

芯帽纳米颗粒的光热性质

洪昕 王晨晨 刘江涛 王晓强 尹雪洁

Photothermal properties of core-capped gold nanoparticles

Hong Xin Wang Chen-Chen Liu Jiang-Tao Wang Xiao-Qiang Yin Xue-Jie

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 67, 195202 (2018) DOI: 10.7498/aps.67.20180909

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20180909>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I19>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

不同晶面银纳米晶高温熔化的各向异性

Anisotropy of melting of Ag nanocrystal with different crystallographic planes at high temperature

物理学报.2015, 64(10): 106101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.106101>

单一晶相氧化锰纳米颗粒的交换偏置效应

Exchange bias effect in single crystalline phase MnO nanoparticles

物理学报.2013, 62(17): 176102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.176102>

飞秒激光低压 N₂ 等离子体特性的实验研究

Experimental study on the behaviors of femtosecond-laser-induced low-pressure N₂ plasma

物理学报.2013, 62(4): 045201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.045201>

圆筒电极对离子磁电加热的影响

Effect of cylinder-electrode on magnetoelectric heating of ions

物理学报.2013, 62(1): 015202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.015202>

离子束修形中光学元件表面热量沉积数值模拟

Numerical simulation on the thermal deposition of optical surface irradiated by low energy ion beam in ion beam figuring

物理学报.2012, 61(22): 225201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.225201>

芯帽纳米颗粒的光热性质*

洪昕[†] 王晨晨 刘江涛 王晓强 尹雪洁

(大连理工大学电子信息与电气工程学部生物医学工程学院, 大连 116024)

(2018年5月7日收到; 2018年7月14日收到修改稿)

贵金属纳米结构中的光热效应在肿瘤光热治疗、光热成像、纳米药物等领域具有重要的应用价值. 各向异性的芯帽纳米结构以其丰富的可调结构参数和对激发光偏振态敏感的特性, 可灵活地在近红外波段获得理想的光学吸收性质, 从而可以实现温度的高效调节. 本文基于有限元方法研究了颗粒物纳米结构参数对其光热效果的作用规律, 数值结果表明: 通过对结构参数的微量改变(包括金壳厚度、芯壳比、芯径、金属表面覆盖率等)可实现温度的显著调整; 在偏振态的旋转范围(30° — 70°)内可快速地产生大温变光热的准线性调整. 其不弱于纳米芯壳和纳米棒结构的光热性能可为纳米光热生医研究提供一种新的选择.

关键词: 局域表面等离子体共振, 芯帽结构, 光热性质, 偏振态

PACS: 52.25.Tx, 52.50.-b, 61.46.Df, 13.88.+e

DOI: 10.7498/aps.67.20180909

1 引言

贵金属纳米颗粒因存在局域表面等离子体共振模式(localized surface plasmon resonance, LSPR) [1–3] 而表现出强烈的光学散射和吸收特性 [4], 其吸收截面比传统的光敏剂靛青绿大6个数量级 [5], 并可以将吸收的光能转化为热能, 产生丰富的热力学效应, 如消融、超速加热、热膨胀、表面熔化和再成形等, 这些效应使得贵金属纳米颗粒在纳米生物医疗领域具有重要的研究价值和应用潜力, 例如光热成像 [6,7]、纳米药物传递 [8,9]、光热诊疗等 [10–13]. 在这些应用中, 一个关键的问题是如何高效地调节金属纳米颗粒的温度.

将贵金属纳米颗粒应用到生物体的一个主要障碍来自水, 为了避开水的吸收峰, 通常采用700—1200 nm波段作为光学测量窗口 [14], 这就要求将金属纳米颗粒的吸收峰调节到近红外波段. 贵金属纳米颗粒的LSPR强烈依赖于颗粒的尺寸、形状、粒子间距和周围介电环境, 这在生物传感方面已经得到了较多研究和应用, 例如通过抗原-抗体的生物反应可引起多个贵金属颗粒的团聚, 使得其

LSPR吸收峰发生大幅度红移, 但是若想把单个颗粒物的吸收峰大幅度移动到近红外波段却并非易事. 例如直径为20 nm的实心金球, 其峰值LSPR波长约为514 nm, 当粒子的直径增加到150 nm时, 其LSPR峰红移到约570 nm. 粒子的直径增加了7.5倍, 但是吸收峰值仍远难以达到近红外; 且随着粒子直径的加大, 粒子的消光性能已从吸收占优转变为散射占优. 为了获得近红外波段的高效吸收, 单纯地通过扩增结构单一的实心球的粒径已难以满足要求, 使得研究的注意力转向了粒子的结构. 如何通过结构参数的微量改变实现吸收峰的大范围红移得到了大量的关注和研究, 学者们通过改变结构相继研制了纳米壳 [15]、纳米棒 [16]、纳米星 [17]、纳米旗 [18]、纳米立方体等 [19] 结构, 实现了近红外光谱范围的峰值调节. 在这些粒子中各向异性结构的光学性质更为独特, 例如已获得较多研究的纳米棒, 相对于纳米芯壳结构粒子, 这种粒子不仅可以实现大范围吸收波长红移, 而且表现出强烈的偏振态选择性: 当激发光的偏振态在平行于棒的长轴和短轴时粒子展现出不同的光学响应 [20]. 各向异性的纳米芯帽结构也具有强烈的偏振态依赖性

* 国家自然科学基金(批准号: 31271064)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: hongxin@dlut.edu.cn

质 [21,22], 在入射光的偏振态垂直 (90°) / 平行 (0°) 于其对称轴时分别表现出不同的吸收特性, 在 90° 时可实现大范围红移, 且其吸收截面相对 0° 时可产生两个数量级的增强. 相对于纳米棒, 芯帽粒子可进行人工调节的结构参数更为丰富, 可在近红外波段灵活地操控其吸收谱线. 芯帽粒子组成的阵列结构用于生物传感已经得到了较多研究 [23,24]. 随着纳米级物体成像技术的发展, 单个颗粒作为光热探针具有很好的应用潜力. 目前, 实心球形、金纳米棒的光热性质已有研究 [25], 但是芯帽结构的光热性质尚未见相关报道.

