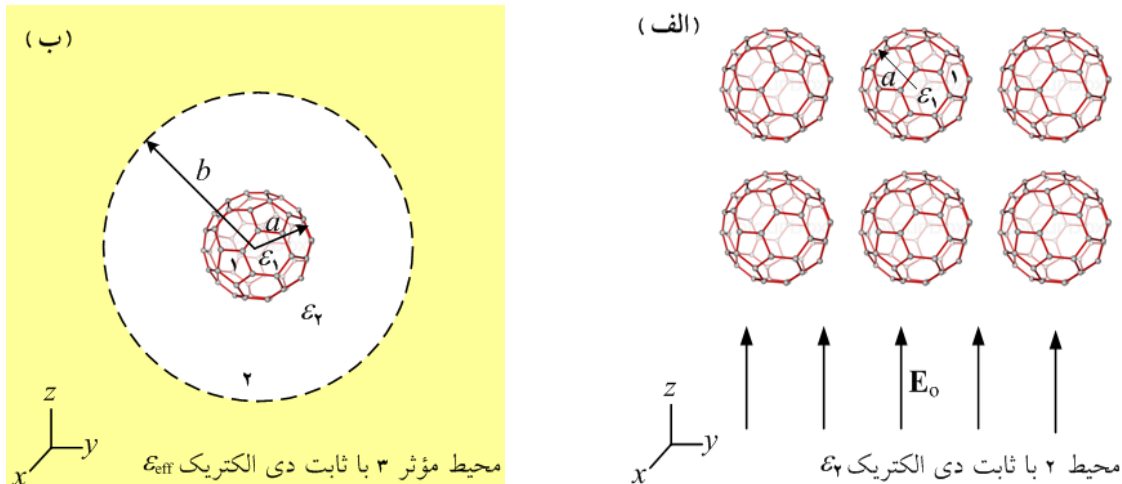
رابطه بالا، نشان دهنده قطبش پذیری مختلط یک مولکول  $C_6$  در تقریب شبه ایستایی است که تا آنجایی که نویسنده آگاه است برای اولین بار در روش حاضر ارائه شده است. در راستای تحلیل عددی مسئله، شکل ۲. الف تغییرات  $\alpha$  را نسبت به بسامد نشان می دهد. توجه می شود که در رسم شکل، جرم مؤثر الکترون های  $\pi$  و  $\sigma$  برابر با جرم یک الکترون آزاد، یعنی  $m_e$  در نظر گرفته شده است، به علاوه، فرض شده است که  $\varepsilon_1 = 1 = \varepsilon_2$  و  $\gamma_\pi = \gamma_\sigma = \omega_p = \omega_p$ ، که در آن

$$\omega_p = \left( \frac{e^2 (n_\pi + n_\sigma)}{\varepsilon_0 m_e a} \right)^{1/2}$$

است. همچنین، از مقادیر  $\omega_{r\pi} = 0$  و  $\omega_{\sigma\pi} = 16/2 \text{ eV}$  در مرجع [۳] استفاده شده است. همان طور که می توان دید، قطبش پذیری سیستم در شرایطی

$$\text{که عبارت } \varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 - 2 \sum_{\nu=\pi,\sigma} \frac{\omega_{p\nu}^2}{\Omega_\nu} \text{ در مخرج رابطه (۱۰)}$$

کمینه است، به بیشینه مقدار خود می رسد. باید توجه کرد که کمینه رابطه مذکور در موردی که بخش موهومی  $\alpha$  بسیار کوچک و یا تغییرات آرام دارد، می تواند به صورت زیر نوشته شود:



شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) (الف) مولکول‌های C<sub>60</sub> در یک محیط میزبان با ثابت دی‌الکتریک ε<sub>2</sub> و (ب) یک مولکول C<sub>60</sub> پوشیده شده با یک لایه با ثابت دی‌الکتریک ε<sub>2</sub>، در یک محیط مؤثر با تابع دی‌الکتریک مؤثر ε<sub>eff</sub>.

