ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ. ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА

Анализ влияния продольных полей на рассеивающие свойства кластера несферических плазмонных наночастиц методом дискретных источников

Ю. А. Еремин,[1,a] А. Г. Свешников[2,б]

[1] *Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова; факультет вычислительной математики и кибернетики, кафедра математической физики;*
[2] *физический факультет, кафедра математики. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.*

Статья поступила 28.12.2017, принята к публикации 22.01.2018.

Рассматривается задача дифракции поля плоской электромагнитной волны на линейном кластере из двух плазмонных наночастиц с учетом эффекта нелокальности. В основу исследования положена математическая модель Обобщенного нелокального отклика (Generalize Non-Local Optical Response). На основе модификации метода дискретных источников проводится сравнительный численный анализ частотных характеристик рассеяния в зависимости от геометрии частиц и расстоянии между ними. Установлено, что учет продольных полей оказывает существенное влияние как на сечение экстинкции, так и еще в большей степени на сечение рассеяния.

Ключевые слова: рассеяние света, плазмонные наночастицы, продольные поля, модель обобщенного нелокального отклика, метод дискретных источников.
УДК: 535.36, 519.63. PACS: 42.25.-p, 42.25.Fx.

ВВЕДЕНИЕ

Возможность управления световым рассеянием посредством использования плазмонных частиц и их кластеров привлекает пристальное внимание ученых [1–3]. Использование парных частиц (dimmer) представляет собой один из способов подобного управления. Такой подход позволяет сдвигать положение плазмонного резонанса в частотной области или менять его величину за счет размера, геометрии или расстояния между частицам. Эти свойства находят многочисленные приложения [4, 5]. В работах [6, 7] было показано, что за счет вариации геометрических параметров кластера возможно реализовать плазмонный резонанс практически на любой длине волны видимого диапазона. Однако по мере дальнейшей миниатюризации плазмонных частиц возникают дополнительные аспекты, связанные с использованием классической теории Максвелла. Это связано с проявлением эффекта нелокальности [8, 9]. Физическая суть его состоит в том, что когда размер частиц становится меньше свободного пробега электронов в веществе (<10 нм), внутри частиц формируется объемный заряд, который образует ток. В этом случае внутреннее электрическое поле перестает быть чисто поперечным ($\operatorname{div}\mathbf{E} = 0$), как в классической системе уравнений Максвелла [10], и для адекватного описания происходящих процессов возникает необходимость привлечения дополнительно продольных полей ($\operatorname{rot}\mathbf{E} = 0$) [11, с. 167]. Эта особенность поведения наиболее заметна для частиц из благородных металлов золота и серебра [12, 13].

В работе [14] на основе математической модели гидродинамической теории Друдэ с помощью метода дискретных источников (МДИ) проведено исследование рассеивающих свойств плазмонных наноцилиндров различного поперечного сечения. В настоящей работе посредством модификации МДИ исследуются спектральные рассеивающие свойства линейного кластера двух несферических частиц на основе модели Обобщенного нелокального отклика (ОНО, GNOR), которая представляет собой квазиклассическое описание квантовых эффектов, возникающих внутри частиц [15, 16]. Отметим, что в настоящее время модель ОНО является наиболее востребованной среди широкого круга исследователей [17–20].

Как известно, расстояние между частицами также играет важную роль. В настоящее время принято различать несколько областей изменения этого параметра. При расстояниях $d \geqslant 2$ нм возможно использовать классическую теорию Максвелла, не учитывая эффект нелокальности, область 2 нм $\geqslant d \geqslant 0.5$ нм хорошо описывается квазиклассическими теориями, в частности ОНО. В то время как в области $d < 0.5$ нм превалируют квантовые эффекты взаимодействия частиц, в кластере и необходимо учитывать туннельный эффект взаимодействия частиц [17].

Для описания эффекта нелокальности в рамках ОНО проводится рассмотрение движения зарядов внутри плазмонной частицы, на основе чего проводится обобщение закона Ома [15], то есть осуществляется следующий переход:

$$\mathbf{J} = \sigma\mathbf{E} \quad \Rightarrow \quad \eta^2\nabla(\nabla\cdot\mathbf{J}) + \mathbf{J} = \sigma\mathbf{E},$$

в результате чего изменяется соответствующее уравнение системы Максвелла.

1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ, МЕТОД ДИСКРЕТНЫХ ИСТОЧНИКОВ

Рассмотрим дифракцию поля электромагнитной плоской волны $\{\mathbf{E}_0, \mathbf{H}_0\}$ двумя проницаемыми осесимметричными частицами $D_{1,2}$, расположенными в R^3. Пусть частицы имеют гладкие поверхности $\partial D_{1,2} \in C^{(2,\alpha)}$ с общей осью симметрии Oz. Будем полагать, что плоская волна распространяется под углом $\pi - \theta_0$ по отношению к оси Oz. Тогда математическая постановка задачи рассеяния в рамках