贵金属纳米颗粒温度的增加不仅依赖于颗粒的吸收截面积, 而且取决于粒子的结构、周围介质的热导率、入射光的波长和辐照度等因素. 吸收特性与结构参数共同决定了颗粒物的光热性质, 芯帽结构粒子良好的近红外吸收对于光热的转换效率将取决于结构参数. 经典的颗粒物光解析公式是以结构单一的实心球形粒子为模型建立的, 对于结构复杂各向异性的纳米颗粒, 该光热公式已不再适用 [26]. 为此, 本文基于有限元法利用 COMSOL 软件用数值分析的方法研究芯帽结构的光热性质随结构参数的变化规律; 计算了 SiO₂@Au 纳米芯帽颗粒的光热性质, 获取了吸收功率和温度随纳米结构参数 (包括金壳厚度、芯壳比、芯径、金属表面覆盖率等) 的变化规律, 可为光热粒子的结构筛选提供数值依据; 并对球形纳米颗粒、芯壳纳米颗粒、芯帽纳米颗粒以及金纳米棒这四种纳米结构的光热性质进行了比较. 本文研究的芯帽纳米颗粒的光热耦合性质在光热诊疗领域有重要的理论和应用价值.

2 计算与方法

2.1 金属纳米颗粒光热性质的计算

在 LSPR 波长激光照射下, 金属纳米颗粒具有增强的光吸收, 因此可以将其作为理想的纳米热源, 通过光控制纳米颗粒的温度.

金属纳米颗粒的光吸收功率 P 可以用吸收截面 σ_{abs} 表示:

$$P = \sigma_{\text{abs}} I, \quad (1)$$

这里, I 是入射光的强度.

金属纳米颗粒热量的产生也可以通过对整个

颗粒的热功率密度 $q(r)$ 做体积积分得到, 即

$$P = \int_V q(r) dv. \quad (2)$$

金属纳米颗粒内部和外部的稳态温度分布 $T(r)$ 是基于热扩散方程的解, 即

$$\nabla \cdot [\kappa(r) \nabla T(r)] = -q(r) \quad \text{颗粒内部}, \quad (3)$$

$$\nabla \cdot [\kappa(r) \nabla T(r)] = 0 \quad \text{颗粒外部}, \quad (4)$$

其中, $\kappa(r)$ 为热导率. 特别地, 对于半径为 R 的球形纳米颗粒, 其温度的升高 ΔT_{NP} 可以表示为:

$$\Delta T(r) = \Delta T_{\text{NP}} \frac{R}{r}, \quad r > R, \quad (5)$$

$$\Delta T(r) \approx \Delta T_{\text{NP}}, \quad r < R. \quad (6)$$

由方程 (3) 得到的金属纳米颗粒内部的热功率密度分布是不均匀的, 但是由于球所处的环境介质的热导率通常远远小于金属纳米颗粒的热导率, 所以金属纳米颗粒内部的温度可以看成是均匀的, 因此球形纳米颗粒温度的升高可以直接表示为 [26]

$$\Delta T_{\text{NP}} = \frac{P}{4\pi\kappa_s R} = \frac{\sigma_{\text{abs}} I}{4\pi\kappa_s R}, \quad (7)$$

其中 κ_s 为环境介质的热导率. (7) 式适用于球形纳米粒子, 但是对于形状任意或多聚体纳米结构, 该解析式不再适用. 为此, 本文基于有限元数值计算的方法, 计算复杂等离子体纳米结构中的光热分布及其随结构的变化.

2.2 构建模型

本文基于有限元多物理场仿真软件 COMSOL Multiphysics 构建传热模型, 定量地理解芯帽纳米颗粒的光致加热现象. 利用电磁吸收部分和传热部分计算了纳米颗粒与入射光相互作用时产生的光吸收功率和温度分布. 仿真中, 设入射光强度为 1 mW/ μm^2 , 光源波长扫描范围为 500—900 nm, 周围介质环境为水. 在此波长范围内, 水的折射率设为 1.33, 金的折射率会随波长发生明显变化, 在仿真中, 金和二氧化硅的折射率采用 COMSOL 材料库中的 Au (Johnson) 和 SiO₂ (Gao) 函数获得. 在介质环境的外面加上 PML 吸收边界条件避免二次散射干扰仿真结果. 本文的数值模拟选择了以四面体单元为划分网格, 因为对于四面体单元, 一个单元内各个方向上的最大距离几乎相等, 所以这样的单元色散误差较少. 另外, 网格的划分与金属的趋肤深度有关, 经计算在扫描波长范围内, 其趋肤

深度大致在25—49 nm范围内,因此网格精度应小于12.5 nm.考虑到计算成本和精度问题,本文最大网格单元设置为5 nm.粒子网格划分如图1(a)插图所示.传热模型中使用的材料的热学参数列于表1 [27].

表1 传热模型中使用的材料的热性能

Table 1. Material thermal properties used in the heat transfer model.

