

## Design of self-activating light intensity filter based on thermoplasmonics and liquid crystals and simulation of thermal effects caused by localized surface plasmons of different metals

H. Rahimian\*, M. Mohammadimasoudi 

\* Assistant Professor, Imam Hossein University, Tehran, Iran

(Received: 01/05/2023 revised: 08/09/2023 Accepted:28/09/2023 published: 07/11/2023)

DOR: <https://dorl.net/dor/20.1001.1.26455153.1402.11.2.8.1>

### abstract

*Light intensity filters are a new class of optical filters that are needed with the increasing use of lasers in various fields, including medicine and industry. The mechanism of these filters is such that if the light intensity increases beyond a permissible threshold, it is activated and prevents the passage of intense light, which cause casualties in devices and humans. In this report, a new type of these filters is designed based on the heat generated by plasmonic absorption of metal nanoparticles and the use of this heat to disrupt the order of liquid crystal molecules. In addition, the absorption spectra of different metal nanoparticles have been simulated to achieve the appropriate material at each wavelength. Also, the increase in temperature induced in the substrate due to the absorption of nanoparticles is simulated and based on the existing equations, it is ensured that this temperature increase can lead to the rotation of liquid crystal molecules and thus filter the intense incoming light.*

**Keywords:** FDTD, Light intensity filter, Liquid crystal, Lumerical, Thermoplasmonics

<sup>11</sup>Corresponding author E-mail: hrahimian@ihu.ac.ir

## علمی - پژوهشی

## طراحی پالایه شدت نور خود فعال مبتنی بر ترموپلاسمونیک و بلورهای مایع و شبیه‌سازی آثار گرمایی ناشی از پلاسمون‌های سطحی جایگزیده فلزات مختلف

هادی رحیمیان<sup>۱\*</sup>، محمد محمدی مسعودی<sup>۲</sup>

۱-استادیار، دانشگاه جامع امام حسین (ع)، ۲-استادیار، دانشگاه تهران، تهران، ایران

(دریافت: ۱۴۰۲/۰۲/۱۱، بازنگری: ۱۴۰۲/۰۶/۱۷، پذیرش: ۱۴۰۲/۰۷/۰۶، انتشار: ۱۴۰۲/۰۸/۱۶)

DOR: <https://dorl.net/dor/20.1001.1.26455153.1402.11.2.8.1>

\* این مقاله یک مقاله با دسترسی آزاد است که تحت شرایط و ضوابط مجوز (CC BY) Creative Commons Attribution توزیع شده است.



© نویسنندگان

ناشر: دانشگاه جامع امام حسین (ع)

## چکیده

پالایه‌های شدت نور دسته جدیدی از پالایه‌های اپتیکی هستند که با استفاده روزافزون از لیزر در حوزه‌های مختلف از جمله پزشکی و صنعتی لزوم وجود آن‌ها حس می‌شود. سازوکار این پالایه‌ها بدین گونه است که در صورت افزایش شدت نور از یک آستانه مجاز، فعال شده و مانع از عبور نور شدید و در نتیجه صدمه به ادوات و انسان‌ها می‌شوند. در این مقاله نوع جدیدی از این پالایه‌ها طراحی شده است که بر اساس گرمایی ایجاد شده توسط جذب پلاسمونیک نانوذرات فلزی کار می‌کند. این گرما با برهم‌زدن نظم قرارگیری مولکول‌های بلور مایع عملکرد آن را تنظیم می‌کند. علاوه بر این، از طریق شبیه‌سازی طیف جذب نانوذرات مختلف فلزی برای رسیدن به ماده مناسب در هر طول‌موج بررسی شده است. میزان افزایش دمای القا شده به سیستم ناشی از جذب نانوذرات شبیه‌سازی شده و بر اساس روابط موجود، اطمینان حاصل شده که این افزایش دما می‌تواند منجر به چرخش مولکول‌های بلور مایع و در نتیجه پالایش نور شدید ورودی شود.

**کلیدواژه‌ها: ترموپلاسمونیک، دامنه زمانی تفاضل محدود، پالایه شدت نور، بلور مایع، لومریکال.**

## ۱- مقدمه

بدون هیچ تغییری در شدت یا طول‌موج آن عبور می‌کند؛ و در صورت فعال‌شدن پالایه، در یک بازه طول‌موجی معین شدت نور خروجی از پالایه کاهش یافته و یا به صفر نزدیک می‌شود. به‌طور کلی پالایه‌های شدت را می‌توان به سه دسته تقسیم‌بندی نمود:

- ۱) پالایه‌های ساکن<sup>۱</sup>: این پالایه‌ها، بی‌وقفه بخش زیادی از شدت نور لیزر را کاهش می‌دهند. به عبارت دیگر، این پالایه‌ها همواره روشن بوده و در حال پالایش هستند. از معایب این پالایه‌ها کم‌بودن پهنای باند طول‌موجی آن‌ها است.
- ۲) پالایه‌های فعال<sup>۲</sup>: پالایه‌های فعال برخلاف پالایه‌های ساکن، در زمانی که شدت نور خروجی بیشتر از حد آستانه مجاز مدنظر باشد وارد عمل می‌شوند. به عبارت دیگر، در این دسته از پالایه‌ها هر دو حالت خاموش و روشن وجود دارند اما روشن‌شدن پالایه نیازمند به یک راه‌انداز خارجی مانند یک کلید است. برخی از ایرادهای اساسی این پالایه‌ها، سرعت پایین، افزایش

با توجه به گسترش روزافزون استفاده از لیزر در حوزه‌های مختلف نظامی، پزشکی، صنعتی و ... ارتباط انسان‌ها با لیزرها به شدت افزایش یافته است. از طرفی نور شدید لیزر برای سلامتی چشم و پوست انسان و صحت عملکرد حسگرهای اپتیکی و برخی ادوات بسیار مضر است. به طوریکه، تابش مستقیم آن برای یک لحظه می‌تواند منجر به تلفات جبران‌ناپذیری برای چشم و پوست انسان و یا تخریب حسگر شود. از این رو، وجود پالایه‌ای مطمئن و دقیق که مانع از عبور شدت زیاد نور شود، برای حفظ سلامتی انسان‌ها امری ناگزیر و واجب است. پالایه مدنظر در این گزارش که به پالایه شدت نور (همچنین پالایه محافظ لیزر) معروف است، به میزان شدت نور در یک بازه طول‌موجی خاص حساس است. عملکرد این پالایه به این شکل است که در صورت غیرفعال بودن، کل نور ورودی به پالایه

شکل (۱). الف) سازوکار دو نوع پالایه شدت نور خود فعال. ب) زوایای موجود در معادلات مربوط به بلور مایع. ج) نحوه قرارگیری مولکول‌های بلور مایع در ساختار توئیست. د) ساختار طراحی شده برای پالایه شدت نور خود فعال مبتنی بر ترموپلاسمونیک و بلور مایع [۳]