[a] E-mail: eremin@cs.msu.ru
[б] E-mail: sveshnikov@phys.msu.ru

обобщенного нелокального отклика может быть записана в следующем виде:

$$\begin{aligned}
&\operatorname{rot}\mathbf{H}_e = jk\varepsilon_e\mathbf{E}_e, \quad \operatorname{rot}\mathbf{E}_e = -jk\mu_e\mathbf{H}_e \\
&\quad \text{в} \quad D_e := R^3/\overline{D_1\cup D_2}; \\
&\operatorname{rot}\mathbf{H}_i = jk(\varepsilon_i + \eta^2\nabla\operatorname{div})\mathbf{E}_i(M), \\
&\operatorname{rot}\mathbf{E}_i = -jk\mu_i\mathbf{H}_i \quad \text{в} \quad D_i, \quad i=1,2; \\
&\mathbf{n}_{1,2}\times(\mathbf{E}_{1,2}(P)-\mathbf{E}_e(P)) = \mathbf{n}_{1,2}\times\mathbf{E}_0(P), \\
&\mathbf{n}_{1,2}\times(\mathbf{H}_{1,2}(P)-\mathbf{H}_e(P)) = \mathbf{n}_{1,2}\times\mathbf{H}_0(P), \\
&\quad P\in\partial D_{1,2}; \\
&\varepsilon_L\mathbf{n}_{1,2}\cdot\mathbf{E}_{1,2}(P) = \varepsilon_e\mathbf{n}_{1,2}\cdot(\mathbf{E}_0(P)+\mathbf{E}_e(P)); \\
&\lim_{r\to\infty} r\cdot\left(\sqrt{\varepsilon_e}\,\mathbf{E}_e\times\frac{\mathbf{r}}{r} - \sqrt{\mu_e}\,\mathbf{H}_e\right) = 0, \\
&\quad r=|M|\to\infty.
\end{aligned} \tag{1}$$

Здесь $\{\mathbf{E}_e,\ \mathbf{H}_e\}$ — рассеянное поле в D_e, $\{\mathbf{E}_i,\ \mathbf{H}_i\}$, $i=1,2$ — полные поля внутри каждой частицы, $\mathbf{n}_{1,2}$ — единичные нормали к поверхностям $\partial D_{1,2}$, кроме того, внутреннее поле $\mathbf{E}_i = \mathbf{E}_i^{\perp} + \mathbf{E}_i^{L}$, $\operatorname{div}\mathbf{E}_i^{\perp} = 0$, $\operatorname{rot}\mathbf{E}_i^{L} = 0$, $k=\omega/c$, а характеристики среды выбраны таким образом, что $\operatorname{Im}\varepsilon_e,\mu_e = 0$, $\operatorname{Im}\varepsilon_i,\mu_i \leqslant 0$, $\operatorname{Im}\varepsilon_L \leqslant 0$. При этом предполагается, что временная зависимость выбрана в виде $\exp\{j\omega t\}$. Параметры η и ε_L описывают продольные компоненты внутреннего поля $\mathbf{E}_i^{L}$ и будут определены в соответствии с ОНО ниже. Следует отметить, что из формулировки задачи (1) непосредственно вытекает, что продольная компонента поля, во-первых, локализована строго внутри частицы и, во-вторых, не вносит вклад в магнитное поле $\mathbf{H}_i$, так как $\operatorname{rot}(\nabla\Psi) = 0$. Наличие дополнительного поля $\mathbf{E}_i^{L}$, подлежащего определению, требует дополнительное граничное условие, которое первоначально формулируется как равенство нулю нормальной компоненты тока на поверхностях $\partial D_{1,2}$, затем трансформируется в скачок нормальных компонент полей [19, 20]. Будем полагать, что поставленная граничная задача (1) имеет единственное классическое решение.

Для решения задачи дифракции (1) будем использовать МДИ [14, 21]. Он обладает определенными преимуществами перед другими поверхностно-ориентированными методами [22, 23]. А именно: МДИ не требует ни генерации сеток, ни использования процедур интегрирования по поверхности рассеивателя, позволяет в аналитическом виде получать как ближнее, так и дальнее поля, причем решая задачу одновременно для всего набора углов падения плоской волны и поляризаций. Отличительной особенностью метода является то, что он дает возможность получать апостериорную оценку погрешности полученного решения, что позволяет контролировать реальную сходимость приближенного решения к точному.

Пусть поле P/S поляризованной волны записывается в виде

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}_0^P &= (\mathbf{e}_x\cos\theta_0 + \mathbf{e}_z\sin\theta_0)\cdot\gamma, \\
\mathbf{H}_0^P &= -\mathbf{e}_y n_0\cdot\chi; \\
&\quad \chi = \exp\left\{-jk_e(x\sin\theta_0 - z\cos\theta_0)\right\}, \\
\mathbf{H}_0^S &= (\mathbf{e}_x\cos\theta_0 + \mathbf{e}_z\sin\theta_0)\cdot\chi, \\
\mathbf{E}_0^S &= \mathbf{e}_y n_0\cdot\chi.
\end{aligned} \tag{2}$$

При построении приближенного решения на основе МДИ будем существенно учитывать осевую симметрию и поляризацию плоской волны [21]. В основу представления для внешнего $\{\mathbf{E}_e,\ \mathbf{H}_e\}$ и внутреннего поперечного полей $\{\mathbf{E}_i^{\perp},\ \mathbf{H}_i\}$: $\operatorname{div}\mathbf{E}_i^{\perp} = 0$ положим следующие векторные потенциалы:

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}_{mn}^{1,e,i} &= \{\,Y_m^{e,i}(\xi,w_n^{e,i})\cos(m+1)\phi; \\
&\qquad -Y_m^{e,i}(\xi,w_n^{e,i})\sin(m+1)\phi;\ 0\}, \\
\mathbf{A}_{mn}^{2,e,i} &= \{\,Y_m^{e,i}(\xi,w_n^{e,i})\sin(m+1)\phi; \\
&\qquad Y_m^{e,i}(\xi,w_n^{e,i})\cos(m+1)\phi;\ 0\}, \\
\mathbf{A}_n^{3,e,i} &= \{0;\ 0;\ Y_0^{e,i}(\xi,w_n^{e,i})\}.
\end{aligned}$$

Здесь
$$\begin{aligned}
Y_m^e(\xi,w_n^e) &= h_m^{(2)}(k_e R_{\xi w_n^e})\left(\rho/R_{\xi w_n^e}\right)^m, \\
Y_m^i(\xi,w_n^i) &= j_m(k_i R_{\xi w_n^i})\left(\rho/R_{\xi w_n^i}\right)^m, \\
R^2_{\xi w_n^{e,i}} &= \rho^2 + (z-w_n^{e,i})^2,
\end{aligned}$$

$\xi = (\rho,z)$ — точка в полуплоскости $\phi = \mathrm{const}$, $h_m^{(2)}$ — сферическая функция Ханкеля, j_m — сферическая функция Бесселя, $k_{e,i} = k\sqrt{\varepsilon_{e,i}\mu_{e,i}}$, $w_n^{e,i}$ — координаты дискретных источников, расположенных внутри частицы [14].

Для окончательной формулировки приближенного решения необходимо дополнительно определить значения диэлектрической проницаемости ε_L и волнового числа k_L. Диэлектрическая проницаемость ε_L будет определяться как $\varepsilon_L = \varepsilon_i - \omega_p^2/(j\gamma\omega - \omega^2)$, где ω_p — плазменная частота для данного металла, γ — коэффициент затухания в среде [15, 19]. Скалярный потенциал для продольного поля удовлетворяет уравнению Гельмгольца: $\left(\nabla^2 + k_L^2\right)\Psi(M) = 0$, а величина продольного волнового числа определяется через значение η следующим образом: $k_L^2 = \varepsilon_i(\omega)/\eta^2$. При этом в рамках ОНО значение η представляется как $\eta^2 = \varepsilon_L\left(\beta^2 + D(\gamma + j\omega)\right)/\left(\omega^2 - j\gamma\omega\right)$. Здесь β — гидродинамическая скорость в плазме связан со скоростью Ферми v_F соотношением $\beta^2 = 3/5v_F^2$, D — коэффициент диффузии электронов [15, 19]. Также отметим, что при $\beta\to 0$, $D\to 0$ поле внутри частицы становится чисто поперечным, так как $k_L\to\infty \ \Rightarrow\ \Psi\to 0$.

Для случая P-поляризации продольное поле строится на основе следующих скалярных потенциалов, представляющих собой частные решения уравнения Гельмгольца с нелокальным волновым числом $\left(\nabla^2 + k_L^2\right)\Psi(M) = 0$:

$$\begin{aligned}
\Psi_{mn}^P(M) &= j_{m+1}(k_L R_{\xi w_n})\cos(m+1)\phi, \\
&\qquad m=0,1,\ldots M,\ n=1,2,\ldots N_L. \\
\Psi_n(M) &= j_0(k_L R_{\xi w_n}),
\end{aligned}$$

w_n — координаты ДИ, расположенных на оси вращения или в комплексной плоскости [21].

Итак, приближенное решение в рамках МДИ для P-поляризованной плоской волны (2) может быть представлено в следующем виде:

$$\mathbf{E}_{e,i}^N = \sum_{m=0}^{M}\sum_{n=1}^{N_{e,i}^m}\left\{p_{mn}^{e,i}\frac{j}{k\varepsilon_{e,i}\mu_{e,i}}\operatorname{rot}\operatorname{rot}\mathbf{A}_{mn}^{1,e,i} + \right.$$
$$\left. + q_{mn}^{e,i}\frac{1}{\varepsilon_{e,i}}\operatorname{rot}\mathbf{A}_{mn}^{2,e,i}\right\} + \sum_{n=1}^{N_{e,i}^0} r_n^{e,i}\frac{j}{k\varepsilon_{e,i}\mu_{e,i}}\operatorname{rot}\operatorname{rot}\mathbf{A}_n^{3,e,i};$$

$$\mathbf{E}_i^{NL} = \sum_{m=0}^{M}\sum_{n=1}^{N_L^m} p_{mn}^{L,i}\nabla\Psi_{mn}^P(M) + \sum_{n=1}^{N_L^0} r_n^{L,i}\nabla\Psi_n(M);$$
$$i = 1,2;$$
$$\mathbf{H}_{e,i}^N = \frac{j}{k\mu_e}\operatorname{rot}\mathbf{E}_{e,i}^N. \tag{3}$$