名称	热容量/ $J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$	密度/ $kg \cdot m^{-3}$	热导率/ $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$
SiO ₂	741	2200	1
金	129	19300	139
水	4178	996	0.6

3 结果与讨论

3.1 偏振态对芯帽纳米颗粒光热性质的影响

SiO₂@Au 芯帽粒子的结构组成为:以SiO₂纳米球为芯,在其上覆盖一个金帽.SiO₂的粒径设为60 nm,金帽的厚度为8 nm,且其对芯表面的包被为50%,即半球结构,粒子所处的环境为水.设入射光沿y轴入射,当入射光偏振方向与粒子的对称轴夹角为0°(平行)时其吸收峰位于约595 nm,90°时其吸收峰大幅度红移到~795 nm,且吸收强度显著增强,如图1所示.该光学性质源于局限在金帽内的表面等离子体共振对入射光电场的响应,在90°时,金帽内外表面的等离子激元在x偏振的电场作用下表现出水平振动,体现在电场的分布中如图2(a)所示,在a-a'和b-b'电场为最强(与电场平行),c-c'最弱(与电场垂直) [22].当夹角在(0°—90°)间变化时,入射光场在平行于/垂直于对称轴的两个方向上均有分量,因此同时出现~595 nm/795 nm两个共振峰,且随着垂直分量的加大,在795 nm左右的吸收功率迅速增强.值得注意的是,当电场与轴线的夹角≥75°时,~595 nm处的LSPR吸收峰红移至~645 nm,而长波长处的LSPR峰峰位保持不变.这可能是由于随着平行于轴方向的电场分量的减小,水作为弱电解质与金属表面自由电荷发生的作用不可忽略,从而减小了偶极子的振动能量,而展现为红移.

在图1(a)中,入射光方向为y轴,图1(b)中展示了入射光为斜入射的情况以适用于粒子的随机姿态.图中分别以入射角30°和60°入射粒子,在s偏振态时,由于该电场与对称轴垂直,如图在

~795 nm处获得增强的吸收峰,且该峰值与入射角无关.在p偏振时,该电场在平行于对称轴和垂直于对称轴方向上分别产生分量,分别对应两个峰位和峰值.调整斜入射角度,不会改变芯帽纳米颗粒的共振峰峰位,但是会使p偏振作用下的共振峰强度发生变化,与图1(a)中相同.由于芯帽粒子在近红外波段的增强吸收对垂直于其对称轴的偏振态具有选择性,因此在下面的光热性质研究中设置入射光沿y轴入射,偏振态与粒子轴线垂直.

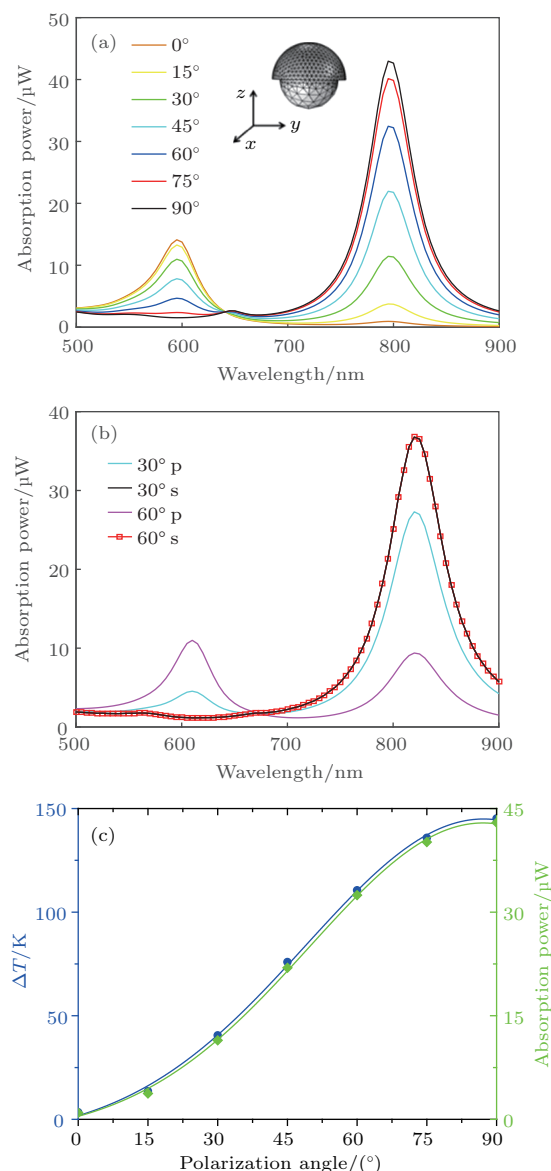


图1 不同偏振态激发下的芯帽纳米颗粒 (a) y轴入射时吸收功率谱; (b) 斜入射时吸收功率谱; (c) y轴入射时吸收功率与温度的变化

Fig. 1. With different polarization excitation, the core-capped nanoparticle: (a) Absorption power spectrum on y-axis incidence; (b) absorption power spectrum at oblique incidence; (c) absorption power and temperature change curve on y-axis incidence.