زمانی که سلول بلور مایع با ضخامت مشخص  $d$  بین دو قطب‌بنده عمود بر هم قرار می‌گیرد، شدت نور خروجی با رابطه [۴]:

$$I = \frac{1}{2} \sin^2 2\varphi \sin^2(\Delta n_{eff} \times \pi d / \lambda) \quad (1)$$

محاسبه می‌شود که در آن  $I$  شدت نور خروجی،  $\varphi$  زاویه سمتی (شکل (۱-ب)) و  $\lambda$  طول موج نور ورودی است. همچنین، میزان دوشکستی بلور مایع در دماهای مختلف مطابق رابطه (۲) قابل محاسبه است؛

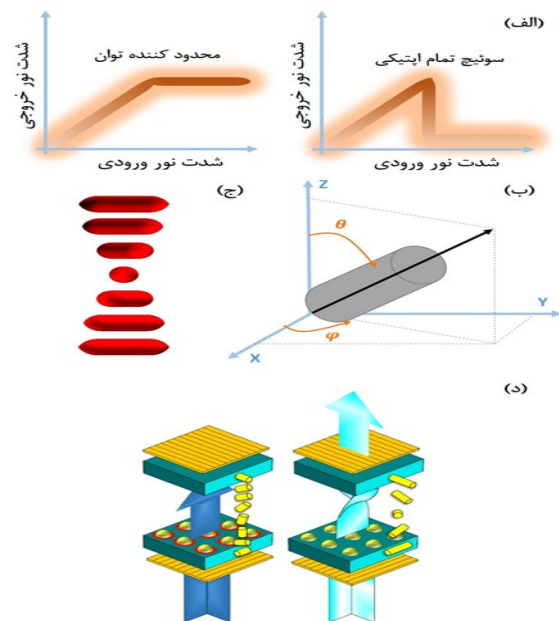
$$\Delta n_{eff}(T) = (\Delta n)_0 \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^\beta \quad (2)$$

که در آن  $(\Delta n)_0$  ضریب دوشکستی بلور مایع در دمای  $0^\circ$  درجه‌ی کلونین،  $\beta$  ثابت ماده،  $T$  دمای محیط و  $T_c$  دمای شفافیت است. به‌منظور استفاده از بلور مایع در ساخت پالایه‌ها، ابتدا یک ساختار  $90^\circ$  درجه‌ای متعامد (توئیست<sup>۳</sup>) از بلور مایع را در سلول ایجاد نموده و سپس سلول را بین دو قطبش‌گر نور عمود برهم قرار می‌دهند. با این کار نور ورودی به سلول ابتدا توسط قطبش‌گر اول به‌صورت خطی قطبیده شده و در حین عبور از سلول توسط ساختار مارپیچ چرخیده و قطبش خطی آن  $90^\circ$  درجه تغییر می‌کند و بدین ترتیب می‌تواند از قطبش‌گر دوم بطور کامل عبور کند. حال اگر شدت نور از آستانه مجاز بالاتر باشد، و به‌طریقی ساختار قرارگیری بلورهای مایع را تغییر دهیم، بخشی از نور ورودی قادر به تغییر قطبش خود در حین عبور از داخل سلول نبوده و در نتیجه از قطبش‌گر دوم عبور نمی‌کند. در نتیجه پالایه مدنظر حاصل می‌شود (شکل (۱-د)). برای تغییر ساختار قرارگیری بلورهای مایع از روش‌های مختلفی استفاده شده است که مرسوم‌ترین آن‌ها استفاده از تحریک پلاسمونیک نانوذرات فلزی و همچنین رنگ‌دانه‌های جاذب است. خو و همکاران که از پیش‌تازان این عرصه هستند مقالات زیادی را با استفاده از بلور مایع و رنگدانه‌ها چاپ کرده‌اند. در این روش که می‌توان گفت محبوب‌ترین و ساده‌ترین روش است، ابتدا ترکیبی بین  $0$  تا  $1$  درصد غلظت از بلور مایع و رنگدانه‌ی مدنظر آماده می‌شود. آستانه آغاز کار پالایه به درصد غلظت ترکیب بستگی دارد. هر رنگدانه یک بازه‌ی جذب مشخصی داشته و با توجه به نیاز، نوع رنگدانه مشخص می‌شود. پس از آماده کردن ترکیب، به کمک رایش<sup>۴</sup> متعامد، ساختار توئیست ایجاد می‌گردد. در این صورت بلورهای مایع و مولکول‌های رنگدانه به‌صورت افقی در درون سلول قرار می‌گیرند. با قرار دادن دو قطبش‌گر متعامد، در

پیچیدگی محصول، نیاز به راه‌انداز خارجی و نیز نیاز به مصرف انرژی است [۱، ۲].

۳) پالایه‌های غیرفعال یا خود فعال‌ساز<sup>۱</sup>: این دسته از پالایه‌ها مناسب‌ترین نوع برای حفاظت از شدت نور لیزر هستند. سازوکار آن‌ها مبتنی بر شدت نور بوده و در صورت فراتر رفتن شدت نور از یک آستانه مجاز تعیین شده، به‌صورت هوشمند فعال شده و مانع از خروج شدت نور غیرمجاز از سیستم می‌شوند. این دسته از پالایه‌ها به دو زیرگروه سوئیچ‌های تمام اپتیکی و محدودکننده‌های توان تقسیم‌بندی می‌شوند که در آن‌ها خروجی پالایه در هنگام فعال‌بودن، به ترتیب خاموشی مطلق و یک نور با شدت ثابت است (شکل ۱-الف). از چالش‌های موجود این روش، پهنای باند طول‌موجی کم و سرعت پاسخ پایین می‌باشد.

بلور مایع به موادی اطلاق می‌شود که خواصی مابین جامدهای بلوری و مایعات دارند. در فاز بلور مایع، مولکول‌ها همانند مولکول‌های مایع، آزادی برای حرکت در جهات خاصی را دارند اما همانند مولکول‌های جامدهای بلوری مقید به حضور در شبکه‌های مشخصی هستند. بلورهای مایع، مواد دوشکستی هستند که با توجه به اینکه از کدام جهت به آن‌ها نگاه کنیم، ضریب شکست متفاوتی از آن‌ها می‌بینیم. یکی از معروف‌ترین و پرکاربردترین ساختارهای بلور مایع، ساختار پیچشی  $90^\circ$  درجه‌ای است. در این ساختار مولکول‌ها از ابتدا تا انتهای ساختار یک چرخش  $90^\circ$  درجه‌ای را ایجاد می‌کنند که این چرخش می‌تواند منجر به تغییر قطبش خطی نور ورودی شود (شکل (۱-ج)) [۳].



