

Влияние асимметрии геометрии слоистой частицы на подложке на оптические характеристики с учетом пространственной дисперсии

Ю. А. Еремин,^{1, а} А. Г. Свешников^{2, б}

¹ Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, факультет вычислительной математики и кибернетики, кафедра математической физики. Россия, 19991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 52.

² Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра математики. Россия, 19991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 51.

Поступила в редакцию 16.06.2020, после доработки 14.07.2020, принята к публикации 14.07.2020.

Рассматривается задача возбуждения слоистой частицы, расположенной на прозрачной подложке, полем неизлучающей электромагнитной волны. Частица представляет собой диэлектрическую сердцевину с металлическим наноразмерным плазмонным слоем, в котором возникает пространственная дисперсия. На основе метода Дискретных источников строится модель, учитывающая наличие подложки и присутствие нелокальности в металле на оптические характеристики рассеяния. Исследуется влияние асимметрии геометрии частицы на оптические характеристики ближнего поля. Установлено, что асимметрия геометрии частицы существенно влияет на коэффициент усиления интенсивности, а также на сечение поглощения в металле.

Ключевые слова: слоистая частица на подложке, неизлучающее поле, метод дискретных источников, пространственная дисперсия, обобщенный нелокальный оптический отклик.

УДК: 535.42, 519.63. PACS: 42.25.Fx, 42.50.Nn, 03.50.De, 03.65.Ud.

ВВЕДЕНИЕ

Поверхностные плазмоны позволяют ограничивать электромагнитные поля до субволнового масштаба, значительно превышающего классический предел оптической дифракции. С непрерывным уменьшением объема оптических мод в глубину субволновой шкалы открывается новая эра квантовой плазмоники, которая исследует квантовое поведение поверхностных плазмонов и их взаимодействия с веществом. Эта новая и интригующая область создает много новых возможностей в продвижении границ фундаментальной науки и прикладной квантовой технологии [1].

За последние десятилетия использование слоистых наночастиц приобрело огромную популярность благодаря возможности манипулирования материалами и размерами как ядра, так и оболочки для управления их плазмонными свойствами. Это обстоятельство выгодно отличает их от однородных частиц. Благодаря впечатляющему прогрессу в материаловедении слоистые наночастицы теперь могут быть синтезированы с улучшенными физико-химическими свойствами и четко определенными размерами, формой и составом [2]. Способность слоистых наночастиц к сверхвысокому усилению поля и концентрации субволнового поля привела к широкому разнообразию применений во многих областях, таких как накопители и преобразователи энергии, оптические сенсоры и средства диагностики и лечения опухолей [3–5]. Особый интерес в наноплазмонике вызывает проблема разработки и реализации плазмонного нанолазера. Плазмонные нанолазеры, основанные на использовании слоистых резонаторов, имеют преимущества наноразмера, низкого энергетического порога и супермалого времени отклика [6, 7].

В целом ряде практических приложений возникает необходимость в исследовании оптических свойств слоистых наночастиц, расположенных на диэлектрической подложке. В этом случае весьма важно строго учитывать взаимодействие между частицей и поверхностью подложки. Это обстоятельство возникает, в частности, при решении проблем синтеза слоистых структур для обеспечения требуемых спектральных свойств [8, 9]. При уменьшении толщины плазмонного покрытия до нескольких нанометров взаимодействие электронов в плазмонном металле следует учитывать на другом уровне. В этом случае толщина слоя становится сравнимой с длиной волны Ферми электронов в металле (~ 5 нм для золота и серебра), и возникает так называемая пространственная дисперсия. При этом классической теории Максвелла оказывается недостаточно для описания электромагнитных свойств плазмонного металла [1].

Существуют различные подходы к описанию возникающей пространственной дисперсии (ПД) в металле, начиная с полной квантово-механической модели, в рамках которой моделируется поведение каждого электрона внутри металла на основе уравнения Шредингера. Она хорошо подходит для объяснения экспериментальных результатов, но применима лишь к плазмонным частицам с размерами всего несколько нанометров [10]. В настоящее время наиболее востребованными являются квазиклассические подходы, которые позволяют учесть возникающие квантовые эффекты в рамках электромагнитной теории Максвелла. Одним из таких подходов, учитывающих ПД металла, является гидродинамическая модель Друде [11, 12]. Она позволяет учитывать возникающие в металле продольные поля, но требует корректировки квантовых параметров металла при рассмотрении частиц, форма которых отличается от сферической [13]. Следующая модель, свободная от этого ограничения, получила название Обобщенного нелокального оптического отклика (ОНО) [14].

^а E-mail: eremin@cs.msu.ru

^б E-mail: sveshnikov@phys.msu.ru

В рамках ОНО учитывается диффузия электронов в металле в рамках гидродинамической теории. Это обстоятельство дает возможность исследовать как несферические частицы, так и их кластеры. Теория ОНО позволяет учитывать как возникающие внутри металла продольные поля, так и дополнительные граничные условия, поставленные на границах раздела между металлом и диэлектриком [15, 16].

Мы используем модель ОНО в рамках метода Дискретных источников (МДИ) [17]. МДИ — строгий численно аналитический поверхностно ориентированный метод. Он основан на представлении полей в виде конечной линейной комбинации распределенных мультиполей низшего порядка [18], удовлетворяющих полуклассическим уравнениям Максвелла, включая продольные поля, внутри металлической оболочки [19]. В случае наличия подложки для представления рассеянных полей вне частицы используется тензор Грина полупространства [20]. Таким образом, представления полей во всех областях удовлетворяют уравнениям Максвелла, условиям бесконечности и условиям сопряжения на бесконечной поверхности подложки в аналитическом виде. Соответствующие амплитуды ДИ определяются из условий сопряжения, поставленных на поверхностях, ограничивающих металлический слой. Исключительная особенность МДИ состоит в том, что он позволяет оценить реальную погрешность полученного решения посредством вычисления невязки полей на поверхностях разрыва характеристик среды слоистой частицы. Все эти моменты позволили использовать МДИ для анализа плазмонных наноструктур с учетом эффекта ПД, в рамках модели обобщенного нелокального отклика [17–20].