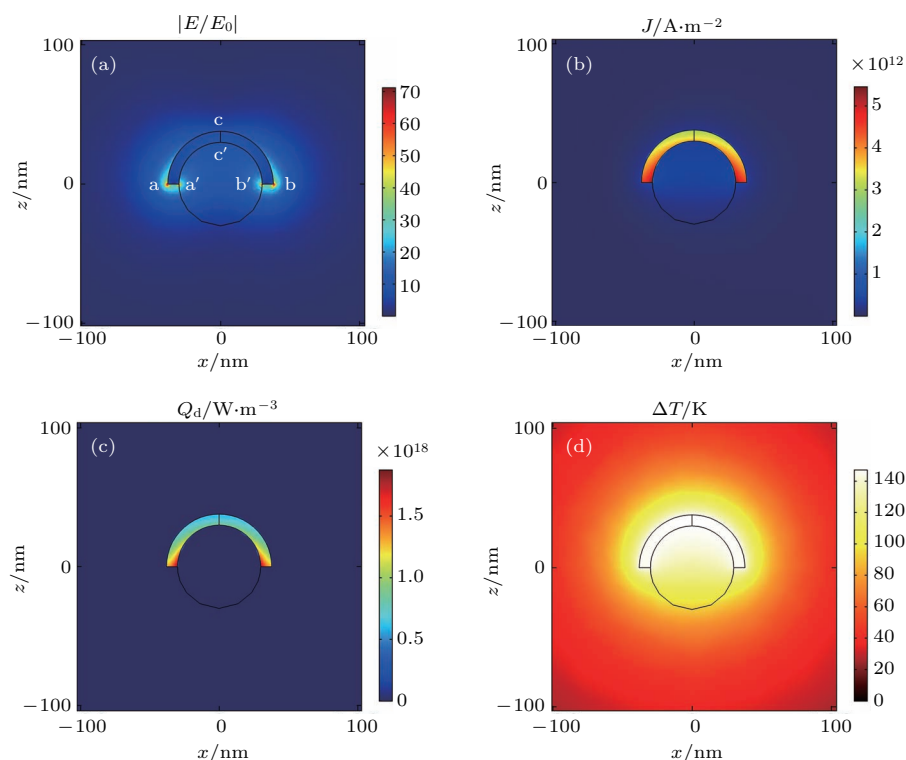


图2 芯帽纳米颗粒在水中的光热效应 (a) 归一化的电场强度; (b) 电流密度分布; (c) 热功率密度分布; (d) 共振波长处的温度分布

Fig. 2. Photo thermal effect of core-capped nanoparticle in water: (a) Electric field intensity normalized to the incident field; (b) current density distribution; (c) thermal power density distribution; (d) temperature distribution at resonant wavelength.

该颗粒及其周围介质环境的归一化电场分布如图2(a)所示, 由于偏振态垂直于粒子的对称轴, 从而极化了粒子外壳与内壳的表面电子, 两者发生了强烈的相互作用, 该作用强度在a-a', b-b'处最大(平行于偏振方向), 而在c-c'处电场消失(垂直于偏振方向, 无极化电场), 而从最大处到最小处之间的电场呈递减状态. 芯帽纳米颗粒的电流密度分布和热功率密度分布如图2所示, 最大值发生在壳沿处, 表明吸收发热主要发生在壳沿, 在顶点c处最小. 由于金的热传导率远大于介质水, 所以在图2(d)中金壳上的温度分布比较均匀, 该粒子的最大温度变化为~145 K.

保持入射光的波长为~795 nm, 在(0°—90°)范围内旋转电场与对称轴的夹角, 其吸收功率分别为: 0.93, 3.75, 11.44, 21.95, 32.46, 40.15和42.97 μW , 对应的温度变化分别为: 3, 14, 41, 76, 111, 136和145 K, 如图1(c)所示. 在此期间温度迅速升高了145 K, 值得注意的是在30°—70°之间, 温升随偏振的变化呈准直线关系. 图1(c)表明, 通过简单的旋转偏振态, 可以高效地操控和切换纳米

芯帽粒子在(0—145 K)范围内变化加热.

3.2 结构参数对芯帽纳米颗粒光热性质的影响

3.2.1 金壳厚度的影响

固定 SiO_2 微球的粒径为60 nm, 芯帽纳米颗粒的吸收功率与温度增加随金壳厚度(5—11 nm)的变化关系如图3(a)所示. 当金壳的厚度从5 nm增加到11 nm时, 其吸收峰由~905 nm蓝移到~745 nm, 在对应的峰值吸收波长处芯帽纳米颗粒的最大吸收功率从41.21 μW (5 nm)增加到41.70 μW (7 nm), 此后继续增加壳的厚度, 吸收峰呈下降趋势, 从41.57 μW (8 nm)减小到39.98 μW (11 nm). 这是因为在光学波段金不是一个良导体, 但是光可以激发金纳米结构中的LSPR共振, 在此芯帽结构中表现为内外壳表面的自由电荷与激发场共振, 形成平行于激发场的偶极子, 其所形成的吸收取决于电荷的数目与吸收平均自由程, 在金壳厚度较薄的情况下, 随着厚度的增加, 自由电荷的数目增加, 与光子作用的吸收概率增加而表现为吸

收增强;当厚度达到一定值后,随着厚度的继续增加,光子吸收的平均自由程加大的程度高于电荷增加的数目,而表现为吸收的减小.在改变金壳厚度的过程中,最大温度的变化与吸收变化趋势不同,随着壳厚的增加温度近似呈直线衰减趋势.从中可见在芯帽结构中并不是吸收越大,温度越高,壳厚与最高温升约呈反比关系.

3.2.2 芯径的影响

固定金壳的厚度为8 nm, SiO₂微球的粒径在35—80 nm之间变化,芯帽纳米颗粒的吸收功率和温度增加随芯径的变化关系如图3(b)所示.随着SiO₂微球粒径的增加,其吸收功率从20.61 μW显著增加到56.07 μW,增加了约2.72倍,这是由于在金壳厚度不变的情况下,芯径的增加使金壳体积明显增加,导致自由电子数目明显增加,使共振峰强度增加.该颗粒在其LSPR激发光波长照射下,最

高温从106 K增加到149 K,并未随同吸收增加2.72倍,而仅增加了43 K.通过图3(b)中的数据做拟合,发现温升与芯径 D 成负指数数关系.