### ۳. تئوری محیط مؤثر کامپوزیتی از مولکول‌های C<sub>60</sub>

شکل ۳، کامپوزیتی متشکل از مولکول‌های C<sub>60</sub> با شعاع  $a$  به عنوان محیط ۱ (با کسر حجمی  $f$ ) را در محیط ۲ با ثابت دی‌الکتریک ε<sub>2</sub> نشان می‌دهد. بر اساس تئوری ماکسول-گارنت برای محاسبه تابع دی‌الکتریک مؤثر ε<sub>eff</sub> وابسته به بسامد این سیستم کامپوزیتی، مطابق با شکل ۳ الف فرض می‌شود که این سیستم تحت تأثیر یک میدان الکتروستاتیکی وابسته به زمان قرار گرفته است. سپس، همانطور که در شکل ۳ ب نشان داده شده است، این مجموعه با سیستمی متشکل از یک مولکول C<sub>60</sub> که توسط یک پوسته کروی به شعاع  $b$  در یک محیط با تابع دی‌الکتریک مؤثر ε<sub>eff</sub> قرار گرفته است، جایگزین می‌شود. حجم بین  $a$  و  $b$  متوسط فضای پوششی برای هر مولکول C<sub>60</sub> با ضریب پرشدگی  $f = a^3/b^3$  را نشان می‌دهد. در نهایت تابع دی‌الکتریک مؤثر سیستم ε<sub>eff</sub> تحت شرایطی محاسبه می‌شود که مولکول C<sub>60</sub> هیچ اختلالی در میدان الکتروستاتیکی محیط اطراف خود ایجاد نکند [۱۳] و [۱۴].

با توجه به آرایش نشان داده شده در شکل ۲ ب، با فرض این که سیستم مولکول C<sub>60</sub> پوشیده شده با یک لایه با ثابت دی‌الکتریک، تحت تأثیر یک میدان شبه ایستایی در راستای  $z$  قرار گرفته است، می‌توان نوشت:

که در روابط بالا،  $c$  معرف سرعت نور در خلأ می‌باشد. برای سیستم حاضر، بازدهی جذب متناسب با  $a$  غالب بر بازدهی پراکندگی است که متناسب با  $a^4$  می‌باشد. بنابراین سیستم مورد نظر برای یک پراکنده کننده مناسب نمی‌باشد و در عمل جذب انرژی است. با استفاده از روابط (۱۲) و (۱۳) می‌توان سطح مقطع خاموشی مولکول را به صورت زیر محاسبه کرد:

$$C_{ext} = C_{abs} + C_{sca} \quad (14)$$

که نمودار متناظر با این کمیت در شکل ۲ ب برای مولکول C<sub>60</sub> رسم شده است. در این نمودار نیز دو قله به واسطه تشدید پلاسمون‌های سطحی π و σ + π مشاهده می‌شود که کاملاً منطبق بر نتیجه عددی ارائه شده در شکل ۲ مرجع [۹] است. این بدان معنی است که روش شبه ایستایی برای سیستم حاضر دیگر روش تقریبی به حساب نمی‌آید و با روش استفاده از تئوری مای برابر است. همچنین، لازم به ذکر است که قله مربوط به تشدید پلاسمون‌های سطحی π در انرژی در حدود ۶ eV در تطابق با نتایج تجربی است [۱۵]، اما قله تشدید پلاسمون‌های σ + π در انرژی‌های بیشتری نسبت به نتایج تجربی ظاهر می‌شود. به منظور ایجاد تطابق، همان‌طور که در مرجع [۱۶] ذکر شده است، می‌بایست مقدار بسامد بازگشتی ω<sub>πσ</sub> کاهش و یا مقدار ضریب میرایی γ<sub>σ</sub> افزایش یابد.

دست می‌دهد. علاوه بر آن نقش ثابت‌های دی‌الکتریک  $\epsilon_1$  و  $\epsilon_2$  و همچنین تأثیر فشار الکترونی سیستم نیز در رابطه بالا، شکل کامل‌تری از جواب مسئله را نسبت به رابطه (۱۳) متناظر با آن در مرجع [۱۰] ارائه می‌دهد. در شکل ۴، بخش‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مؤثر سیستم بر حسب بسامد به ازای مقادیر مختلف  $f$  رسم شده است. برای دیگر پارامترهای مورد نیاز از اطلاعات شکل ۲ استفاده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش  $f$  قله‌های بخش موهومی این تابع به سمت بسامدهای با انرژی کمتر جابه‌جا می‌شود، اگرچه این انتقال برای قله حاصل از تشدید پلاسمون‌های  $\pi$  بسیار کوچک است. توجه می‌شود که دلیل فیزیکی انتقال قرمز قله حاصل از تشدید پلاسمون‌های  $\pi + \sigma$ ، افزایش برهم‌کنش میان مولکول‌ها است [۱۰].