1. ПОСТАНОВКА ГРАНИЧНОЙ ЗАДАЧИ ДИФРАКЦИИ

Пусть пространство \mathbb{R}^3 разделено на два полупространства: верхнее полупространство — D_0 : ($z > 0$) и диэлектрическая подложка — D_1 : ($z < 0$). Обозначим Σ : ($z = 0$) плоскую границу раздела. Пусть сферическая слоистая частица целиком располагается в верхнем полупространстве D_0 . Ядро частицы обозначим как D_i , а металлическую оболочку — как D_s . Соответствующие сферические границы будем обозначать как $\partial D_{i,s}$. Все среды предполагаются немагнитными, а их диэлектрические проницаемости обозначим ε_ν , $\nu = 0, 1, i, s$.

Суть ПД заключается в том, что связь между смещением $\mathbf{D}(M)$ и электрическим полем $E(M)$ становится нелокальной, то есть соотношение $\mathbf{D}(M) = \varepsilon(M)\mathbf{E}(M)$ заменяется на $\mathbf{D}(M) = \int \varepsilon(M - M')\mathbf{E}(M')dM'$, которое переходит в локальное в случае $\varepsilon(M - M') = \delta(M - M')$ [14]. Одним из проявлений ПД является появление внутри металла продольных электромагнитных полей. В этом случае внутреннее электрическое поле \mathbf{E} перестает быть чисто поперечным ($\text{div } \mathbf{E}^T = 0$) за счет формирования объемного заряда, и для адекватного описания происходящих процессов возникает необходимость привлечения дополнительно продольных полей ($\text{rot } \mathbf{E}^L = 0$) [21]. Для учета нелокальности используется гидродинамическая теория Друдэ и ее

обобщение — модель ОНО [12]. В рамках теории ОНО проводится обобщение закона Ома для тока проводимости внутри металла, то есть осуществляется переход следующего вида:

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E} \Rightarrow \xi^2 \text{grad}(\text{div } \mathbf{J}) + \mathbf{J} = \sigma \mathbf{E},$$

где σ — проводимость металла, а ξ — параметр нелокальности [16]. В результате чего изменяется соответствующее уравнение системы Максвелла для магнитного поля. В силу изложенных обстоятельств внутри плазмонного металла происходит расщепление электрического поля на поперечное и продольное: $\mathbf{E}_s = \mathbf{E}_s^T + \mathbf{E}_s^L$, $\text{div } \mathbf{E}_s^T = 0$, $\text{rot } \mathbf{E}_s^L = 0$. Можно показать [22], что эти поля внутри оболочки D_s удовлетворяют уравнениям Гельмгольца

$$\Delta \mathbf{E}^T(M) + k_T^2 \mathbf{E}^T(M) = 0, \quad (1)$$

$$\Delta \mathbf{E}^L(M) + k_L^2 \mathbf{E}^L(M) = 0, \quad (2)$$

здесь $k_T^2 = k^2 \varepsilon_s$, $k_L^2 = \varepsilon_s / \xi$ — поперечное и продольное волновые числа, а $k = \omega / c$.

Перейдем к формулировке математической постановки граничной задачи рассеяния для системы Максвелла с учетом ОНО. Обозначим $\{\mathbf{E}^0, \mathbf{H}^0\}$ — поле плоской электромагнитной волны линейной поляризации, распространяющейся из нижнего полупространства в полуплоскости $\varphi = \pi$ и образующей угол θ_0 с осью Oz , направленной из D_1 в D_0 . Тогда постановка граничной задачи рассеяния с учетом ПД может быть записана в следующем виде:

$$\begin{aligned} \text{rot } \mathbf{H}_\zeta &= jk\varepsilon_\zeta \mathbf{E}_\zeta; \quad \text{rot } \mathbf{E}_\zeta = -jk\mathbf{H}_\zeta \quad \text{в } D_\zeta, \quad \zeta = 0, 1, i, \\ \text{rot } \mathbf{H}_s &= jk(\varepsilon_s + \xi^2 \text{grad div})\mathbf{E}_s(M); \\ \text{rot } \mathbf{E}_s &= -jk\mathbf{H}_s \quad \text{в } D_s, \\ \mathbf{n}_i \times (\mathbf{E}_i(P) - \mathbf{E}_s(P)) &= 0, \\ \mathbf{n}_i \times (\mathbf{H}_i(P) - \mathbf{H}_s(P)) &= 0, \quad P \in \partial D_i; \\ \varepsilon_i \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{E}_i(P) &= \varepsilon_L \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{E}_s(P), \\ \mathbf{e}_z \times (\mathbf{E}_0(Q) - \mathbf{E}_1(Q)) &= 0, \\ \mathbf{e}_z \times (\mathbf{H}_0(Q) - \mathbf{H}_1(Q)) &= 0, \quad Q \in \Sigma; \\ \mathbf{n}_l \times (\mathbf{E}_s(P) - \mathbf{E}_0^s(P)) &= \mathbf{n}_s \times \mathbf{E}_0^0(P), \\ \mathbf{n}_l \times (\mathbf{H}_s(P) - \mathbf{H}_0^s(P)) &= \mathbf{n}_s \times \mathbf{H}_0^0(P), \quad P \in \partial D_s; \\ \varepsilon_L \mathbf{n}_s \cdot \mathbf{E}_s(P) &= \varepsilon_0 \mathbf{n}_s \cdot (\mathbf{E}_0^0(P) + \mathbf{E}_0^s(P)), \\ \lim_{r \rightarrow \infty} r \cdot \left(\mathbf{H}_\zeta^s \times \frac{\mathbf{r}}{r} - \sqrt{\varepsilon_\zeta} \mathbf{E}_\zeta^s \right) &= 0; \\ r = |M| \rightarrow \infty, \zeta = 0, 1, z \neq 0; \\ \max(|\mathbf{H}_\zeta^s|, |\mathbf{E}_\zeta^s|) &= O(\rho^{-1/2}), \\ \rho = \sqrt{x^2 + y^2}, \rho \rightarrow \infty, z = \pm 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $\{\mathbf{E}_\zeta, \mathbf{H}_\zeta\}$ — полные поля в D_ζ , $\zeta = 0, 1, i, s$ соответственно, $\mathbf{n}_{i,s}$ — единичные нормали к поверхностям $\partial D_{i,s}$, \mathbf{e}_z — нормаль к подложке, а характеристики среды выбраны таким образом, что $\text{Im } \varepsilon_{0,1,i} = 0$, $\text{Im } \varepsilon_s \leq 0$, $\text{Im } \varepsilon_L \leq 0$. Предполагается, что временная зависимость выбрана в виде $\exp\{j\omega t\}$.