3.2.3 芯壳比的影响

在芯壳比的计算中,将芯半径设为 r ,金壳厚度设为 h ,总粒径($2 \times r + 2 \times h$)固定为60 nm.当芯帽纳米颗粒的芯径从20 nm增加到50 nm时,其吸收功率由17.12 μW增加到29.90 μW,增加了1.75倍,相应的粒子的最高温度从76 K增加到130 K,该作用是金壳厚度与芯径作用的综合结果.在图中壳的厚度从20 nm减小到5 nm,按照图3(a)中壳的变化规律,在壳厚变化到5 nm时其温度应该为~165 K,但现在仅有~130 K,是因为芯径在此期间变化到了50 nm,按照图3(b)的负指数关系,综合影响下,温升为~130 K.

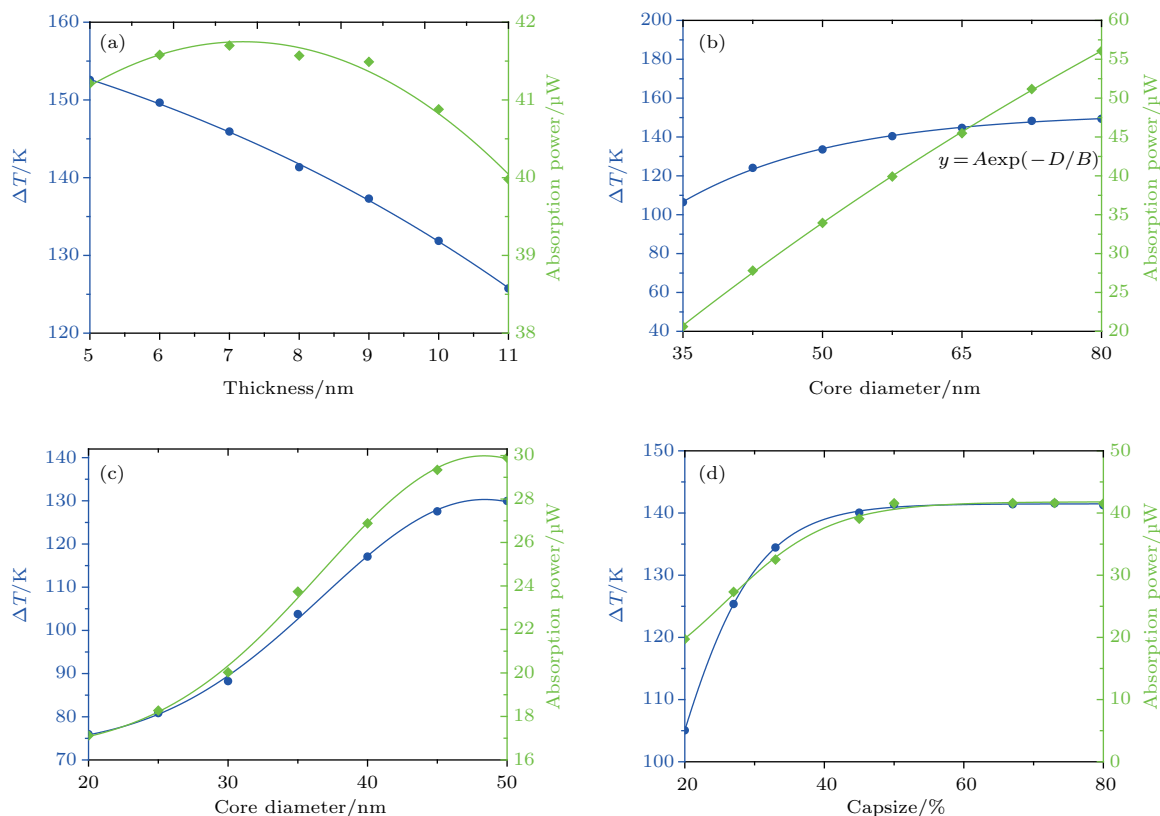


图3 芯帽纳米颗粒吸收功率谱和温度变化曲线随结构参数的变化 (a) 金壳的厚度; (b) 芯径; (c) 核壳比; (d) 金壳表面覆盖率

Fig. 3. Absorption power spectrum and temperature curve when the core-capped nanoparticles vary with: (a) Au shell thickness; (b) core diameter; (c) core-shell ratio; (d) gold shell surface coverage.

3.2.4 金壳表面覆盖率的影响

改变芯帽纳米颗粒的金壳表面覆盖率同样可以调节粒子的几何结构.如图3(d)所示,固定SiO₂

微球的粒径为60 nm,金壳的厚度为8 nm,当金壳表面覆盖率分别为20%, 27%, 33%, 45%和50%时,芯帽纳米颗粒最大吸收功率分别为: 19.72,

27.32, 32.51, 39.09 和 41.57 μW . 当金壳表面覆盖率从 20% 增加到 50% 时, 其吸收功率迅速增加了 2.11 倍, 而粒子的温度从 105 K 升高到 141 K, 增加了 1.34 倍, 其增加速率明显小于吸收功率的增加速率. 继续增加金壳表面覆盖率到 80%, 该结构的最大吸收功率不再随金壳表面覆盖率的增加而增大, 同时, 其温度也不再升高, 而是一直维持在 140 K 附近. 图 3(d) 表明, 当金壳表面覆盖率小于 50% 时, 金壳表面覆盖率微小的改变就会引起其温度的急剧增加; 继续增加金壳表面覆盖率到 $\sim 80\%$, 其吸收功率和温度均不再随金壳表面覆盖率的增加而增加. 这是由于随着金壳包被的增加, 在内壳底端尖角处产生了高阶表面等离子体共振, 改变了偶极子的共振模式. 在半壳之后继续增加金壳的表面

覆盖率对温度的升高已经不再产生影响.