Перейдем к построению приближенного решения для случая S-поляризации. В этом случае скалярный потенциал для продольного поля, согласованный с поляризацией плоской волны, будет

$$\Psi_{mn}^S(M) = j_{m+1}(k_L R_{\xi w_n})\sin(m+1)\phi, \quad m = 0,1,\ldots$$

Тогда приближенное решение для S-поляризации принимает вид

$$\mathbf{E}_{e,i}^N = \sum_{m=0}^{M}\sum_{n=1}^{N_{e,i}^m}\left\{p_{mn}^{e,i}\frac{j}{k\varepsilon_{e,i}\mu_{e,i}}\operatorname{rot}\operatorname{rot}\mathbf{A}_{mn}^{2,e,i} + \right.$$
$$\left. + q_{mn}^{e,i}\frac{1}{\varepsilon_{e,i}}\operatorname{rot}\mathbf{A}_{mn}^{1,e,i}\right\} + \sum_{n=1}^{N_{e,i}^0} r_n^{e,i}\frac{1}{\varepsilon_{e,i}}\operatorname{rot}\mathbf{A}_n^{3,e,i};$$
$$\mathbf{E}_i^{NL} = \sum_{m=0}^{M}\sum_{n=1}^{N_L^m} p_{mn}^{L,i}\nabla\Psi_{mn}^S(M); \tag{4}$$
$$\mathbf{H}_{e,i}^N = \frac{j}{k\mu_e}\operatorname{rot}\mathbf{E}_{e,i}^N.$$

Сравнивая представления (3) и (4), замечаем отсутствие вклада продольного поля $\mathbf{E}_i^{NL}$ в не зависящую от φ гармонику. Это является следствием того обстоятельства, что в этом случае присутствует лишь азимутальная компонента электрического поля $\mathbf{E} - E_\varphi$ и отсутствует его нормальная компонента.

Подставляя представления для полей (3), (4) в (1), легко убедиться, что они аналитически удовлетворяют всем условиям граничной задачи (1), за исключением условий сопряжения на поверхностях частиц $\partial D_{1,2}$. Используя условия сопряжения, получаем для определения неизвестных амплитуд ДИ следующие соотношения:

$$\mathbf{n}_{1,2}\times\left(\mathbf{E}_{1,2}^{N\perp}(\xi_l,\phi) + \mathbf{E}_{1,2}^{NL}(\xi_l,\phi) - \right.$$
$$\left. - \mathbf{E}_e^N(\xi_l,\phi)\right) = \mathbf{n}_{1,2}\times\mathbf{E}_0(\xi_l,\phi),$$
$$\mathbf{n}_{1,2}\times\left(\mathbf{H}_{1,2}^N(\xi_l,\phi) - \mathbf{H}_e^N(\xi_l,\phi)\right) = \mathbf{n}_{1,2}\times\mathbf{H}_0(\xi_l,\phi),$$
$$Q_l = (\xi_l,\phi)\in\partial D_{1,2};$$
$$\mathbf{n}_{1,2}\cdot\left(\varepsilon_L\mathbf{E}_{1,2}^{N\perp}(\xi_l,\phi) + \varepsilon_L\mathbf{E}_{1,2}^{NL}(\xi_l,\phi) - \right.$$
$$\left. - \varepsilon_e\mathbf{E}_e^N(\xi_l,\phi)\right) = \varepsilon_e\mathbf{n}_{1,2}\cdot\mathbf{E}_0(\xi_l,\phi).$$

Построение схемы вычислительного алгоритма определения амплитуд ДИ $\{p_{mn}^{e,i};\, p_{mn}^{L,i};\, q_{mn}^{e,i};\, r_n^{e,i};\, r_n^{L,i}\}$ мало отличается от стандартной схемы обобщенного метода коллокаций [24]. Точки коллокаций $\{\xi_l\}_{l=1}^K$ равномерно покрывают образующие поверхностей частиц, а число источников выбирается так, чтобы линейная система для каждой гармоники оказывалась переопределенной: $5K > 2(N_e + N_i) + N_L$. Далее проводится регуляризация А. Н. Тихонова в смысле l_2 [25] с последующей факторизацией матриц и последовательного решения систем для каждой гармоники для всего набора углов падения волны θ_0. При необходимости вычисляется невязка граничных условий в промежуточных точках по отношению к точкам коллокаций [21].

Определив амплитуды ДИ, легко вычислить θ, φ компоненты диаграммы направленности рассеянного поля [14], которые для случая P-поляризации принимают следующий вид:

$$F_\theta^{\mathrm{P}}(\theta,\phi) = jk_e\sum_{m=0}^{M}(j\sin\theta)^m\cos\{(m+1)\phi\}\times$$
$$\times\sum_{n=1}^{N_e^m}\{p_{mn}^e\cos\theta + q_{nm}^e\}\exp\{-jk_e w_n^e\cos\theta\} -$$
$$- jk_e\sin\theta\sum_{n=1}^{N_e^0} r_n^e\exp\{-jk_e w_n^e\cos\theta\} \tag{5}$$
$$F_\phi^{\mathrm{P}}(\theta,\phi) = -jk_e\sum_{m=0}^{M}(j\sin\theta)^m\sin\{(m+1)\phi\}\times$$
$$\times\sum_{n=1}^{N_e^m}\{p_{mn}^e + q_{nm}^e\cos\theta\}\exp\{-jk_e w_n^e\cos\theta\}.$$