1-Passive  
2-Twisted nematic

3-Twist  
4-Rubbing

به صورت رابطه (۳) تعریف می شود که در آن  $|E(r)|^2$  متناسب با شدت نور ورودی بوده

$$q(r) = \frac{\omega}{2} \text{Im}(\epsilon(\omega)) \epsilon_0 |E(r)|^2 \quad (3)$$

و  $\epsilon_0$  و  $\epsilon$  به ترتیب ضریب گذردهی الکتریکی در خلأ و داخل نانوذره هستند.  $\omega$  نیز فرکانس زاویه ای نور ورودی می باشد. همچنین سطح مقطع جذب نانوذره  $\sigma_{abs}$  به صورت رابطه (۴) تعریف می شود:

$$P = \sigma_{abs} I \quad (4)$$

که در آن  $P$  توان نور جذب شده توسط نانوذره و  $I$  شدت نور (در واحد سطح) است. توان  $P$  جذب شده توسط نانوذره با تقریب خوبی برابر با توان تحویلی نانوذره است. سایر مسیرهای تبدیل انرژی، مانند فلورسانس یا تشعشعات حرارتی، به طور کلی ناچیز هستند. یک رابطه ساده بین دو کمیت فیزیکی مهم که در بالا معرفی شده اند وجود دارد که به صورت رابطه (۵) بیان می شود:

$$P = \int q(r) dr = \sigma_{abs} I \quad (5)$$

در رابطه فوق، انتگرال بر روی حجم نانوذره اعمال می شود. برای نانوذرات کوچک، سطح مقطع جذب، متناسب با حجم نانوذره است. تشخیص افزایش دمای واقعی، در آزمایش های پلاسمونیک، به خصوص برای ذرات غیرکروی، یا نانوذرات متعدد در مجاورت نزدیک، یک چالش بزرگ است و پرداختن به این سؤال ساده نیست. با فرض دمای یکنواخت در داخل و سطح نانوذره، می توان توزیع دما را در حالت ساده در محیط اطراف با رابطه (۶) محاسبه نمود:

$$T(r) = \frac{\sigma_{abs} I}{4\pi\kappa_s r} \quad (6)$$

$\kappa_s$  هدایت حرارتی محیط اطراف و  $r$  فاصله شعاعی از نانوکره می باشد. نکته مهم این است که دما در محیط اطراف با نسبت  $\frac{1}{r}$  کاهش می یابد. این توصیف فقط برای یک نانوذره کروی در محیط یکنواخت صادق است. برای نانوذرات غیرکروی، هیچ رابطه مشخصی وجود ندارد و شبیه سازی عددی مورد نیاز است. این نکته بسیار ضروری است که روش های عددی ساده برای تعیین افزایش دما در پلاسمونیک که در پاراگراف های قبلی توضیح داده شد فقط برای یک نانوذره منفرد قابل اطمینان هستند. برای مجموعه ای از نانوذرات، اثرات جمعی حرارتی رخ می دهد که رابطه ای برای محاسبه آنها وجود ندارد. هنگامی که چندین نانوذره به طور همزمان مورد تابش قرار می گیرند، افزایش دما به دلیل تولید گرما، درون یک نانوذره خاص و همچنین از سهم همه نانوذرات دیگر در مجاورت آن است. این سهم دوم می تواند در مقایسه با خود تولید گرما، بسته به هندسه سیستم، غالب باشد.

وضعیت عادی نور از پالایه عبور پیدا می کند. از طرفی در صورت ورود نور شدید در محدوده جذب رنگدانه، مولکول های رنگدانه تغییر وضعیت می دهند که علاوه بر تولید گرما با یک چرخش ۹۰ درجه ای در آنها همراه است. به تبع این چرخش، مولکول های بلور مایع اطراف رنگدانه، می چرخند و نظم افقی آنها برهم می خورد. در نتیجه همان طور که قبلاً مطرح شد، برهم خوردن نظم بلورهای مایع به معنی کاهش نور عبوری از پالایه می باشد. نکته ای حائز اهمیت این است که، هرچقدر شدت نور ورودی بیشتر باشد، میزان جذب، میزان چرخش و برهم خوردگی نظم بیشتر و میزان عبور نور کمتر خواهد بود [۷-۵]. جدول (۱) مقایسه ای از پارامترهای مهم پالایه ها را بین سه روش مرسوم نشان می دهد. طبق جدول بیشینه تابش مجاز، آستانه توان نور لیزر برای آسیب سانی به چشم انسان  $0.5 \mu J/cm^2$  است [۸]. بنابراین، هر سه روش آستانه ای پایین تر از حد مضر را دارند. البته روش رنگدانه، در مرز قرار داشته و ممکن است روش مطمئنی نباشد.

جدول (۱). مقایسه پارامترهای مهم پالایه در سه روش رنگدانه،

ترکیبات شیمیایی و پلاسمونیک [۹]

عبور بدون پالایه	سرعت پاسخ	مواد مورد نیاز	آستانه توان	روش
۷۰٪	میکرو-ثانیه تا نانو ثانیه	در دسترس	۰/۱ $\mu J/cm^2$	بلور مایع + رنگدانه
۶۰٪	نامشخص	نیاز به بررسی	۶/۷ $pJ/cm^2$	ترکیبات شیمیایی پلیمری
۶۰٪	میلی ثانیه	در دسترس	۰/۰۶ $\mu J/cm^2$	پلاسمونیک در نانوذرات فلزی

حدود یک دهه است که فرایندهای فتوترمال در نانوذرات پلاسمونیک مورد بررسی قرار گرفته و زمینه علم ترموپلاسمونیک را ایجاد کرده است. تحت تابش نور، نانوذرات پلاسمونیک به دلیل جذب نور در فلز به عنوان منبع تولید گرما عمل می کنند. این فرایند به طور طبیعی در طول موج تشدید پلاسمونیک افزایش می یابد و می تواند تحت شرایطی، قوی تر بشود. تولید گرما در یک نانوذره فلزی تحت تابش نور از اثر ژول ناشی می شود. فرض کنید  $q(r)$  چگالی منبع گرما در داخل نانوذره باشد، در این صورت رابطه چگالی منبع گرما به عنوان تابعی از دامنه میدان الکتریکی در داخل نانوذره،

جذبی نانوذرات فلزی با جنس، تعداد، ضخامت، ساختار و ضریب شکست محیط اطراف متفاوت بررسی شده و نتایج آن با نتایج اندازه‌گیری‌های تجربی مقایسه شده است. سپس میزان افزایش دمای القا شده به زیرلایه ناشی از جذب نانوذرات شبیه‌سازی شده و بر اساس روابط موجود، اطمینان حاصل شده که این افزایش دما می‌تواند منجر به چرخش مولکول‌های بلور مایع و در نتیجه پالایش نور شدید ورودی شود.