Конкретизируем остальные величины, входящие в постановку задачи (3). Поля $\{\mathbf{E}_\zeta^0, \mathbf{H}_\zeta^0\}$, $\zeta = 0, 1$ представляют собой результат решения задачи отражения и преломления поля плоской волны $\{\mathbf{E}^0, \mathbf{H}^0\}$ на поверхности раздела полупространств Σ . $\{\mathbf{E}_\zeta^s, \mathbf{H}_\zeta^s\}$, $\zeta = 0, 1$ есть рассеянное поле

в каждом из полупространств, которое определяется как $\mathbf{E}_\zeta^s = \mathbf{E}_\zeta - \mathbf{E}_\zeta^0$, $\mathbf{H}_\zeta^s = \mathbf{H}_\zeta - \mathbf{H}_\zeta^0$, $\zeta = 0, 1$. В силу построения поля внешнего возбуждения и граничных условий на Σ рассеянное поле $\{\mathbf{E}_\zeta^s, \mathbf{H}_\zeta^s\}$, $\zeta = 0, 1$ также должно удовлетворять условиям сопряжения для тангенциальных компонент на бесконечной границе Σ .

На поверхностях $\partial D_{i,s}$ в дополнение к классическим условиям сопряжения поставлены дополнительные условия для нормальных компонент полей, необходимые для однозначной разрешимости задачи. Эти условия физически соответствуют условиям обращения в нуль нормальной компоненты тока проводимости на границах раздела металл—диэлектрик $\mathbf{n} \cdot \mathbf{J} = 0$, которые затем трансформируются в условия для нормальных компонент полей [16]. Условия излучения задачи (3) сформулированы таким образом, чтобы обеспечить обращение в нуль потока энергии на бесконечности для однородной задачи (3) [23]. Мы будем полагать, что поставленная граничная задача (3) имеет единственное классическое решение.

Параметры ξ и ε_L , относящиеся к продольному полю \mathbf{E}_s^L , определяются следующим образом $\varepsilon_L = \varepsilon_s - \omega_p^2 / (j\gamma\omega - \omega^2)$, $\xi^2 = \varepsilon_s(\beta^2 + D(\gamma + j\omega)) / (\omega^2 - j\gamma\omega)$. Здесь ω_p — плазменная частота металла, γ — коэффициент затухания, β — гидродинамическая скорость в плазме связана со скоростью Ферми v_F соотношением $\beta^2 = 3/5v_F^2$, D — коэффициент диффузии электронов [14].

2. МЕТОД ДИСКРЕТНЫХ ИСТОЧНИКОВ С УЧЕТОМ ПРИЗМЫ И МОДЕЛИ ОНО

Будем строить приближенное решение задачи (3), руководствуясь схемой [20]. Ограничимся случаем P -поляризации, поскольку именно она реализует наибольшую амплитуду плазмонного резонанса [17]. Так как частица целиком располагается в верхнем полупространстве — D_0 , то поле преломленной волны $\{\mathbf{E}_0^0, \mathbf{H}_0^0\}$ приобретает вид

$$\mathbf{E}_0^0(M) = T^P(-\mathbf{e}_x \cos \theta_0 + \mathbf{e}_z \sin \theta_0) \times \exp\{-jk_0(x \sin \theta_0 + z \cos \theta_0)\},$$

$$\mathbf{H}_0^0(M) = T^P n_0 \mathbf{e}_y \exp\{-jk_0(x \sin \theta_0 + z \cos \theta_0)\}.$$

Здесь $n_0 = \sqrt{\varepsilon_0}$, T^P — коэффициент преломления Френеля [24], а $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ — единичные векторы декартовой системы координат. В соответствии с законом Снеллиуса имеем $n_0 \sin \theta_0 = n_1 \sin \theta_1$, $n_1 = \sqrt{\varepsilon_1}$. Таким образом, преломленный угол $\theta_0 = \arcsin(n_1/n_0 \sin \theta_1)$. В случае когда волна падает из более плотной среды в менее плотную $n_1 > n_0$, существует критический $\theta_c = \arcsin(n_0/n_1)$ (угол полного внутреннего отражения), за которым волна не проходит в верхнее полупространство, так как полностью отражается от поверхности Σ . При этом энергия распространяется вдоль поверхности раздела полупространств и экспоненциально затухает в направлении \mathbf{e}_z . В этом случае $\sin \theta_0 > 1$, а $\cos \theta_0$ принимает значение $\cos \theta_0 = -j\sqrt{\sin^2 \theta_0 - 1}$. Таким образом, амплитуда плоской волны в D_0 приобретает вид $\exp\{-jk_0 x \sin \theta_0\} \exp\{-k_0 z \sqrt{\sin^2 \theta_0 - 1}\}$.

Построим приближенное решение задачи (3) для рассеянного поля в D_0 с учетом осевой симметрии и поляризации, удовлетворяя квазиклассической системе уравнений Максвелла во всех областях постоянства параметров среды, условиям излучения и условиям сопряжения для полей на Σ . В основу представления для рассеянного поля положим Фурье компоненты тензора Грина полупространства, которые могут быть записаны в виде интегральных представлений Вейля—Зоммерфельда [20]:

$$G_m^{e,h}(\eta, z_n) = \int_0^\infty J_m(\lambda\rho) v_{11}^{e,h}(\lambda, z, z_n) \lambda^{1+m} d\lambda,$$

$$g_m^{e,h}(\eta, z_n) = \int_0^\infty J_m(\lambda\rho) v_{31}^{e,h}(\lambda, z, z_n) \lambda^{1+m} d\lambda,$$