Совершенно аналогично компоненты диаграммы для случая S-поляризации будут

$$F_\theta^S(\theta,\phi) = jk_e\sum_{m=0}^{M} = (j\sin\theta)^m\sin\{(m+1)\phi\}\times$$
$$\times\sum_{n=1}^{N_e^m}\{p_{mn}^e\cos\theta - q_{nm}^e\}\exp\{-jk_e w_n^e\cos\theta\},$$
$$F_\phi^S(\theta,\phi) = jk_e\sum_{m=0}^{M}(j\sin\theta)^m\cos\{(m+1)\phi\}\times \tag{6}$$
$$\times\sum_{n=1}^{N_e^m}\{p_{mn}^e\cos\theta - q_{nm}^e\}\exp\{-jk_e w_n^e\cos\theta\} -$$
$$+ jk_e\sin\theta\sum_{n=1}^{N_e^0} r_n^e\exp\{-jk_e w_n^e\cos\theta\}.$$

2. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Нас будет интересовать сечение рассеяния, которое представляет собой суммарную интенсивность рассеянного поля

$$\sigma_{\text{sc}}^{P,S}(\theta_0) = \int_\Omega DSC^{P,S}(\theta_0,\theta,\phi)\,d\omega.$$

Здесь DSC на единичной сфере $\Omega = \{0 \leqslant \theta \leqslant \pi;\ 0 \leqslant \phi \leqslant 2\pi\}$ определяется как

$$DSC^{P,S}(\theta_0,\theta,\phi) = \left|F_\theta^{P,S}(\theta_0,\theta,\phi)\right|^2 + \left|F_\phi^{P,S}(\theta_0,\theta,\phi)\right|^2.$$

Размерность SCS — μм^2. Кроме того, мы будем определять сечение экстинкции [26], которое применительно к нашему случаю (5)–(6) принимает вид

$$\sigma_{\text{ext}}^P(\theta_0) = -\frac{4\pi}{k_e}\operatorname{Im}F_\theta^P(\pi-\theta_0,\pi);$$
$$\sigma_{\text{ext}}^S(\theta_0) = \frac{4\pi}{k_e}\operatorname{Im}F_\phi^S(\pi-\theta_0,\pi).$$

В качестве вещества частицы будем рассматривать серебро (Ag), для которого соответствующие параметры, необходимые для определения величин k_L и ε_L, имеют вид $\hbar\omega_p = 8.99\ eV$, $\hbar\gamma = 0.025\ eV$, $v_F = 1.39\ \mu m/\sec$, $D = 3.61 \times 10^8\ \mu m^2/\sec$ [13]. Задавая длину волны внешнего возбуждения λ, вычисляя соответствующее значение ω, легко определить значения нелокальных параметров k_L и ε_L по приведенным выше формулам. Величина диэлектрической проницаемости для серебра $\varepsilon_i(\omega)$ определялась с учетом частотной дисперсии металла [27]. Следует также отметить, что, несмотря на имеющиеся публикации, связанные с анализом рассеивающих свойств парных частиц [28–32], в большинстве из них рассматриваются сферические частицы и отсутствует анализ влияния деформации на характеристики рассеяния и экстинкции.

В качестве формы частиц будем рассматривать вытянутые сфероиды, задавая в качестве исходных параметров их эквиобъемный диаметр D и соотношение осей $r = a/b$, d — расстояние между частицами. Прежде чем переходить к описанию численных результатов отметим, что основной вычислительной проблемой при учете продольных волн является весьма существенное отличие величин продольного k_L и поперечного волновых k_e чисел. Например, в рассматриваемом ниже диапазоне длин волн это различие доходило до значения $|k_L|/k_e \approx 200$, что определяет существенно различный характер поведения полей — в то время как для поперечного волнового числа отношение $|k_i|/k_e$ не превышало 20.

Рассмотрим спектральные характеристики рассеяния в диапазоне длин волн, который содержит плазмонный резонанс (ПР) внутри интервала. На рис. 1 приведены сравнительные результаты сечений экстинкции и рассеяния с учетом ОНО (GNOR) и без учета (LRA) для сфероидов $D = 8$ нм, $r = 2$, $d = 2$ нм, при угле падения плоской волны вдоль оси вращения $\theta_0 = 0°$. Как видно из рисунка, учет наличия продольного поля приводит к уменьшению максимумов ПР (dumping) и их сдвигу в область коротких длин волн (blue shift). Кроме того, необходимо отметить, что в то время как сечение экстинкции снижается всего в два раза, снижение сечения рассеяния оказывается на порядок более значительным. На рис. 2 приведены аналогичные результаты, но для