## ۲- روش تحقیق

به منظور اطمینان از نتایج شبیه‌سازی، عیب‌یابی و رفع چالش‌های موجود در شبیه‌سازی، از مراجع معتبر مختلفی از جمله وبسایت نرم‌افزار لومریکال، پایان‌نامه‌های دکتری و مقالات استفاده شده است [۱۱-۱۴]. ساده‌ترین روش برای ایجاد نانوذرات فلزی استفاده از دستگاه لایه‌نشانی پاششی می‌باشد. پس از لایه‌نشانی، لایه‌ای با ضخامت نانومتری از فلز مدنظر بر روی زیرلایه نشانده شده و با قرار دادن نمونه در کوره برای بازپخت، نانوجزایر نمایان می‌شوند. عیب این روش نداشتن کنترل دقیق بر روی ساختار و نحوه شکل‌گیری نانوجزایر است که منجر به دشوارتر شدن روند شبیه‌سازی می‌شود. برای مثال، شکل ۲-الف طرحواره سه بعدی از یک نمونه‌ی نانوجزایر طلا را نمایش می‌دهد که مطابق تصاویری است که توسط میکروسکوپ‌های الکترونی تصویربرداری شده است [۱۵]. همان‌طور که مشاهده می‌شود، قطر، محل قرارگیری و ارتفاع نانوجزایر کاملاً تصادفی هستند. از آنجایی که جذب پلاسمونی به موارد بیان شده بسیار حساس است، باید یک وحدت رویه در انجام شبیه‌سازی‌ها وجود داشته باشد. در مراجع به منظور دستیابی به یک مدل جامع برای شبیه‌سازی نانوجزایر ایجاد شده به روش فوق، یک روش پیشنهاد شده است. در این روش، داده‌های حاصل از اندازه‌گیری‌های واقعی را از منابع مختلف جمع‌آوری و پردازش کرده و به یک سری روابط برای داشتن تقریب بهتر از پارامترهای تأثیرگذار نانوجزایر در شبیه‌سازی دست یافته‌اند. ما نیز با استناد به همین مراجع معتبر، کار شبیه‌سازی را پیش برده‌ایم. همان‌طور که در شکل ۲-ب مشاهده می‌شود، در هنگام لایه‌نشانی و شکل‌دهی نانوجزایر، چند پارامتر مهم وجود دارند؛ که مهم‌ترین آن‌ها قطر نانوجزیره (D)، ارتفاع آن (h) و چگالی تعداد آن (N) هستند. روابط (۷) الی (۹) به ترتیب میانگین قطر، ارتفاع و چگالی تعداد نانوجزایر بر واحد سطح را به صورت تابعی از ضخامت اولیه لایه نشانی شده (t) می‌دهند که با داشتن ضخامت لایه‌نشانی می‌توان با تقریب خوبی مقادیر آن‌ها را بدست آورده و شبیه‌سازی مطمئن‌تری را ارائه داد:

یکی از چالش‌های اولیه روش مبتنی بر جذب پلاسمونیک، انتخاب فلز، ساختار و ضخامت بهینه برای رسیدن به پالایه ایدئال می‌باشد. ماده باید اولاً جذب پلاسمونیک معقولی داشته باشد و ثانیاً ناحیه طول موجی جذب آن در محدوده دلخواه باشد. علاوه بر این، ساختار باید علی‌رغم داشتن جذب پلاسمونیک بالا، روش ساخت آسان و به صرفه‌ای نیز داشته باشد. از طرفی، ضخامت لایه باید به گونه‌ای بهینه شود که علاوه بر داشتن میزان جذب بالا، میزان عبور اپتیکی قابل قبولی هم داشته باشد تا باعث تضعیف دید نشود. همچنین روش‌های اندازه‌گیری تجربی برای سنجش افزایش دمای القا شده به ساختار، بسیار سخت و پرهزینه هستند. از این رو نیاز مبرمی به یک شبیه‌سازی اصولی، منطقی و مبتنی بر واقعیت داریم تا در زمان و هزینه‌ها صرفه‌جویی قابل توجهی شود. از آنجایی که شبیه‌سازی اثر ترموپلاسمونیک نیازمند حل معادلات ماکسول در ابعاد نانومتر می‌باشد، بهترین ابزار شبیه‌سازی، روش دامنه زمانی تفاضل محدود (FDTD) می‌باشد. نرم‌افزار لومریکال به دلیل داشتن ماژول FDTD، توانایی حل معادلات ماکسول در ابعاد زیر نانومتری، داشتن کتابخانه و محیط تبادل نظر جامع و همچنین داشتن ماژول گرما برای شبیه‌سازی این اثر، بهترین گزینه می‌باشد [۱۰].

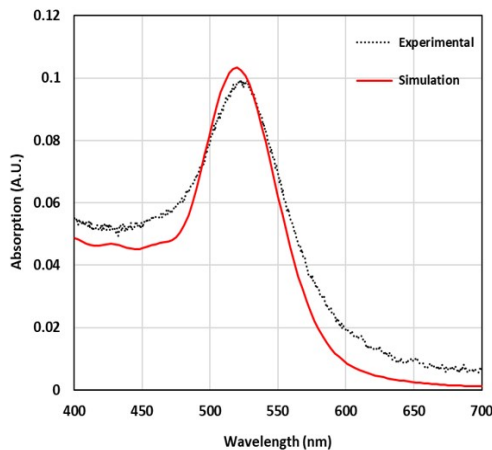
در این مقاله با کمک ترموپلاسمونیک و بلورهای مایع پالایه شدت نور خود فعالی طراحی شده است که تا به حال مشابه آن گزارشی نشده است؛ و همچنین شبیه‌سازی آثار گرمایی حاصل از جذب پلاسمونی نانوذرات فلزی مختلف آورده شده است. از آنجایی که اندازه‌گیری مستقیم افزایش دمای القا شده به سیستم غیرممکن و اندازه‌گیری غیرمستقیم آن پر چالش می‌باشد، ارزش این شبیه‌سازی بسیار زیاد می‌شود. طراحی این پالایه بدین صورت است که همانند شکل (۱-د) دو قطبش‌گر خطی نور به صورت عمود بر هم<sup>۱</sup> در دو طرف سلول قرار دارند. سپس دو زیرلایه شیشه‌ای با جهت تابش عمود برهم آماده شده و مولکول‌های بلور مایع، در بین دو زیرلایه به صورت توئیس قرار می‌گیرند. در صورتی که شدت نور ورودی از آستانه مجاز کمتر باشد، مولکول‌های بلور مایع تغییری نکرده و ساختار اولیه خود را حفظ می‌کنند. قطبش‌گر حاضر در ورودی پالایه، اجازه عبور تک قطبش خطی نور را داده و مابقی قطبش‌ها را جذب می‌کند. مولکول‌های بلور مایع قطبش نور را ۹۰ درجه می‌چرخانند تا نور بتواند از قطبش‌گر دوم خارج شود. در صورت بالاتر بودن شدت نور ورودی از آستانه مجاز، بخشی از نور جذب شده و نانوذرات فلزی تولید گرما می‌کنند که همین گرما باعث تغییر ساختار قرارگیری مولکول‌ها و برهم‌زدن ساختار توئیس