3.3 几种不同结构纳米颗粒的光热性质比较

由上述讨论可见, 各向异性的芯帽粒子的温升对于结构参数具有不同的依赖关系, 可以通过设计和调节各种结构参数进行温升控制, 具有多参数操控功能. 为了对比最佳温升效果, 本文对比了现有应用中使用较多的结构粒子, 包括实心球形、芯壳结构和金纳米棒, 各种粒子的吸收功率谱和温度分布情况如图 4 所示. 设置实心金球直径和芯壳结构的外径均为 76 nm, 芯帽结构的粒径 ($2 \times r + 2 \times h$) 也为 76 nm.

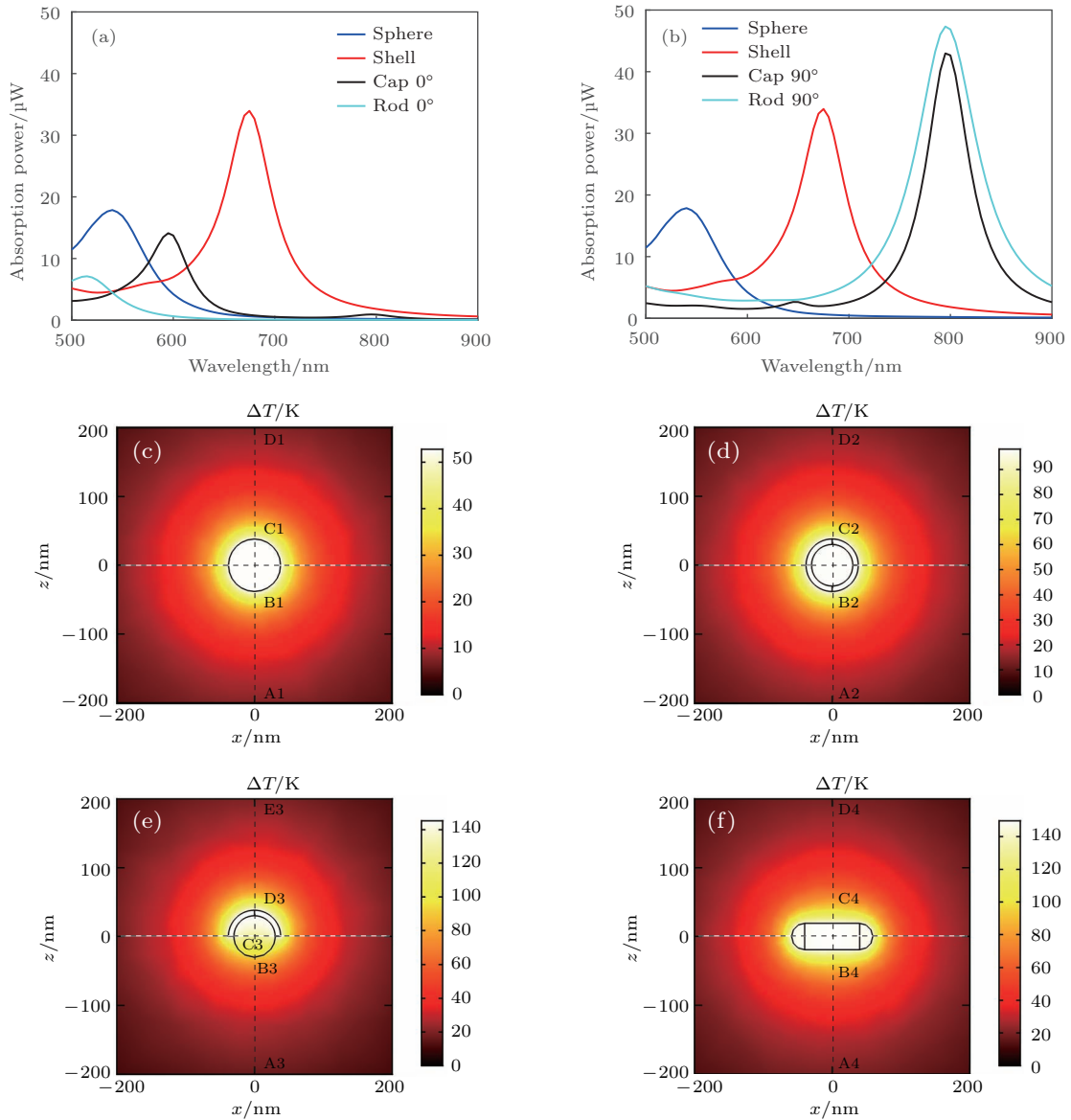


图 4 实心球形、芯壳结构、芯帽结构和金纳米棒的光热性质比较

Fig. 4. Comparison of photothermal properties of solid sphere, core-shell structure, core-capped structure and gold nanorod.