здесь $J_m(\cdot)$ — цилиндрическая функция Бесселя, точка $\eta = (\rho, z)$ располагается в полуплоскости $\varphi = \text{const}$, а точки локализации мультиполей распределены вдоль оси симметрии $z_n \in OZ$ строго внутри $D_i \cup D_s$. Спектральные функции электрического и магнитного типов $v_{11}^{e,h}, v_{31}^{e,h}$ обеспечивают выполнение условий сопряжения на границе интерфейса $z = 0$. В данном случае для них справедливы следующие выражения:

$$v_{11}^{e,h}(\lambda, z, z_n) = \begin{cases} \frac{\exp\{-\eta_0 |z - z_n|\}}{\eta_0} + A_{11}^{e,h}(\lambda) \frac{\exp\{-\eta_0(z + z_n)\}}{\eta_0}, & z_n > 0, z \geq 0, \\ B_{11}^{e,h}(\lambda) \frac{\exp\{\eta_1 z - \eta_0 z_n\}}{\eta_0}, & z_n > 0, z \leq 0, \end{cases}$$

$$v_{31}^{e,h}(\lambda, z, z_n) = \begin{cases} A_{31}^{e,h}(\lambda) \exp\{-\eta_0(z + z_n)\}, & z_n > 0, z \geq 0, \\ B_{31}^{e,h}(\lambda) \exp\{\eta_1 z - \eta_0 z_0\}, & z_0 > 0, z \leq 0. \end{cases}$$

Спектральные коэффициенты A, B определяются из одномерной задачи с условиями сопряжения при $z = 0$, откуда легко получается, что

$$A_{11}^{e,h}(\lambda) = \frac{\chi_0^{e,h} - \chi_1^{e,h}}{\chi_0^{e,h} + \chi_1^{e,h}}; \quad B_{11}^{e,h}(\lambda) = \frac{2\chi_0^{e,h}}{\chi_0^{e,h} + \chi_1^{e,h}};$$

$$A_{31}^{e,h}(\lambda) = \frac{2\delta}{(\chi_0^e + \chi_1^e)(\chi_0^h + \chi_1^h)}; \quad \delta = 1/\varepsilon_0 - 1/\varepsilon_1,$$

$$B_{31}^{e,h}(\lambda, z_0) = \left(1, \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0}\right) \frac{2\delta}{(\chi_0^e + \chi_1^e)(\chi_0^h + \chi_1^h)},$$

где $\eta_\zeta = \sqrt{\lambda^2 - k_\zeta^2}$, $\chi_\zeta^e = \eta_\zeta$, $\chi_\zeta^h = \eta_\zeta/\varepsilon_\zeta$, $\zeta = 0, 1$.

Для построения приближенного решения для рассеянного поля в D_0 используются векторные потенциалы, которые в цилиндрической системе координат записываются как

$$\mathbf{A}_{mn}^{(e)0} = \{G_m^e(\eta, z_n^e) \cos(m+1)\varphi; \\ - G_m^e(\eta, z_n^e) \sin(m+1)\varphi; \\ - g_m^e(\eta, z_n^e) \cos(m+1)\varphi\},$$

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{mn}^{(h)0} &= \{G_m^h(\eta, z_n^e) \sin(m+1)\varphi; \\ &G_m^h(\eta, z_n^e) \cos(m+1)\varphi; \\ &- g_{m+1}^h(\eta, z_n^e) \sin(m+1)\varphi\}, \\ \mathbf{A}_{0n}^{(e)0} &= \{0; 0; G_0^h(\eta, z_n^e)\}. \end{aligned} \quad (4)$$

Для построения полей внутри областей $D_{i,s}$ будут использоваться следующие потенциалы:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{mn}^{(e)\nu} &= \{Y_m^\nu(\eta, z_n^\nu) \cos(m+1)\varphi; \\ &- Y_m^\nu(\eta, z_n^\nu) \sin(m+1)\varphi; 0\}, \quad \nu = i, s\pm; \\ \mathbf{A}_{mn}^{(h)\nu} &= \{Y_m^\nu(\eta, z_n^\nu) \sin(m+1)\varphi; \\ &Y_m^\nu(\eta, z_n^\nu) \cos(m+1)\varphi; 0\}, \\ \mathbf{A}_n^{(e)\nu} &= \{0; 0; Y_0^\nu(\eta, z_n^\nu)\}. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь $Y_m^i(\eta, z_n^i) = j_m(k_i r_{\eta z_n^i})(\rho/r_{\eta z_n^i})^m$, $j_m(\cdot)$ — сферическая функция Бесселя, $Y_m^{s\pm}(\eta, z_n^s) = h_m^{(2,1)}(k_s r_{\eta z_n^s})(\rho/r_{\eta z_n^s})^m$, $h_m^{(2,1)}(\cdot)$ — сферические функции Ханкеля, соответствующие «уходящим» и «приходящим» волнам, $r_{\eta z_n}^2 = \rho^2 + (z - z_n)^2$, $\eta = (\rho, z)$, $k_{i,s} = k\sqrt{\varepsilon_{i,s}}$, $z_n^{i,s}$ — координаты дискретных источников (ДИ). Следует отметить, что функции, положенные в основу векторных потенциалов (4), (5), удовлетворяют уравнению Гельмгольца (1).

Для случая P -поляризации продольное поле строится на основе следующих скалярных потенциалов [19]:

$$\begin{aligned} \Psi_{mn}^{s\pm}(M) &= h_{m+1}^{(2,1)}(k_L R_{\eta z_n^s}) P_{m+1}^{m+1}(\cos \theta_{z_n^s}) \cos(m+1)\varphi, \\ \Psi_n^{s\pm}(M) &= h_0^{(2,1)}(k_L R_{\xi z_n^s}), \end{aligned}$$