می‌شود. در این صورت نور قطبیده ورودی به سلول هیچ تغییری را تجربه نکرده و توسط قطبش‌گر دوم متوقف می‌شود؛ در نتیجه هیچ نوری در خروجی نداریم. در فاز شبیه‌سازی این پژوهش، ابتدا طیف

طیف جذب نانوذره فلزی از جنس طلا ارائه شده است. همان طور که ملاحظه می شود تطابق قابل قبولی بین شبیه سازی و عمل وجود دارد که نشان از قابلیت اطمینان و صحیح بودن نتایج شبیه سازی است.

یکی از مهم ترین عوامل تأثیرگذار در محل و اندازه قله جذب پلاسمونیک، مقدار ضریب شکست محیط اطراف نانوذره است. به منظور صحت سنجی و افزایش دقت و تطابق شبیه سازی با تجربه، میزان جذب در حضور ضرایب شکست مختلفی مورد بررسی قرار گرفت که نتایج آن در شکل (۴- الف) ارائه شده است. منحنی زرد رنگ (E7) متناظر با مقدار ضریب شکست میانگین محیط بلور مایع است که از رابطه (۱۰) محاسبه می شود [۱۶].

$$n_{avg} = \frac{1}{3} n_e + \frac{2}{3} n_o = 1.5837 \quad (10)$$



شکل (۳). مقایسه ی نتایج شبیه سازی و اندازه گیری تجربی طیف جذب نانوجزایر طلا

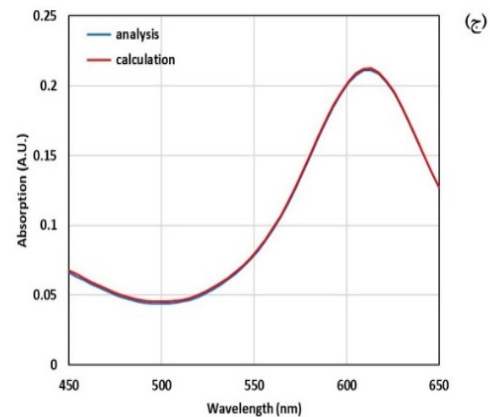
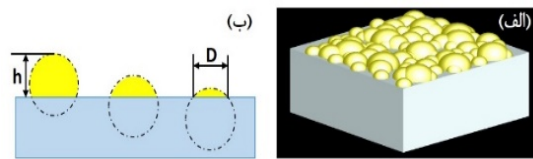
در گام بعدی تأثیر هندسه و شکل نانوذره طلا بر روی قله جذب پلاسمونیک آن مورد بررسی قرار گرفته است. مطابق شکل (۴- ب) چهار ساختار مختلف دو نیمکره مماس برهم، تک نیمکره، استوانه و دو نیمکره درهم فرورفته همگی با ضخامت یکسان شبیه سازی شد. مطابق انتظار هر کدام دارای طول موج قله و میزان جذب متفاوتی هستند. در ادامه تمامی نتایج این گزارش بر مبنای شبیه سازی تک نیمکره آورده شده اند. از این رو با در نظر گرفتن شکل ثابت و تغییر ماده فلزی سعی بر به دست آوردن محدوده جذب پلاسمونیک بعضی از فلزات شده است (شکل (۵)) [۱۷, ۱۸]. یکی دیگر از عوامل بررسی شده در شبیه سازی، تعداد نانوجزایر در نظر گرفته شده می باشد. این عامل تأثیر اندکی بر روی طول موج قله جذب داشته و بیشتر تأثیر آن بر شدت جذب پلاسمونیک است که البته تأثیر گرمایی آن هم در

$$D(t) = 0.2407t^2 + 3.7928t + 0.1938 \text{ (nm)} \quad (7)$$

$$h(t) = 0.9266t + 1.731 \text{ (nm)} \quad (8)$$

$$N(t) = 0.9266t^{-1.8719} \text{ (\mu m}^{-2}\text{)} \quad (9)$$

در ماژول FDTD نرم افزار لومریکال دو روش برای محاسبه جذب نوری مواد وجود دارد. راه اول استفاده از مانیتورهای عبور (T) و بازتاب (R) و محاسبه میزان جذب به صورت  $A=1-R-T$  و راه دوم استفاده مستقیم از بخش آنالیز جذب موجود در نرم افزار است. مطابق شکل (۲- ج)، خروجی حاصل از هر دو روش کاملاً منطبق هستند که نشان از درست بودن ساختار شبیه سازی است.

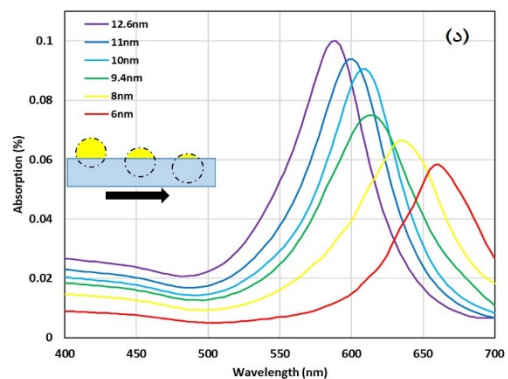
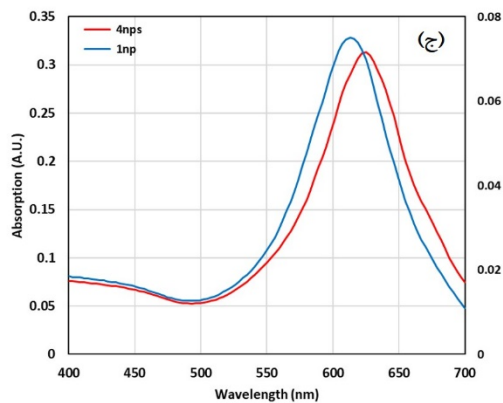
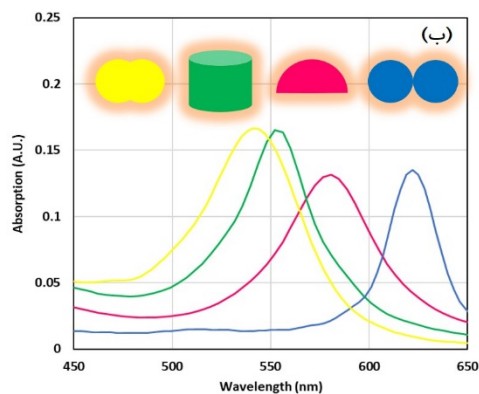
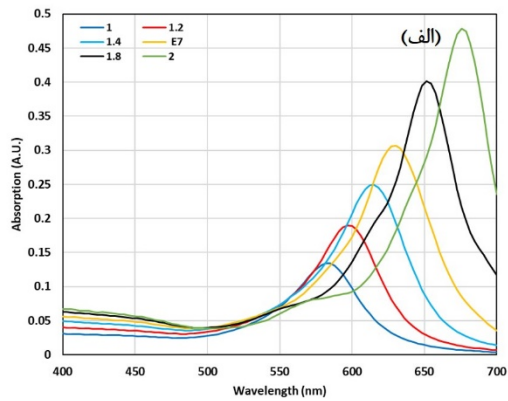