各向异性的芯帽、纳米棒的光学性质如图 4(a) 和图 4(b) 所示, 实心球与芯壳结构粒子对偏振态没有依赖性. 图 4(c)—(f) 为依照图 4(b) 激发条件下各种粒子的温度分布, 由图可见, 在相同粒径下, 实心金球的波长难以红移到近红外, 芯壳的吸收峰位也远低于芯帽粒子; 在此三种粒子中, 芯帽粒子温度增加最大, 是实心金球的 3 倍, 是芯壳结构的 1.5 倍. 为了便于比较芯帽与纳米棒的光热效果, 设置金纳米棒的长轴为 118 nm, 短轴为 38 nm, 此时其吸收峰位与芯帽粒子相同在 ~ 795 nm, 两者温升相当.

图 4、图 5 可以更加明确地反映颗粒内部及其周围介质环境的温度变化情况. 由于实心球形和芯壳结构是球对称结构, 当颗粒产生热量后, 颗粒上的温度几乎一致, 并以相同的速率向周围介

质环境传导, 此时实心球形和芯壳结构的半峰全宽 (FWHM) 均为 142 nm; 各向异性的芯帽结构的金壳 (C3-D3) 上温度相同, 温升为 145 K, 温度在介质环境水 (D3-E3) 中下降的速度明显快于在介质球 SiO_2 中下降的速度, 此时粒子的 FWHM 为 113 nm. 与金纳米棒 (FWHM 为 115 nm) 相比, 虽然芯帽结构的最高温度略小, 但是温度分布更为集中.

芯帽结构急剧的温度上升有助于生物组织的快速加热, 与芯壳结构和实心球形相比, 其温升更高; 与金纳米棒相比, 在相同的峰值吸收波长下, 其粒径更小, 热扩散空间位置更集中. 另外, 由于其是半壳结构, 作为纳米药物的载体更便于纳米药物的释放.

四种粒子的光热性质汇总于表 2.

表 2 不同等离子体纳米结构的光热性质的比较
Table 2. Comparison of photothermal properties of different plasma nanostructures.

结构参数	粒径/nm	共振峰位/nm	吸收功率/ μW	$\Delta T/\text{K}$	对偏振态是否敏感
实心金球	76	540	17.81	53	否
芯壳结构	76	675	33.92	95	否
芯帽结构	76	795(595)	41.60(14.12)	145(50)	是
金纳米棒	38, 118	795(515)	47.33(7.121)	149(24)	是

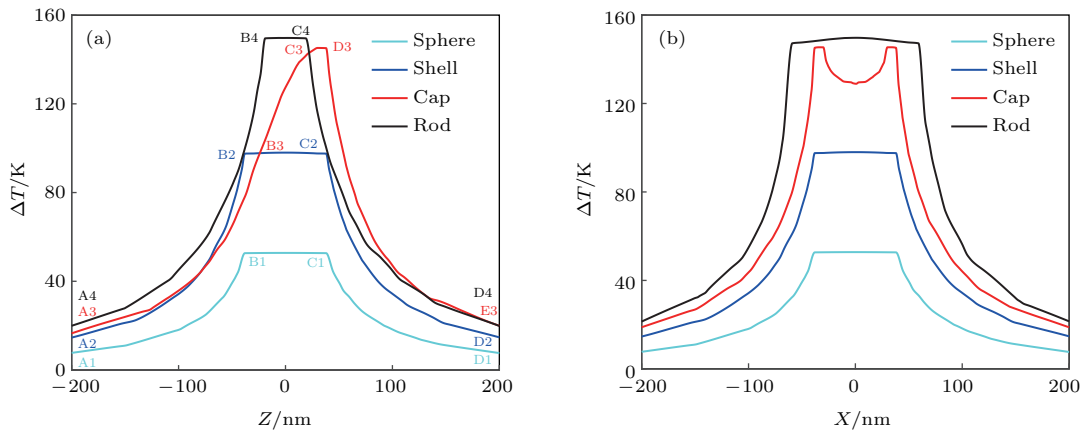


图 5 实心球形、芯壳结构、芯帽结构、金纳米棒的温度变化曲线 (a) 沿 z 轴方向; (b) 沿 x 轴方向

Fig. 5. Temperature curves of solid sphere, core-shell structure, core-capped structure, and gold nanorod: (a) Along the z-axis; (b) along the x-axis.

4 结 论

本文研究了各向异性结构的芯帽纳米颗粒的结构参数对其温度分布的作用规律. 通过微小改变芯帽纳米颗粒的结构参数和激发光偏振方向, 可

以操控粒子在近红外波段获得温度的大幅度调整. 通过与四种典型光热纳米颗粒的对比, 芯帽纳米颗粒展现出更为独特的光热性能, 为其作为一种高效的、局域的热源, 为控制纳米尺度的热诱导提供了一种有效的方式.