которые удовлетворяют уравнению Гельмгольца (2). Тогда приближенное решение для полного поля внутри частицы и рассеянного в D_0 , соответствующее P -поляризации, принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_\nu^{TN} &= \sum_{m=0}^M \sum_{n=1}^{N_\nu^m} \left\{ p_{mn}^\nu \frac{j}{k\varepsilon_\nu} \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{A}_{mn}^{(e)\nu} + \right. \\ &\left. + q_{mn}^\nu \frac{1}{\varepsilon_\nu} \operatorname{rot} \mathbf{A}_{mn}^{(h)\nu} \right\} + \sum_{n=1}^{N_\nu^0} r_n^\nu \frac{j}{k\varepsilon_\nu} \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{A}_n^{(e)\nu}; \quad (6) \\ \mathbf{E}_{s\pm}^{LN} &= \sum_{m=0}^M \sum_{n=1}^{N_s^m} \bar{p}_{mn}^{s\pm} \operatorname{grad} \Psi_{mn}^{s\pm} + \sum_{n=1}^{N_s^m} \bar{r}_n^{s\pm} \operatorname{grad} \Psi_n^{s\pm}; \\ \mathbf{H}_\nu^N &= \frac{j}{k} \operatorname{rot} \mathbf{E}_\nu^N, \quad \nu = 0, i, s\pm. \end{aligned}$$

Заметим, что внутри оболочки D_s электромагнитное поле строится как сумма «уходящих» и «приходящих» волн, то есть

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_s^N &= \mathbf{E}_{s+}^{TN} + \mathbf{E}_{s-}^{TN} + \mathbf{E}_{s+}^{LN} + \mathbf{E}_{s-}^{LN}, \\ \operatorname{div} \mathbf{E}_{s\pm}^{TN} &= 0, \quad \operatorname{rot} \mathbf{E}_{s\pm}^{LN} = 0. \end{aligned}$$

Построенные поля (6) удовлетворяют квазиклассической системе уравнений Максвелла граничной задачи (3) и условиям сопряжения на бесконечной поверхности подложки Σ . А неизвестные амплитуды ДИ $\{p_{mn}^\nu, q_{mn}^\nu, r_n^\nu, \bar{p}_{mn}^{s\pm}, \bar{r}_n^{s\pm}\}$ определяются из

условий сопряжения на поверхностях $\partial D_{i,s}$. Численный алгоритм строится по стандартной схеме, изложенной в [17], с учетом особенностей поведения продольного и поперечного волновых чисел [19].

Для вычисления характеристик рассеяния в дальней зоне нам понадобится диаграмма направленности рассеянного поля $\mathbf{F}(\theta, \varphi)$, которая определяется в верхнем и нижнем полупространствах как

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{0,1}^s(r) / |\mathbf{E}^0(z=0)| &= \\ &= \frac{\exp\{-jk_0,1r\}}{r} \mathbf{F}^{(0,1)}(\theta, \varphi) + O(1/r^2), \quad r \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Тогда (θ, φ) компоненты диаграммы на единичной верхней полусфере $\Omega^+ = \{0 \leq \theta \leq \pi/2; 0 \leq \varphi \leq 2\pi\}$ для P -поляризации принимают вид

$$\begin{aligned} F_\theta^{P(0)}(\theta, \varphi) &= jk_0 \sum_{m=0}^M \cos((m+1)\varphi) (j \sin \theta)^m \times \\ &\times \sum_{n=1}^{N_0^m} \left\{ p_{nm}^0 \left[\bar{G}_n^{e(0)} \cos \theta + jk_0 \bar{g}_n^{e(0)} \sin^2 \theta \right] + q_{nm}^0 \bar{G}_n^{h(0)} \right\} - \\ &- j \frac{k_0}{\varepsilon_0} \sin \theta \sum_{n=1}^{N_0^0} r_n^0 \bar{G}_n^{h(0)}, \quad (7) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F_\varphi^{P(0)}(\theta, \varphi) &= -jk_0 \sum_{m=0}^M \sin((m+1)\varphi) (j \sin \theta)^m \times \\ &\times \sum_{n=1}^{N_0^m} \left\{ p_{nm}^0 \bar{G}_n^{e(0)} + q_{nm}^0 \left[\bar{G}_n^{h(0)} \cos \theta + jk_0 \bar{g}_n^{h(0)} \sin^2 \theta \right] \right\}, \end{aligned}$$

где соответствующие спектральные функции $\bar{G}_n^{e,h}$, \bar{g}_n^{h} могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned} \bar{G}_n^{e,h(0)}(\theta) &= \exp\{jk_0 z_n \cos \theta\} + \\ &+ A_{11}^{e,h}(k_0 \sin \theta) \cdot \exp\{-jk_0 z_n \cos \theta\}, \quad z_n > 0; \\ \bar{g}_n^{e,h(0)}(\theta) &= jk_0 \cos \theta A_{31}^{e,h}(k_0 \sin \theta) \cdot \exp\{-jk_0 z_n \cos \theta\}. \end{aligned}$$

В нижнем полупространстве $\Omega^- = \{\pi/2 \leq \theta \leq \pi; 0 \leq \varphi \leq 2\pi\}$ компоненты диаграммы имеют вид

$$\begin{aligned} F_\theta^{P(1)}(\theta, \varphi) &= jk |\cos \theta| \sum_{m=0}^M (jk_1 \sin \theta)^m \cos(m+1)\varphi \times \\ &\times \sum_{n=1}^{N_m} \left\{ p_{nm}^0 \left[\bar{G}_n^{e(1)} \cos \theta + jk_1 \sin^2 \theta \bar{g}_n^{e(1)} \right] + q_{nm}^0 \bar{G}_n^{h(1)} \right\} - \\ &- jk \sin \theta |\cos \theta| \sum_{n=1}^{N_0} r_n^0 \bar{G}_n^{e(1)}, \quad (8) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F_\varphi^{P(1)}(\theta, \varphi) &= -jk |\cos \theta| \sum_{m=0}^M (jk_1 \sin \theta)^m \sin(m+1)\varphi \times \\ &\times \sum_{n=1}^{N_m} \left\{ p_{nm}^0 \bar{G}_n^{e(1)} + q_{nm}^0 \left[\bar{G}_n^{h(1)} \cos \theta + jk_1 \sin^2 \theta \bar{g}_n^{h(1)} \right] \right\}, \end{aligned}$$