شکل (۲). (الف) طرحواره سه بعدی از یک نمونه ی نانوجزایر طلا. (ب) پارامترهای تأثیرگذار در قله طول موجی جذب نانوجزایر. (ج) مقایسه ی طیف جذبی دو روش مختلف در نرم افزار لومریکال

بعد از به دست آوردن طیف جذب نانو جزایر فلزی با استفاده از ماژول HEAT نرم افزار لومریکال و انتقال داده های جذب نانو جزایر به این ماژول، میزان دمای سطح زیرلایه در شرایط مختلف شبیه سازی شده است. برای انتقال درست داده ها از ماژول FDTD به ماژول HEAT با استناد به وبسایت نرم افزار لومریکال، نیاز به کالیبره کردن مقدار جذب است که انجام شد.

### ۳- نتایج و بحث

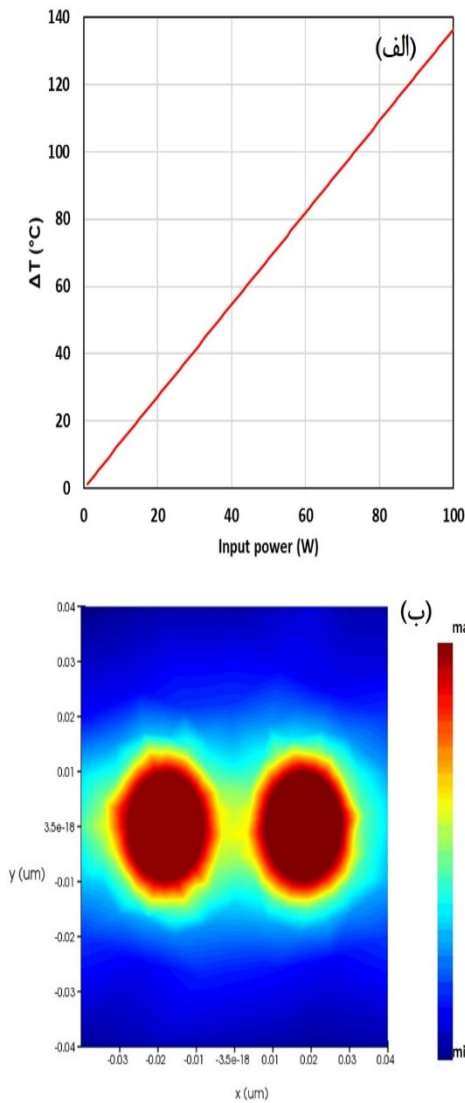
برای حصول اطمینان از صحت نتایج شبیه سازی، ابتدا یک نمونه از نانوجزایر طلا ساخته شده و طیف جذب آن اندازه گیری شد. پس از بررسی ساختارهای مختلف، ساختار حاوی دو نیمکره درهم فرورفته بیشترین تطابق را با نتایج اندازه گیری تجربی داشت. در شکل (۳) مقایسه شبیه سازی و اندازه گیری تجربی



بخش اثرات جمعی حرارتی بحث شد. در شکل (۴-ج) طیف جذبی حاصل از یک و چهار نانوجزیره طلا پس از همسان‌سازی میزان جذبشان ارائه شده است. در شکل (۴-د) نیز نتایج شبیه‌سازی طیف جذبی کره‌ای با قطر ۲۵ نانومتر ارائه شده که قسمتی آن در داخل زیر لایه قرار داشته و به تدریج درصد بیشتری از آن را در داخل زیر لایه غرق گردیده است. اعداد نوشته شده در نمودار، میزان ارتفاعی از کره هستند که در خارج از زیر لایه باقی مانده‌اند.

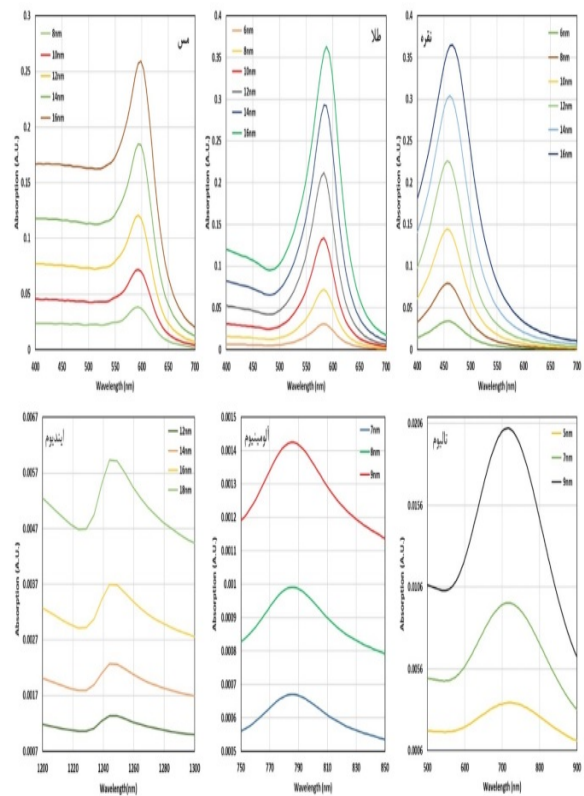
شکل (۴). شبیه‌سازی تاثیر (الف) ضریب شکست محیط، (ب) ساختار نانوجزیره، (ج) تعداد نانوجزیره شبیه‌سازی شده و (د) میزان فرورفتگی نانونیم‌کره‌های فلزی در زیر لایه بر محل جذب نانوذرات

میزان افزایش دما برای نور ورودی با قطر لکه‌ی ۲ میلی‌متر به ازای طول‌موج‌های مختلف آورده شده است. مطابق انتظار در طول‌موج‌هایی که میزان جذب بیشتر است، میزان افزایش دما نیز بیشتر می‌باشد. نمودار شکل (۷-ب) افزایش دمای زیرلایه به ازای قطر لکه‌های مختلف نور ورودی از ۱ تا ۱۰ میلی‌متر را نشان می‌دهد. در شکل (۷-ج) میزان افزایش دما برای مواد مختلف در طول‌موج قله جذب آن‌ها به ازای دو توان ورودی ۱ و ۱۰ وات ارائه شده است. از آنجایی که برای جذب در طول‌موج‌های مختلف سراغ مواد متفاوتی می‌رویم، این نمودار بسیار مهم است. زیرا این نمودار، بیانگر این امر است که آیا افزایش دمای ایجاد شده منجر به ایجاد بی‌نظمی در بلور مایع خواهد شد یا خیر.