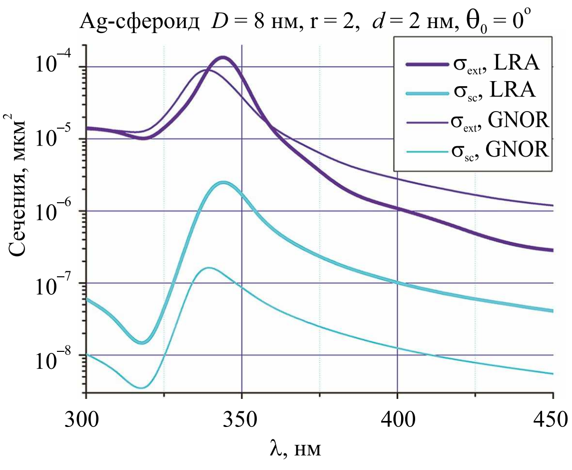

Рис. 1. $\sigma_{\text{ext}}(\lambda)$ и $\sigma_{\text{sc}}(\lambda)$ с учетом ОНО (GNOR) и без учета (LRA) для серебряных (Ag) сфероидов $D = 8$ нм, $r = 2$, $d = 2$ нм при угле падения плоской волны $\theta_0 = 0°$

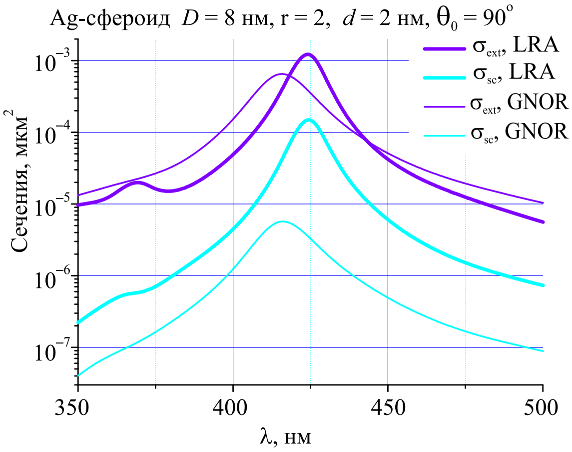

Рис. 2. $\sigma_{\text{ext}}(\lambda)$ и $\sigma_{\text{sc}}(\lambda)$ с учетом и без учета ОНО для Ag-сфероидов $D = 8$ нм, $r = 2$, $d = 2$ нм при угле падения плоской волны $\theta_0 = 90°$

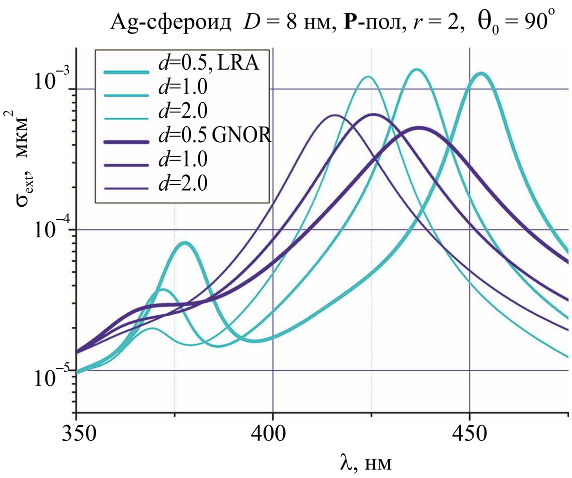

Рис. 3. $\sigma^P_{\text{ext}}(\lambda)$ с учетом и без учета ОНО $D = 8$ нм, $r = 2$, $\theta_0 = 90°$ для различных расстояний: $d = 0.5,\ 1.0,\ 2.0$ нм

угла падения $\theta_0 = 90°$ и в случае P-поляризации. Как мы видим, в этом случае интенсивности возрастают на порядок по сравнению с рис. 1, что вполне естественно, так как вектор $\mathbf{E}_0$ оказывается параллельным большим осям сфероидов. Остальные особенности, отмеченные выше, также присутствуют.

На рис. 3 для той же самой конфигурации приведены результаты для сечения экстинкции в случае P-поляризованного возбуждения, соответствующие различным расстояниям между сфероидами d. Кроме уже отмеченных выше сдвига и снижения интенсивности следует отметить еще и существенное уширение максимума ПР (broadening) в случае ОНО. Заметим также появление побочного максимума в коротковолновой области при уменьшении значений d ниже порога, при котором классическая теория Максвелла оказывается неприменимой [17]. На рис. 4 приведены аналогичные результаты, но для сечения рассеяния. В этом случае уширение еще более заметно, а различие в максимумах ПР достигает значений 25–40.

На рис. 5 приведены результаты, соответствующие поведению сечения экстинкции при изменении вытянутости сфероидов. В отличие от предыдущего, когда уменьшение расстояния приводило к смещению ПР влево, в этом случае увеличение вытянутости сфероидов приводит к сдвигу ПР в область длинных волн

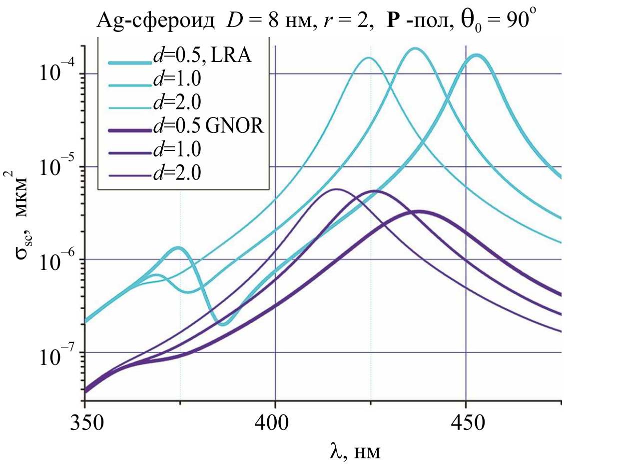

Рис. 4. $\sigma_{\mathrm{sc}}^{P}(\lambda)$ с учетом и без учета ОНО $D = 8$ нм, $r = 2$, $\theta_0 = 90^\circ$ для различных расстояний между сфероидами: $d = 0.5,\ 1.0,\ 2.0$ нм