参考文献

- [1] Cao J, Sun T, Grattan K T V 2014 *Sens. Actuator B: Chem.* **195** 332
- [2] Petryayeva E, Krull U J 2011 *Anal. Chim. Acta* **706** 8
- [3] Ortega-mendoza J G, Padilla-Vivanco A, Toxqui-Quitl C, Zaca-Morán P, Villegas-Hhernández D, Chávez F 2014 *Sensors* **14** 18701
- [4] Yang C C, Chu C K, Yu C K, Li M J, Chi T T, Kiang Y W, Tu Y C, Chang Y W 2014 *Opt. Express* **22** 11754
- [5] Landsman M L, Kwant G, Mook G A, Zijlstra W G 1976 *J. Appl. Physiol.* **40** 575
- [6] Wang C, Xu L G, Xu J T, Yang D, Liu B, Gai S L, He F, Yang P P 2017 *Dalton Trans.* **46** 12147
- [7] Li J C, Hu Y, Yang J, Wei P, Sun W J, Shen M W, Zhang G X, Shi X Y 2015 *Biomaterials* **38** 10
- [8] Truong N P, Whittaker M R, Mak C W, Davis T P 2015 *Expert Opin. Drug Deliv.* **12** 129
- [9] Daraee H, Eatemadi A, Abbasi E, Aval S F, Kouhi M, Akbarzadeh A 2016 *Artif. Cell. Nanomed. Biotechnol.* **44** 1
- [10] Chen M, Tang S H, Guo Z D, Wang X Y, Mo S G, Huang X Q, Liu G, Zheng N F 2015 *Adv. Mater.* **26** 8210
- [11] Jaque D, MartáNez M L, Del R B, Haro-Gonzalez P, Benayas A, Plaza J L 2014 *Nanoscale* **6** 9494
- [12] Lee S M, Kim H J, Ha Y J, Park Y N, Lee S K, Park Y B, Yoo K H 2012 *ACS Nano* **7** 50
- [13] Xing R T, Liu K, Jiao T F, Zhang N, Ma K, Zhang R Y, Zou Q L, Ma G H, Yan X H 2016 *Adv. Mater.* **28** 3669
- [14] Smith A M, Mancini M C, Nie S 2009 *Nat. Nanotechnol.* **4** 710
- [15] Oldenburg S J, Averitt R D, Westcott S L, Halas N J 1998 *Chem. Phys. Lett.* **288** 243
- [16] Murphy C J, Sau T K, Gole A M, Orendorff C J, Gao J, Gou L, Hunyadi S E, Li T 2005 *J. Phys. Chem. B* **109** 13857
- [17] Nehl C L, Liao H, Hafner J H 2006 *Nano Lett.* **6** 683
- [18] Zhang X Y, Zhang T, Hu A, Song Y J, Duley W W 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 153118
- [19] Lee D, Yoon S 2015 *J. Phys. Chem. C* **119** 7873
- [20] Gans R, Über D 1912 *Ann. Phys.* **342** 881
- [21] Liu J, Cankurtaran B, Wiczorek L, Ford M J, Cortie M 2006 *Adv. Funct. Mater.* **16** 1457
- [22] Hong X, Wang C C 2018 *Acta Opt. Sin.* **38** 524001 (in Chinese) [洪昕, 王晨晨 2018 光学学报 **38** 524001]
- [23] Himmelhaus M, Takei H 2000 *Sens. Actuator B: Chem.* **63** 24
- [24] Hong X, Du D D, Qiu Z R, Zhang G X 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 7219 (in Chinese) [洪昕, 杜丹丹, 裘祖荣, 张国雄 2007 物理学报 **56** 7219]
- [25] Song J B, Yang X Y, Jacobson O, Huang P, Sun X L, Lin L S, Yan X F, Niu G, Ma Q J, Chen X 2015 *Adv. Mater.* **27** 4910
- [26] Baffou G, Quidant R 2013 *Laser Photon. Rev.* **7** 171
- [27] Chen X, Chen Y, Yan M, Qiu M 2012 *ACS Nano* **6** 2550

Photothermal properties of core-capped gold nanoparticles*

Hong Xin[†] Wang Chen-Chen Liu Jiang-Tao Wang Xiao-Qiang Yin Xue-Jie

(School of Biomedical Engineering, Faculty of Electronic Information and Electrical Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

(Received 7 May 2018; revised manuscript received 14 July 2018)

Abstract

Photothermal effects associated with noble metal nanostructures have shown wide potential applications in photothermal cancer therapy, photo-thermal imaging, nanomedicine, etc. These applications benefit from the localized surface plasmon resonance (LSPR) effect of the nanoparticles. Due to the LSPR effect, the nanoparticles exhibit unique optical properties such as strong scattering and absorption in the band ranging from visible to near-infrared region. The absorption enables the plasmonic nanoparticle to be a thermal source to increase the temperature of itself and the localized surrounding environment. Among these particles, the anisotropic core-capped nanostructures distinguish themselves by their strong polarization selectivity. The absorptions are different when the incident light is polarized in the directions vertical (90°) and parallel (0°) to its symmetry axis, respectively. At 90° , a large red-shift can be achieved and the absorption cross section is greatly enhanced. Moreover, their absorption peaks can be flexibly manipulated by slightly adjusting one of the geometrical parameters. However, the photothermal responses to these parameters are left blank. In this paper, photothermal effects of SiO_2 @Au core-capped nanoparticles are studied based on the numerical finite element analysis method (COMSOL software). The thermal response to each of the parameters, including shell thickness, core diameter, core-shell ratio, and metal surface coverage is achieved. The calculation shows that the temperature of these core-capped nanoparticles can be adjusted efficiently in the near infrared band by easily rotating the polarization, i.e. slightly adjusting the geometric parameters. Especially in a range between 30° and 70° , the temperature varying with the polarization follows almost a linear relationship. The comparisons with other popular structures including solid sphere, core-shell and nanorod are also made. The results indicate that at a similar size, the core-capped structure can offer a higher temperature than solid spheres and core-shell structures. To obtain the same temperature variation, the core-capped one has a smaller size than a nanorod. The comparisons demonstrate that the core-capped structure can be an alternative to a high-efficient nano heat source in the photothermal applications.

Keywords: localized surface plasmon resonance, core-capped structure, photothermal properties, polarization

PACS: 52.25.Tx, 52.50.-b, 61.46.Df, 13.88.+e

DOI: [10.7498/aps.67.20180909](https://doi.org/10.7498/aps.67.20180909)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 31271064).

[†] Corresponding author. E-mail: hongxin@dlut.edu.cn