شکل (۶). (الف) نمودار افزایش دمای سطح زیرلایه نسبت به دمای اتاق (۳۰۰ درجه کلوین) بر حسب افزایش توان نور تکفام ورودی از ۱ تا ۱۰۰ وات با قطر لکه‌ی نور ۷ میلی‌متر. (ب) نمودار دمای سطح زیرلایه برای دو نانوجزیره

با استفاده از روابط و مفاهیم قسمت‌های گذشته و با توجه به شکل (۱-د) که طرح‌واره‌ای از محصول نهایی مدنظر است به این نتیجه می‌رسیم، در صورتی که گرمای تولیدی به سبب جذب نور ورودی توسط نانوذرات فلزی (ترموپلاسمونیک) به اندازه‌ای باشد که نظم قرارگیری مولکول‌های بلور مایع را کاهش دهد (نزدیک به دمای شفافیت)، شدت نور خروجی به صفر میل می‌کند که این امر دقیقاً هدف پالایه‌های شدت خودفعال است. به عبارت دیگر، هرچه شدت نور ورودی بیشتر باشد، میزان جذب پلاسمونیکی آن و در نتیجه میزان دمای تولیدی حاصل از آن بیشتر می‌شود. هرچه دما بالاتر باشد، میزان بی‌نظمی بلور مایع افزایش یافته و هرچه ماده به مایع همسانگرد نزدیک‌تر باشد، توان آن برای تغییر قطبش نور کاهش یافته و در نتیجه نور کمتری از قطبش‌گر دوم خارج می‌شود و نور ورودی به صورت خودفعال پالایش می‌شود.



شکل (۵). شبیه‌سازی طیف جذب نانوذرات فلزی با ضخامت‌های مختلف از جنس نقره، طلا، مس، تالیوم، آلمینیوم و ایندیوم.

در شکل (۶-الف) نمودار افزایش دمای سطح زیرلایه نسبت به دمای اتاق (۳۰۰ درجه کلوین) بر حسب افزایش توان نور تکفام ورودی از ۱ تا ۱۰۰ وات با قطر لکه‌ی نور ۷ میلی‌متر ارائه شده است. شکل (۶-ب) هم نمودار توزیع سطحی دمای زیرلایه برای دو نانوجزیره را نشان می‌دهد.

دو عامل تأثیرگذار دیگر در میزان افزایش دمای حاصل شده، طول‌موج و قطر لکه‌ی نور ورودی هستند. در شکل (۷-الف)



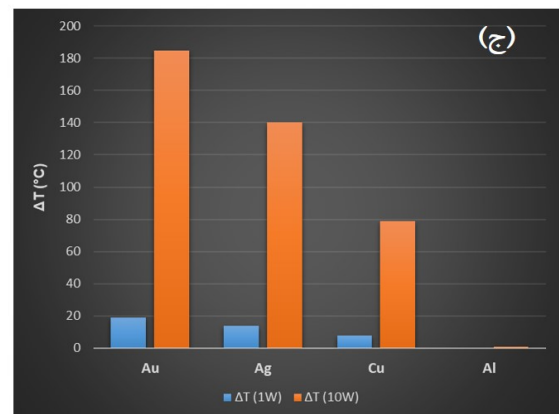
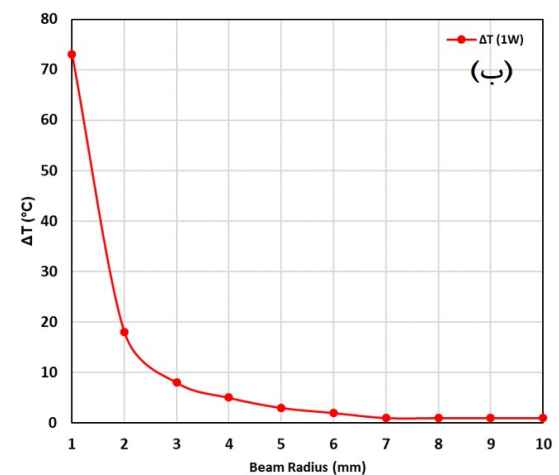
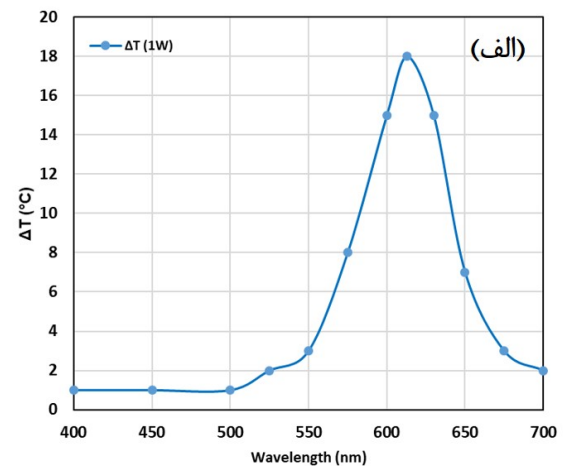
خودفعال پرداخته شد. پس از معرفی کلیت موضوع و لزوم طراحی و ساخت پالایه‌های خودفعال، مروری بر بلورهای مایع به‌عنوان نامزد اصلی ساخت این پالایه‌ها انجام شد. سپس روش‌های مختلف روز دنیا برای کنترل شدت نور مورد بررسی قرار گرفت و دسته‌بندی هدفمندی بر روی آن‌ها انجام شد. در ادامه انواع پالایه‌های شدت خودفعال معرفی شده و توضیحاتی در مورد سازوکار هر کدام داده شد. در بخش بعدی معادلات فیزیکی و روابط ریاضی مربوط به پلاسمونیک معرفی شد. در فاز شبیه‌سازی از روش FDTD برای حل عددی معادلات ماکسول استفاده شد و پس از توضیح معادلات ریاضی لازم برای شبیه‌سازی، نرم‌افزار لومریکال به دلیل بهره‌مندی از هر دو ماژول FDTD و HEAT و رابط کاربری مناسب، انتخاب شد. طیف جذب نانوذرات فلزی مختلف و همچنین افزایش دمای حاصل شده به سبب جذب نانوذرات تحت تابش نور شدید دو خروجی اصلی شبیه‌سازی بودند. با مطالعه مقالات و کتب معتبر علمی، نتایج شبیه‌سازی عیب‌یابی شده و خروجی‌های شبیه‌سازی پس از رفع نواقص تطابق بسیار زیادی با نتایج اندازه‌گیری‌های تجربی پیدا کردند.