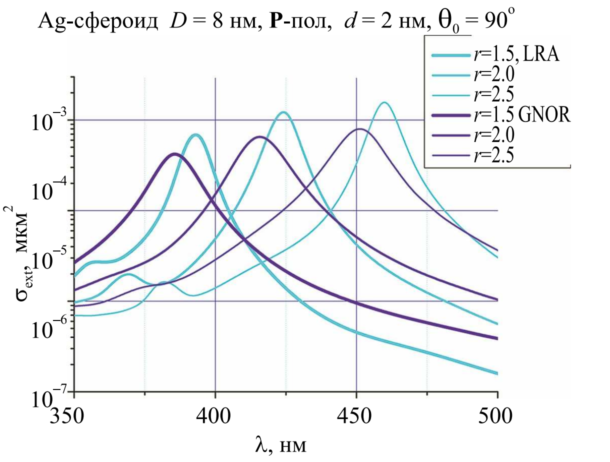

Рис. 5. $\sigma_{\mathrm{ext}}^{P}(\lambda)$ с учетом и без учета ОНО $D = 8$ нм, $d = 2$ нм, $\theta_0 = 90^\circ$ для сфероидов различной вытянутости: $r = 1.5,\ 2.0,\ 2.5$

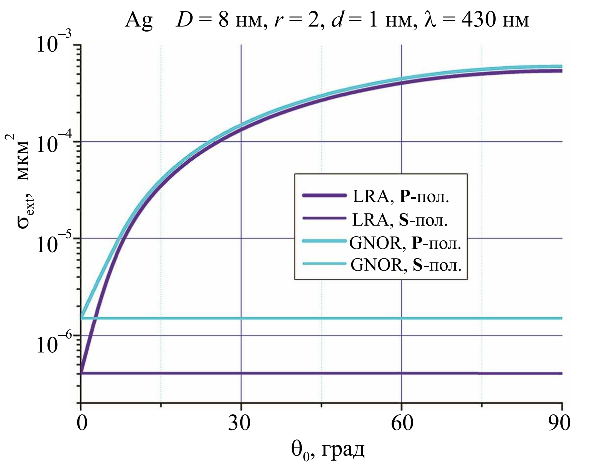

Рис. 6. $\sigma_{\mathrm{ext}}^{P,S}(\theta_0)$ с учетом и без учета ОНО $D = 8$ нм, $r = 2$, $d = 1$ нм, $\lambda = 430$ нм