где спектральные функции $\bar{G}_n^{e,h(1)}, \bar{g}_n^{e,h(1)}$ записываются следующим образом

$$\begin{aligned}\bar{G}_n^{e,h(1)}(\theta) &= (k_1, jk) \cdot B_{11}^{e,h}(k_1 \sin \theta) \times \\ &\times \exp \left\{ -jk \left(\sqrt{1 - \varepsilon_1 \sin^2 \theta} \right) z_n \right\}, \\ \bar{g}_n^{e,h(1)}(\theta) &= (k_1, jk) \cdot B_{31}^e(k_1 \sin \theta) \times \\ &\times \exp \left\{ -jk \left(\sqrt{1 - \varepsilon_1 \sin^2 \theta} \right) z_n \right\}.\end{aligned}$$

Определив амплитуды ДИ для рассеянного поля, можно легко вычислить компоненты диаграммы направленности (7), (8) всюду на единичной сфере, а также поле (6) в непосредственной близости от частицы. Следует подчеркнуть, что диаграмма рассеяния во всем пространстве вычисляется на основе одних и тех же амплитуд ДИ $\{p_{nm}^0, q_{nm}^0, r_n^0\}$, что является следствием использования тензора Грина, реализующего единое представление для рассеянного поля всюду в $D_{0,1}$.

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Будем рассматривать слоистую сферическую частицу с фиксированным диаметром ядра $D = 16$ нм, состоящего из SiO_2 с индексом рефракции $n_i = 1.46$ и золотой оболочкой, толщину которой обозначим как d . Пусть частица располагается на стеклянной подложке SF11 с индексом рефракции $n_1 = 1.78$ в воде с индексом $n_0 = 1.33$. В этом случае критический угол равен $\theta_C = 48.35^\circ$ и соответственно область неизлучающих волн начинается сразу за этим углом. Мы будем преимущественно использовать угол падения $\theta_0 = 50^\circ$. В расчетах частотная дисперсия золота учитывается в соответствии с экспериментальными результатами [25].

Нас будут интересовать интегральный поперечник рассеяния

$$\begin{aligned}\sigma_{sc}^{0,1}(\theta_0, \lambda) &= \\ &= \int_{\Omega^\pm} \left| F_\theta^{(0,1)}(\theta_0, \theta, \varphi) \right|^2 + \left| F_\varphi^{(0,1)}(\theta_0, \theta, \varphi) \right|^2 d\omega, \quad (9)\end{aligned}$$

сечение поглощения, которое имеет вид

$$\begin{aligned}\sigma_{abs}(\theta_0, \lambda) &= \\ &= -\text{Re} \int_{\partial D_s} (\mathbf{E}_0^N + \mathbf{E}_0^0) \times (\mathbf{H}_0^N + \mathbf{H}_0^0)^* d\sigma, \quad (10)\end{aligned}$$

а также интегральный коэффициент усиления интенсивности поля

$$E(\theta_0, \lambda) = \int_{\partial D_s} |\mathbf{E}_0^N + \mathbf{E}_0^0|^2 d\sigma \Big/ \int_{\partial D_s} |\mathbf{E}_0^0|^2 d\sigma. \quad (11)$$

Размерности интенсивности и сечения поглощения $[\text{мкм}^2]$.

Перейдем к анализу влияния ПД на сечение рассеяния (9), сечение поглощения (10) и коэффициент усиления (11). Для золота соответствующие квантовые параметры, необходимые для вычисления

нелокальных величин ε_L и k_L выбраны в соответствии с [26], то есть

$$\begin{aligned}\hbar\omega_p &= 9.03 \text{ эВ}, \quad \hbar\gamma = 0.053 \text{ эВ}, \\ v_F &= 1.40 \cdot 10^{12} \text{ мкм/с}, \quad D = 8.62 \cdot 10^8 \text{ мкм}^2/\text{с}.\end{aligned}$$

Задавая длину волны внешнего возбуждения λ , вычисляя соответствующее значение ω , легко определить значения нелокальных параметров ε_L и k_L .

На рис. 1 приведены сравнительные результаты интенсивности рассеяния $\sigma_{sc}^{0,1}(\theta_0 = 50^\circ, \lambda)$ в верхнее полупространство и в призму для толщины пленки $d = 4$ нм при угле падения волны $\theta_0 = 50^\circ$. Результаты показывают, что при таком возбуждении большая часть энергии рассеивается назад в призму. Кроме того видно, что учет ПД (NLE) снижает интенсивность в максимуме на 25% при небольшом сдвиге в коротковолновую область. Аналогичные результаты имеют место и при толщине пленки $d = 2$ нм.

Рис. 2 посвящен рассмотрению поведения сечения поглощения $\sigma_{abs}(\theta_0)$ в зависимости от угла падения волны для толщин $d = 2, 4$ нм. Кривые соответствуют длинам волн плазмонного резонанса. Видно, что максимумы достигаются вблизи угла полного

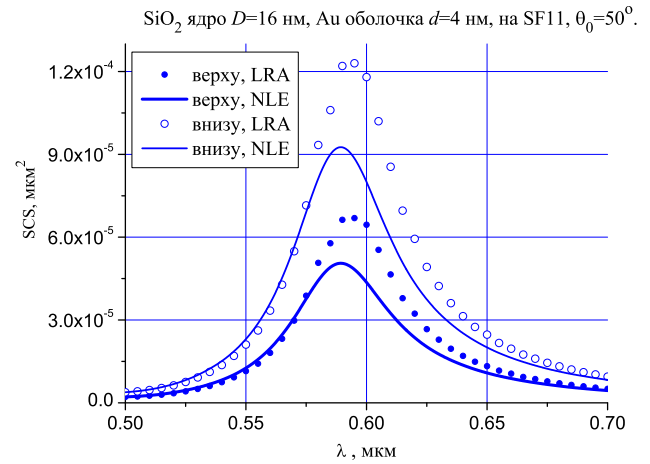


Рис. 1. Сравнительные результаты интенсивности рассеяния $\sigma_{sc}^{0,1}(\theta_0 = 50^\circ, \lambda)$ в верхнее полупространство и в призму