البته ابهاماتی هم وجود دارند که نیاز به مطالعه بیشتر دارند و فعلاً با شبیه‌سازی قادر به پاسخگویی به آن‌ها نیستیم. این ابهامات عبارت‌اند از:

- (۱) چگونگی ایجاد ساختار توئیسیت با وجود نانوجزایر
- (۲) زمان پاسخ پالایه شدت خودفعال
- (۳) میزان کاهش دید در حالت خاموش بودن پالایه

## ۵- مراجع

- [1] F. Peng, Y.-H. Lee, Z. Luo, and S.-T. Wu, "Low voltage blue phase liquid crystal for spatial light modulators," *Opt. Lett.*, vol. 40, no. 21, pp. 5097-5100, 2015, <https://doi.org/10.1364/OL.40.005097>
- [2] F. Peng, D. Xu, H. Chen, and S.-T. Wu, "Low voltage polymer network liquid crystal for infrared spatial light modulators," *Opt. Express*, vol. 23, no. 3, pp. 2361-2368, 2015. <https://doi.org/10.1364/OE.23.002361>
- [3] L. Wang, "Self-activating liquid crystal devices for smart laser protection," *Liq. Cryst.*, vol. 43, no. 13-15, pp. 2062-2078, 2016. <https://doi.org/10.1080/02678292.2016.1196506>
- [4] P. Popov, E. K. Mann, and A. Jákli, "Thermotropic liquid crystal films for biosensors and beyond," *J. Mat. Chem. B*, vol. 5, no. 26, pp. 5061-5078, 2017. <https://doi.org/10.1039/C7TB00809K>
- [5] I. Khoo, J.-H. Park, and J. Liou, "All-optical switching of continuous wave, microsecond



شکل (۷). (الف) میزان افزایش دما برای نور ورودی با قطر لکه ۲ میلی‌متر و توان ۱ وات به ازای طول‌موج‌های مختلف. (ب) افزایش دمای زیرپالایه به ازای قطر لکه‌های مختلف نور ورودی از ۱ تا ۱۰ میلی‌متر. (ج) میزان افزایش دما برای مواد مختلف در محل پیک جذب آن‌ها به ازای دو توان ورودی ۱ و ۱۰ وات

## ۴- نتیجه‌گیری

در این مقاله به بررسی و شبیه‌سازی اثر گرمایی پلاسمون‌های سطحی جایگزیده نانوذرات مختلف فلزی در پالایه‌های شدت

- [17] C. Langhammer, M. Schwind, B. Kasemo, and I. Zoric, "Localized surface plasmon resonances in aluminum nanodisks," *Nano lett*, vol. 8, no. 5, pp. 1461-1471, 2008  
<https://doi.org/10.1021/nl080453i>.
- [18] H. S. Noh, E. H. Cho, H. M. Kim, Y. D. Han, and J. Joo, "Organic solar cells using plasmonics of Ag nanoprisms," *Org. Electron*, vol. 14, no. 1, pp. 278-285, 2013  
<https://doi.org/10.1016/j.orgel.2012.10.040>.
- lasers with a dye-doped nematic liquid crystal," *App. phys. lett*, vol. 90, no. 15, p. 151107, 2007.  
<https://doi.org/10.1063/1.2721361>
- [6] I. Khoo, J. Liou, and M. Stinger, "Microseconds–nanoseconds all-optical switching of visible–near infrared (0.5  $\mu\text{m}$ –1.55  $\mu\text{m}$ ) lasers with dye-doped nematic liquid crystals," *Mol. Cryst. Liq. Cryst*, vol. 527, no. 1, pp. 109/[265]-118/[274], 2010.  
<https://doi.org/10.1080/15421406.2010.486708>
- [7] I. Khoo, J. Liou, M. Stinger, and S. Zhao, "Ultrafast all-optical switching with transparent and absorptive nematic liquid crystals–Implications in tunable metamaterials," *Mol. Cryst. Liq. Cryst*, vol. 543, no. 1, pp. 151/[917]-159/[925], 2011.  
<https://doi.org/10.1080/15421406.2011.569456>
- [8] "Laser Safety Manual." University of California. [https://ehs.ucmerced.edu/sites/ehs.ucmerced.edu/files/documents/laser-safety/laser\\_safety\\_manual.pdf](https://ehs.ucmerced.edu/sites/ehs.ucmerced.edu/files/documents/laser-safety/laser_safety_manual.pdf) (accessed).
- [9] C. Hege, O. Muller, and L. Merlat, "Laser protection with optical limiting by combination of polymers with dyes," *J. Appl. Polym. Sci*, vol. 136, no. 10, p. 47150, 2019. <https://doi.org/10.1002/app.47150>
- [10] D. M. Sullivan, *Electromagnetic simulation using the FDTD method*. John Wiley & Sons, 2013.
- [11] <https://support.lumerical.com/hc/en-us/articles/360043164534-Plasmonics-list-of-examples> (accessed).
- [12] H. Mehrzad, F. Habibimoghaddam, E. Mohajerani, and M. Mohammadimasoudi, "Accurate quantification of photothermal heat originating from a plasmonic metasurface," *Opt. Lett*, vol. 45, no. 8, pp. 2355-2358, 2020.  
<https://doi.org/10.1364/OL.387789>
- [13] A. Axelevitch, B. Apter, and G. Golan, "Simulation and experimental investigation of optical transparency in gold island films," *Opt. express*, vol. 21, no. 4, pp. 4126-4138, 2013.  
<https://doi.org/10.1364/OE.21.004126>
- [14] S. O. Sh. Motevasel, M. Seifouri, "Investigation and Numerical Analysis of the Effect of Size, Distance, Position, and Composition of Plasmonic Nanostructures on the Absorption of Perovskite Solar Cells," *J. Appl. Electromagn*, vol. 8, no. 23, 2020, 20.1001.1.26455153.1399.8.2.6.8.
- [15] I. Doron-Mor, Z. Barkay, N. Filip-Granit, A. Vaskevich, and I. Rubinstein, "Ultrathin gold island films on silanized glass. Morphology and optical properties," *Chem. Mater*, vol. 16, no. 18, pp. 3476-3483, 2004.  
<https://doi.org/10.1021/cm049605a>
- [16] V. Jirón and E. Castellón, "The experimental average refractive index of liquid crystals and its prediction from the anisotropic indices," *PCCP*, vol. 24, no. 13, pp. 7788-7796, 2022  
<https://doi.org/10.1039/D1CP04065K>.