с одновременным увеличением его интенсивности. Рис. 6 посвящен анализу поведения сечения экстинкции для P-, S-поляризованного возбуждения при фиксированной длине волны $\lambda = 430$ нм при различных углах падения плоской волны: $\theta_0 \in [0^\circ, 90^\circ]$. Из рисунка видно, что в то время как $\sigma_{\mathrm{ext}}^{P}(\theta_0)$ монотонно возрастает, $\sigma_{\mathrm{ext}}^{S}(\theta_0)$ остается постоянным в обоих случаях.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Метод дискретных источников был адаптирован к анализу рассеивающих свойств парных плазмонных частиц с учетом наличия продольных полей внутри в рамках модели обобщенного нелокального отклика (GNOR). Численное исследование показало, что для несферических частиц имеют место те же особенности, которые отмечались в различных работах при анализе сферических пар: снижение интенсивности плазмонного резонанса, смещение его в сторону коротких волн и уширение максимума. Новыми результатами, на наш взгляд, являются как величины этих изменений для несферических частиц, так и смещение максимумов ПР вправо при увеличении вытянутости сфероидов. Кроме этого, отмечалось существенное снижение интенсивности рассеяния по сравнению с классическим подходом. Последнее обстоятельство, по-видимому, связано с увеличением поглощения энергии внутри частиц в случае наличия продольных волн.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Климов В. В.* Наноплазмоника. М.: Физмалит, 2010.
2. *Майер С. А.* Плазмоника. Теория и приложения. М.— Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2011.
3. *Pelton M., Bryant G.* Introduction to Metal-Nanoparticle Plasmonics. John Wiley & Sons. 2013.
4. *Toscano G., Raza S., Jauho A-P.* et al. // Opt. Express. 2012. **20**, N 4. P. 4176.
5. *Kessentini S., Barchiesi D., D'Andrea C.* et al. // Phys. Chem. C. 2014. **118**. P. 3209.
6. *Гришина Н. В., Еремин Ю. А., Свешников А. Г.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2011. № 6. С. 58. (*Grishina N. V., Eremin Yu. A., Sveshnikov A. G.* // Moscow Univ. Phys. Bull. 2011. **66**, N 6. P. 552.)
7. *Eremin Y., Eremina E., Grishina N., Wriedt T.* // J. Computat. Theoretical Nanoscience. **9**, N 3. P. 469.
8. *David C., Garcнa de Abajo F. J.* // J. Phys. Chem. C. 2011. **115**, N 40. P. 19470.
9. *Raza S., Toscano G., Jauho A-P.* et al. // Phys. Rev. B. 2011. **84**. N121412(R).
10. *Стрэттон Дж. А.* Теория электромагнетизма. М.: ОГИЗ, 1948.
11. *Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.* Физическая кинетика. М.: Наука, 1978.
12. *Mortensen N. A.* // Phot. Nanostr. 2013. **11**. P. 303.
13. *Raza S., Bozhevolnyi S. I., Wubs M., Mortensen N. A.* // J. Phys.: Condens. Matter. 2015. **27**, N 18. P. 3204.
14. *Еремин Ю. А. Свешников А. Г.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2016. № 5. С. 31. (*Eremin Yu. A., Sveshnikov A. G.* // Moscow Univ. Phys. Bull. 2016. **71**, N 5. P. 492.)
15. *Mortensen N. A., Raza S., Wubs M.* et al. // Nature Commun. 2014. **5**. P. 3809.
16. *Moradi A.* // Phys. Plasmas. 2015. **22**. N032112.
17. *Esteban R., Zugarramurdi A., Zhang P.* et al. // Faraday Discussions. 2015. **178**. P. 151.
18. *Schmitt N., Scheid C., Lanteri S.* et al. // J. Computat. Phys. 2016. **316**. P. 396.
19. *Wubs M., Mortensen A.* / Quantum Plasmonics. Bozhevolnyi S. I. et al. (eds.), Springer, Switzerland. 2017. P. 279.
20. *Mc Arthur D., Hourahine B., Papoff F.* // Opt. Commun. 2017. **382**. P. 258.
21. *Еремин Ю. А., Свешников А. Г.* // ЖВМиМФ. 2007. **47**, № 2. С. 266 (*Eremin Yu. A., Sveshnikov A. G.* // Comput. Math. Math. Phys. 2007. **47**, N 2. P. 262.)
22. *Kahnert M.* // J. Quantitat. Spectr. Radiat. Trans. 2016. **178**. P. 22.

23. *Gallinet B., Butet J., Martin O. J. F.* // Laser Photonics. Rev. 2015. **9**, N 6. P. 577.
24. *Бахвалов Н. С.* Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения). М.: Наука, 1975.
25. *Морозов В.А*. Регулярные методы решения некорректно поставленных задач. М.: Наука, 1987.
26. *Newton R. G.* Scattering Theory of Waves and Particles. McGraw Hill, 1966.
27. http://www.refractiveindex.info
28. *Raza S.,Wubs M., Bozhevolnyi S. I., Mortensen N. A.* // Opt. Lett. 2015. **40**, N 5. P. 839.
29. *Cacciola A., Iatм M. A., Saija R.* et al. // J. Quantit. Spectr. Radiat. Trans. 2017. **195**. P. 97.
30. *Tserkezis C., Yan W., Hsieh W.* et al. // Int. J. Modern Physics B. 2017. **31**. 1740005.
31. *Tserkezis C., Mortensen N. A., Wubs M.* // Phys. Rev. B. 2017. **96**. 085413.
32. *Roller E.-M., Besteiro L. V., Pupp C.* et al. // Nat. Phys. 2017. **13**. P. 761.

Analysis of the Influence of Longitudinal Fields on the Scattering Properties of Nonspherical Plasmonic Nanoparticle Clusters via the Discrete–Sources Method

Yu. A. Eremin[1,a], **A. G. Sveshnikov**[2,b]

[1]*Department of Mathematical Physics, Computational Mathematics and Cybernetics Faculty, Lomonosov Moscow State University. Moscow 119991, Russia.*
[2]*Department of Mathematics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University. Moscow 119991, Russia.*
E-mail: [a]eremin@cs.msu.ru, [b]sveshnikov@phys.msu.ru.

We consider the problem of diffraction of a plane electromagnetic wave field at a linear cluster consisting of two plasmonic nanoparticles while accounting for the nonlocal effect. The research is based on the mathematical model of the generalized non-local optical response. On the basis of the modification of the discrete sources method, a comparative numerical analysis of the scattering characteristics in the frequency domain is carried out depending on the geometry of the particles and the distance between them. It has been established that taking longitudinal fields into account has a significant influence on the extinction cross section and even more on the scattering cross section.

Keywords: light scattering, plasmonic nanoparticles, longitudinal fields, generalized non-local optical response model, discrete-sources method.
PACS: 42.25.-p; 42.25.Fx.
Received 28 December 2017.

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2018. **73**, No. 5. Pp. 475–481.

Сведения об авторах

1. Еремин Юрий Александрович — доктор физ.-мат. наук, вед. науч. сотрудник; тел.: (495) 939-17-76, e-mail: eremin@cs.msu.ru.
2. Свешников Алексей Георгиевич — доктор физ.-мат. наук, профессор; тел.: (495) 939-10, e-mail: sveshnikov@phys.msu.ru.