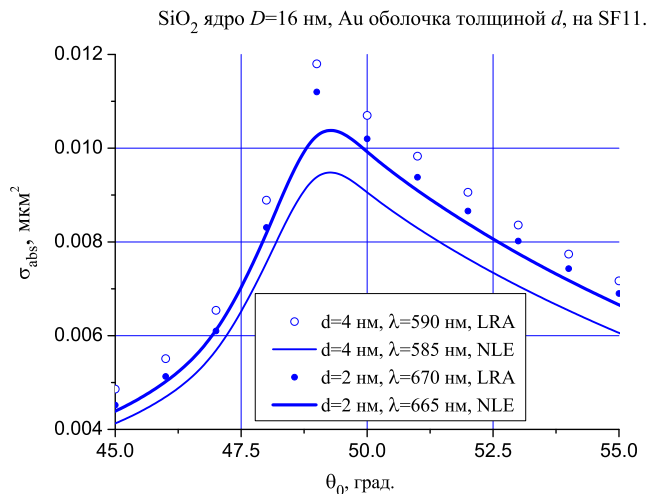


Рис. 2. Поведение сечения поглощения $\sigma_{abs}(\theta_0)$ в зависимости от угла падения волны для толщин $d = 2, 4$ нм

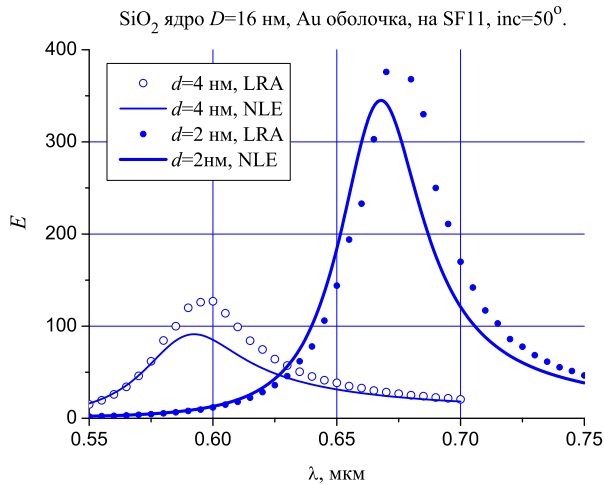


Рис. 3. Интегральный коэффициент усиления $E(\theta_0 = 50^\circ, \lambda)$ в зависимости от длины волны, сравнение локального (LRA) и нелокального случаев (NLE)

внутреннего отражения $\theta_A = 48.35^\circ$. В связи с чем выбор $\theta_0 = 50^\circ$ представляется оправданным.

На рис. 3 можно видеть интегральный коэффициент усиления $E(\theta_0 = 50^\circ, \lambda)$ в зависимости от длины волны, сравнение локального (LRA) и нелокального случаев (NLE). Видно, что уменьшение толщины пленки приводит к существенному росту усиления поля и сдвигу в длинноволновую область. Как и раньше, учет ПД приводит к снижению амплитуд.

Перейдем к исследованию влияния асимметрии геометрии слоистой частицы на характеристики ближнего поля, при этом ограничимся нелокальным случаем. Будем рассматривать характерный случай, когда центры сфер сдвинуты по отношению друг к другу [27]. На рис. 4 приведены значения $\sigma_{\text{abs}}(\theta_0 = 50^\circ, \lambda)$ для $d = 2$ нм и трех различных конфигураций сфер: когда центры совпадают, сдвига центра внутренней сферы вверх на 1 нм или вниз на 1 нм. Таким образом, при сдвиге вверх толщина пленки внизу 3 нм, а сверху 1 нм, и наоборот, при сдвиге вниз — 1 нм внизу и 3 нм сверху. Из рассмотрения результатов следует отметить существенный сдвиг положения плазмонного резонанса в длинноволновую область на 30 нм при одновременном монотонном уменьшении амплитуды на 25%.

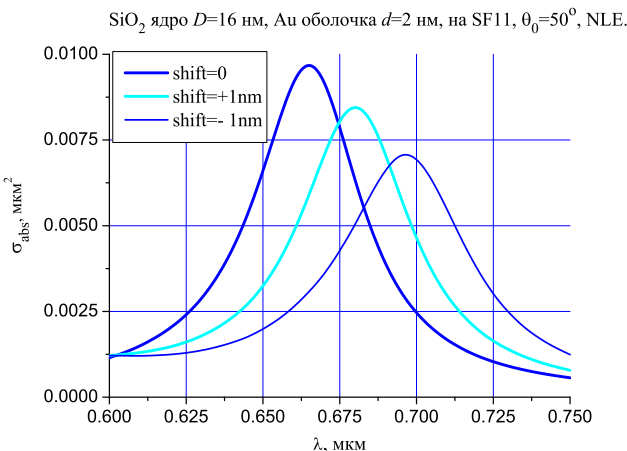


Рис. 4. Значения $\sigma_{\text{abs}}(\theta_0 = 50^\circ, \lambda)$ для $d = 2$ нм и трех различных конфигураций сфер

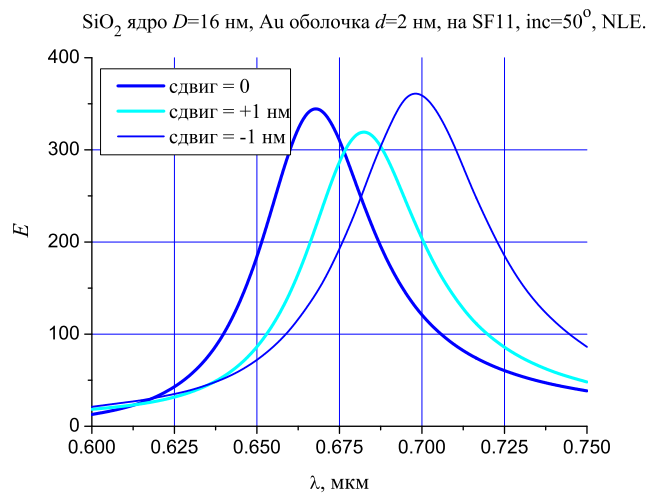


Рис. 5. Коэффициенты усиления $E(\theta_0 = 50^\circ, \lambda)$ для $d = 2$ нм и трех различных конфигураций сфер

На рис. 5 приведены аналогичные результаты для коэффициента усиления $E(\theta_0 = 50^\circ, \lambda)$. В этом случае замечаем, что при сдвиге в те же 30 нм максимумы амплитуд изменяются немонотонно.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Метод дискретных источников был адаптирован к анализу рассеивающих свойств слоистых частиц, расположенных на подложке в поле неизлучающих волн с учетом пространственной дисперсии в металле и наличии асимметрии геометрии. Численное исследование показало, что в случае возбуждения неизлучающей волной большая часть рассеянной энергии уходит назад в подложку. Было установлено, что асимметрия геометрии оказывает существенное влияние на интенсивность ближнего поля. А именно максимум сечения поглощения и коэффициента усиления смещаются в длинноволновую часть спектра на 30 нм, а изменение амплитуды плазмонного резонанса достигает 25%.