برای نمایش اثر ثابت دی‌الکتریک محیط میزبان بر  $\epsilon_{eff}$ ، در شکل ۵، در شرایط  $f = 0.11$  و  $\epsilon_1 = 1$ ، بخش‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک مؤثر سیستم بر حسب بسامد به ازای مقادیر مختلف  $\epsilon_2$  رسم شده است. نتایج عددی حاصل، بیانگر انتقال بسامد تشدید تابع دی‌الکتریک مؤثر به مقادیر کمتر، با افزایش مقدار  $\epsilon_2$  است. با مقایسه نتایج عددی ارائه شده در شکل‌های ۴ و ۵ و همچنین ملاحظات مربوط به تقریب شبه ایستایی، به سادگی نتیجه گرفته می‌شود که به منظور تغییر در بسامد تشدید تابع دی‌الکتریک مؤثر کامپوزیت مورد بررسی، ایجاد تغییرات در ثابت دی‌الکتریک محیط میزبان مناسب‌تر و دارای تأثیرات بیشتر است.

#### ۴. نتیجه‌گیری

برای اولین بار، با استفاده از تقریب شبه ایستایی در ترکیب با تئوری هیدرودینامیک دو شاره‌ای خطی شده، پاسخ الکتروستاتیکی یک مولکول  $C_6$  به یک میدان الکتریکی خارجی وابسته به زمان هارمونیک به دست آمد. نتایج عددی نشان دهنده این است که روش شبه ایستایی برای سیستم بسیار کوچک مورد بررسی، دیگر روش تقریبی به حساب نمی‌آید و دقیقاً نتیجه تئوری مای را به دست می‌دهد. سپس، با توسعه

$$\Phi(r, \theta) = \begin{cases} B_1 r \cos \theta, & r \leq a, \\ \left[ B_2 r + B_3 r^{-2} \right] \cos \theta, & a \leq r \leq b, \\ \left[ -E_0 r + B_4 r^{-2} \right] \cos \theta, & r \geq a, \end{cases} \quad (15)$$

که در آن ضرایب  $B_1$  تا  $B_4$  با اعمال شرایط مرزی حاکم بر مسئله تعیین می‌شوند. برای سیستم حاضر شرایط مرزی به شکل زیر نوشته می‌شوند:

$$\Phi_1|_{r=a} = \Phi_2|_{r=a}, \quad (16)$$

$$\Phi_2|_{r=b} = \Phi_3|_{r=b}, \quad (17)$$

$$\epsilon_2 \frac{\partial \Phi_2}{\partial r} \Big|_{r=b} = \epsilon_{eff} \frac{\partial \Phi_3}{\partial r} \Big|_{r=b}, \quad (18)$$

$$\epsilon_2 \frac{\partial \Phi_2}{\partial r} \Big|_{r=a} - \epsilon_1 \frac{\partial \Phi_1}{\partial r} \Big|_{r=a} = \frac{e}{\epsilon_0} \sum_{\nu=\pi, \sigma} n_\nu, \quad (19)$$

به طوری که شاخص‌های ۱ الی ۳ به ترتیب معرف نواحی  $r < a$ ،  $a < r < b$  و  $r > b$  هستند. با جایگذاری رابطه (۱۵) در روابط (۱۶)–(۱۹) و استفاده از رابطه (۷) می‌توان نوشت:

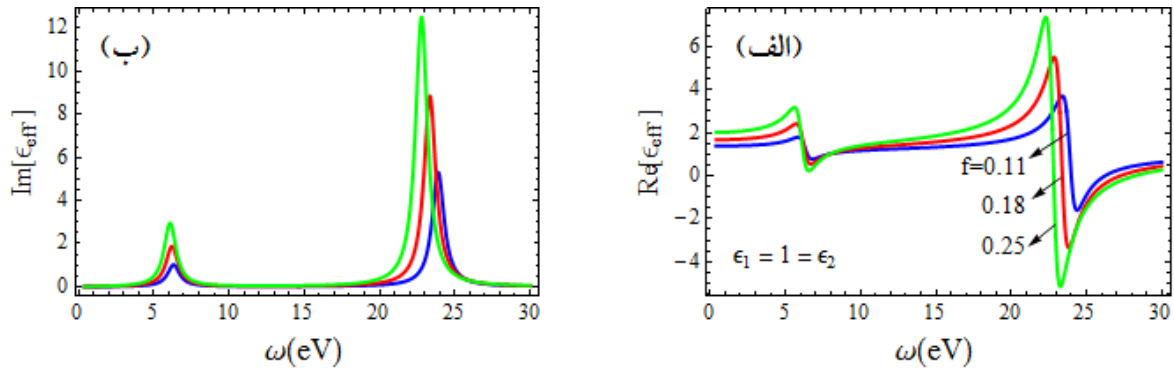
$$\begin{pmatrix} \left( \frac{E_0}{B_4} \right) = \frac{b^3}{3\epsilon_{eff}} \\ \begin{pmatrix} -\epsilon_2 b^{-3} - 2\epsilon_{eff} b^{-3} & 2\epsilon_2 b^{-6} - 2\epsilon_{eff} b^{-6} \\ -\epsilon_2 + \epsilon_{eff} & 2\epsilon_2 b^{-3} + \epsilon_{eff} b^{-3} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \quad (20)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & a^{-3} \\ \epsilon_2 & -2\epsilon_2 a^{-3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} = B_1 \begin{pmatrix} 1 \\ \epsilon_1 - \sum_{\nu=\pi, \sigma} \frac{\omega_{p\nu}^2}{\Omega_\nu} \end{pmatrix}. \quad (21)$$

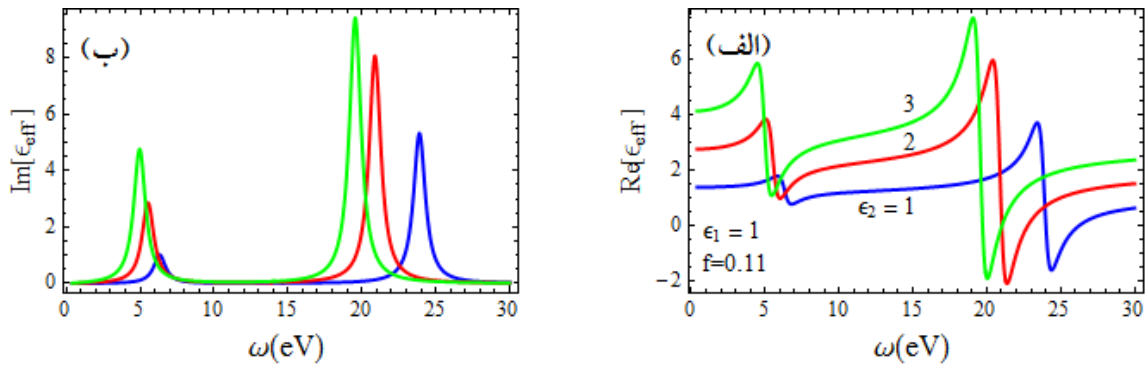
حال برای آن که مولکول  $C_6$  هیچ اختلالی در میدان الکتروستاتیکی محیط اطراف خود ایجاد نکند، می‌بایست  $B_4 = 0$  در نظر گرفته شود [۱۳ و ۱۴]، که نتیجه می‌دهد:

$$\frac{\epsilon_{eff} - \epsilon_2}{\epsilon_{eff} + 2\epsilon_2} = f \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2 - 2 \sum_{\nu=\pi, \sigma} \frac{\omega_{p\nu}^2}{\Omega_\nu}}{\epsilon_1 + 2\epsilon_2 - 2 \sum_{\nu=\pi, \sigma} \frac{\omega_{p\nu}^2}{\Omega_\nu}}. \quad (22)$$

از رابطه (۲۲) تابع دی‌الکتریک مؤثر وابسته به زمان کامپوزیتی از مولکول‌های  $C_6$  محاسبه می‌شود که در مقایسه با رابطه (۱۳) متناظر با آن در مرجع [۱۰] به مراتب از سادگی بیشتری برخوردار است، در حالی که نتیجه کاملاً یکسانی را نیز به



شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) تغییرات (الف) بخش حقیقی و (ب) بخش موهومی تابع دی‌الکتریک مؤثر کامپوزیتی از مولکول‌های C<sub>6</sub>. نسبت به بسامد به ازای مقادیر مختلف  $f$ ، وقتی که  $\epsilon_1 = 1 = \epsilon_2$ ،  $\gamma_\pi = 0.4\omega_p = \gamma_\sigma$ ،  $m_\pi = m_e = m_\sigma$  و همچنین  $\omega_{r\pi} = 0$  و  $\omega_{\sigma\pi} = 16.2\text{eV}$ .



شکل ۵. (رنگی در نسخه الکترونیکی) تغییرات (الف) بخش حقیقی و (ب) بخش موهومی تابع دی‌الکتریک مؤثر کامپوزیتی از مولکول‌های C<sub>6</sub>. نسبت به بسامد به ازای مقادیر مختلف  $\epsilon_2$ ، وقتی که  $\epsilon_1 = 1$ ،  $f = 0.11$ ،  $\gamma_\pi = 0.4\omega_p = \gamma_\sigma$ ،  $m_\pi = m_e = m_\sigma$  و همچنین  $\omega_{r\pi} = 0$  و  $\omega_{\sigma\pi} = 16.2\text{eV}$ .

ذرات با ابعاد کمتر از طول موج (در حدود چند نانومتر)، روش شبه ایستایی حاضر می‌تواند به عنوان یک روش تقریبی خوب مورد استفاده قرار گیرد. این بررسی نشان دهنده توانایی قابل ملاحظه تئوری شبه ایستایی در مطالعات الکترومغناطیسی حوزه نانو اپتیک است.

تئوری ماکسول-گارنت، تابع دی‌الکتریک مؤثر کامپوزیتی از مولکول‌های C<sub>6</sub> محاسبه شد. شکل جدید این تابع در مقایسه با فرمول‌بندی ارائه شده در مرجع [۱۰] به مراتب از کلیت و سادگی بیشتری برخوردار بوده و نتایج کاملاً یکسانی را نیز به دست می‌دهد. باید توجه کرد که برای دیگر سیستم‌ها، نظیر نانو

### مراجع

1. H W Kroto, J R Health, S C O'Brian, R F Curl, and R E Smalley, *Nature* **318** (1985) 162.
2. G F Bertsch, A Bulgac, D Tomanek, Y Wang, *Phys. Rev. Lett.* **67** (1991) 2690.
3. G Barton and C Eberlein, *J. Chem. Phys.* **95** (1991) 1512.
4. M Michalewicz and M P Dos, *Solid State Commun.* **84** (1992) 1121.
5. D Ostling, P Apell, and A Rosen, *Europhys. Lett.* **21** (1993) 539.
6. D Tomanek, *Comments on Atomic and Molecular Physics* **31** (1995) 337.
7. P Long, and S M Bose, *Solid State Commun.* **97** (1996) 857.
8. C Yannouleas, E N Bogachek, and U Landman, *Phys. Rev. B* **53** (1996) 10225.

12. S Raza, W Yan, N Stenger, M Wubs, and N A Mortensen, *Opt. Express* **21** (2013) 27344.
13. G B Smith, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **10** (1977) 39.
14. A Moradi, *Phys. Plasmas* **22** (2015) 042105.
15. D A Gorokhov, R A Suris, and V V Cheianov, *Phys. Lett. A* **223** (1996) 116.
16. C Z Li, Z L Miskovic, F O Goodman, and Y N Wang, *J. Appl. Phys.* **113** (2013) 184301.
9. A Moradi, *Solid State Commun.* **192** (2014) 24.
10. A Moradi, *Phys. Plasmas* **23** (2016) 062120.
۱۱. ن دانش‌فر، ط ناصری و م مرادبیگی، مجله پژوهش فیزیک ایران ۱۸، ۴ (۱۳۹۷) ۶۹۷.
11. N Daneshfar, T Naseri, and M Moradbeigi, *Iranian J. Phys. Res.* **18**, 4 (2019) 697.