Работа выполнена при финансовой поддержке Московского центра фундаментальной и прикладной математики (проект «Моделирование элементов плазмонного нанолазера с учетом квантовой нелокальности»).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Xu D., Xiong X., Wu L. et al. // *Adv. Opt. Photon.* 2018. **10**, N 4. P. 703.
2. Zhang S., Geryak R., Geldmeier J. et al. // *Chem. Rev.* 2017. **117**. P. 12942.
3. Feng H.-P., Tang L., Zeng G.-M. et al. // *Adv. Colloid Interface Sci.* 2019. **267**. P. 26.
4. Kalambate P. K., Dhanjai, Huang Z. et al. // *Trends Analyt. Chem.* 2019. **115**. P. 147.
5. Rajkumar S., Prabakaran M. // *Colloids Surf. B: Biointerfaces.* 2019. **174**. P. 252.
6. Балыкин В. И. // *УФН.* 2018. **188**, № 9. С. 935.
7. Solowan H.-P., Kryschik C. // *Condens. Matt.* 2017. **2**. P. 8.
8. Sidorenko I., Nizamov Sh., Hergenröder R. et al. // *Microchim Acta.* 2016. **183**. P. 101.

9. *Auşar D., Ertürk H., Mengüç M.P.* // *Mater. Res. Express.* 2019. **6**. P. 065006.
10. *Barbry M., Koval P., Marchesin F.* et al. // *Nano Lett.* 2015. **15**. P. 3410.
11. *David C., García de Abajo F.J.* // *J. Phys. Chem. C.* 2011. **115**. P. 19470.
12. *Ciraci C., Pendry J.B., Smith D.R.* // *Chem. Phys. Chem.* 2013. **14**. P. 1109.
13. *Derkachova A., Kolwas K., Demchenko I.* // *Plasmonics.* 2016. **11**. P. 941.
14. *Mortensen N.A., Raza S., Wubs M.* et al. // *Nature Commun.* 2014. **5**. P. 3809.
15. *Wubs M., Mortensen A.* // *Quantum Plasmonics S.I. Bozhevolnyi et al. (eds.), Springer, Switzerland.* 2017. P. 279.
16. *Tserkezis C., Yeşilyurt A.T.M., Huang J.-S., Mortensen N.A.* // *ACS Photonics.* 2018. **5** P. 5017.
17. *Еремин Ю. А., Свешников А. Г.* // *Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон.* 2018. № 5. С. 30. (*Eremin Yu. A., Svешnikov A. G.* // *Moscow Univ. Phys. Bull.* 2018. **73**, N 5. P. 475.)
18. *Doicu A., Eremin Yu., Wriedt T.* Acoustic and Electromagnetic Scattering Analysis Using Discrete Sources. Academic Press, San Diego, 2000.
19. *Еремин Ю. А., Свешников А. Г.* // *Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон.* 2019. № 3. С. 44. (*Eremin Yu. A., Svешnikov A. G.* // *Moscow Univ. Phys. Bull.* 2019. **74**, N 3. P. 262.)
20. *Свешников А. Г.* // *Doklady Mathematics.* 2020. **101**. N 1. P. 20.
21. *Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.* Физическая кинетика. М.: Наука, 1978. С. 167.
22. *Doicu A., Eremin Yu., Wriedt T.* // *J. Quant. Spectr. Rad. Trans.* 2020. **242**. P. 106756.
23. *Jerez-Hanckes C., Nédélec J.C.* // *Commun. Comput. Phys.* 2012. **11**, N 2. P. 629.
24. *Борн М., Вольф Э.* Основы оптики. М.: Наука, 1973. (*Born M., Wolf E.* Principles Of Optics. N. Y.: Pergamon Press, 1964).
25. *Johnson P.B., Christy R. W.* // *Phys. Rev. B.* 1972. **6**. P. 4370.
26. *Kupresak M., Zheng X., Vandenbosch G.A.E., Moshchalkov V. V.* // *Adv. Theory Simul.* 2018. 1800076.
27. *Dong T., Shi Y., Liu H., Chen F.* et al. // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2017. **50**. P. 495302.

The Influence of the Asymmetry of the Geometry of a Core–Shell Particle on a Substrate on the Optical Characteristics Accounting for Spatial Dispersion

Yu. A. Eremin^{1,a}, A. G. Svешnikov^{2,b}

¹Department of Mathematical Physics, Computational Mathematics and Cybernetics Faculty;

²Department of Mathematics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University. Moscow 119991, Russia.

E-mail: ^aeremin@cs.msu.ru, ^bsvешnikov@phys.msu.ru.

The problem of excitation of a core–shell particle located on a transparent substrate by a field of an evanescent electromagnetic wave is considered. The particle consists of a dielectric core with a metal nanoplasmonic shell in which spatial dispersion occurs. Based on the Discrete Sources Method, a model has been constructed that considers the influence of the presence of the substrate and nonlocality in a metal on the optical scattering characteristics. The effect of the asymmetry of the particle geometry on the optical characteristics of the near field has been investigated. It was found that the asymmetry of the particle geometry significantly affects the intensity enhancement coefficient, as well as the absorption cross-section.

Keywords: core-shell particle on a substrate, evanescent field, Discrete Source Method, spatial dispersion, generalized nonlocal optical response.

PACS: 42.25.Fx, 42.50.Nn, 03.50.De, 03.65.Ud.

Received 16 June 2020.

English version: *Moscow University Physics Bulletin.* 2020. **75**, No. 5. Pp. 480–487.

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, профессор; тел.: (495) 939-10-33, e-mail: svешnikov@phys.msu.ru.