

Оптимизация усиления ближнего поля при резонансном рассеянии света наночастицами

Е. А. Трухан^{1,2,*}

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра физики полимеров и кристаллов Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д.1, стр.2

²Сколковский институт науки и технологий, направление «Material Science» Россия, 121205, Москва, Большой бул., д. 30, стр. 1

(Поступила в редакцию 14.05.2022; после доработки 10.10.2022; принята к публикации 14.11.2022)

В рамках точного решения Ми исследовано резонансное рассеяние плоской линейно-поляризованной электромагнитной волны сферической немагнитной частицей. Отдельно для металлов и для диэлектриков получены выражения для параметров системы, реализующие максимум рассеянного поля на поверхности частицы. Для металлов ответ найден в виде конкретных формул, для диэлектриков представлен алгоритм поиска координат максимума. Рассмотрено поведение полученного решения в применении к реальным веществам (Al, Au, GaP). В случае металлов при относительно малой диссипации на резонансных частотах оно точно указывает на максимум, с увеличением диссипации — на его окрестность. Для диэлектриков показано, что предсказанные в теории максимумы оказываются недостижимы в силу ограничений по величине коэффициента преломления вещества, исследованы причины наличия максимума, несмотря на указанное ограничение. В частности, установлено, что длина волны падающего излучения и радиус частицы в максимумах для GaP совпадают с резонансными значениями для коэффициентов внутреннего поля — предположение, от которого отталкивалось данное исследование. Результаты, полученные в работе, показывают, что оно действительно дает ориентир для поиска максимума поля при рассеянии на других диэлектрических сферических частицах с относительно небольшим показателем преломления.

PACS: 42.90.+m, 42.88.h, 42.70.-a, 78.67.-n. УДК: 535.3, 535.8.

Ключевые слова: спектроскопия сверхвысокого разрешения, рассеяние света, рассеяние Ми, резонансы Фано, наночастицы, биомаркеры.

DOI: [10.55959/MSU0579-9392.78.2330402](https://doi.org/10.55959/MSU0579-9392.78.2330402)

ВВЕДЕНИЕ

Задача максимизации поля на поверхности наночастицы является актуальным вопросом современной субволновой оптики, поскольку существует широкий спектр приложений, в которых необходимо добиться высокой концентрации полей в областях малого пространственного масштаба (биосенсорика, диагностика и лечение онкологических заболеваний, обработка и запись информации высокой плотности и др.) [1–3]. Однако в общем случае поставленная задача аналитически неразрешима, так как, во-первых, точное решение задачи дифракции возможно только в случае частицы простой формы (сфера, цилиндр), а во-вторых, даже при наличии такого решения параметры, по которым происходит поиск экстремума, входят в соответствующие аналитические выражения достаточно сложным образом.

В данной работе в рамках классической электродинамики был рассмотрен случай сферически симметричной частицы, на которую падает плоская ли-

нейно поляризованная волна. Точное решение такой задачи, известное как решение Ми [4, 5], было получено в прошлом веке, что снимает первую из указанных выше проблем. Однако это решение имеет весьма громоздкий вид, в котором рассеянное излучение представляется в виде бесконечной суммы взаимно ортогональных мод, из-за чего возникает вторая проблема.

Одним из оптимальных путей ее разрешения является использование эффектов резонансного рассеяния света (рассеяние света на частоте, которая соответствует резкому локальному максимуму спектральной линии [6]), при котором, во-первых, происходит высокая концентрация падающего электромагнитного излучения вблизи поверхности частицы, а во-вторых, возбуждаются моды конкретных порядков, что значительно упрощает максимизируемые выражения. Для двух условно противоположных по оптическим свойствам классов веществ — металлов и диэлектриков — возбуждение указанных резонансов происходит при различных условиях и имеет различные особенности. Так, многие металлические частицы, которые применяются в указанных выше приложениях, демонстрируют на резонансных частотах (частоты падающего излучения, при которых наблюдается резонанс се-

* E-mail: trukhan.ea17@physics.msu.ru

чения рассеяния) большую диссипацию, подавляющую резонансные эффекты. Частицы же с малой диссипацией состоят из агрессивных металлов, что препятствует их применению, например в биологических и медицинских исследованиях [3]. Диэлектрические частицы имеют малое затухание, но при резонансах поле концентрируется в основном внутри самой частицы [7]. Поэтому естественно возникает вопрос, какой из двух классов веществ наиболее эффективно усиливает падающее излучение.

В настоящей работе представлены результаты исследования поставленных вопросов: получены соотношения для параметров системы, реализующие максимумы рассеянного поля. Также рассмотрено поведение полученного решения в применении к реальным веществам, проведены анализ различных особенностей этого поведения и сравнение двух классов веществ.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В рамках задачи Ми рассматривается частица идеальной сферической формы с радиусом R , диэлектрической проницаемостью $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$, из немагнитного вещества (магнитная проницаемость $\mu = 1$). Для временной зависимости полей $\sim \exp(-i\omega t)$ формулы для рассеянного поля имеют вид [4]:

$$\begin{aligned} E_r^s &= \frac{i \cos \phi \sin \theta}{(kr)^2} \sum_{l=1}^{\infty} E_l a_l l(l+1) \xi_l(kr) \pi_l(\theta), \\ E_\theta^s &= \frac{\cos \phi}{kr} \sum_{l=1}^{\infty} E_l (i a_l \xi_l'(kr) \tau_l(\theta) - b_l \xi_l(kr) \pi_l(\theta)), \\ E_\phi^s &= \frac{\sin \phi}{kr} \sum_{l=1}^{\infty} E_l (b_l \xi_l(kr) \tau_l(\theta) - i a_l \xi_l'(kr) \pi_l(\theta)), \\ H_r^s &= \frac{\sqrt{\varepsilon_0} \sin \phi \sin \theta}{(kr)^2} \sum_{l=1}^{\infty} E_l b_l l(l+1) \xi_l(kr) \pi_l(\theta), \\ H_\theta^s &= \frac{\varepsilon_0 \sin \phi}{kr} \sum_{l=1}^{\infty} E_l (i a_l \xi_l(kr) \pi_l(\theta) + b_l \xi_l'(kr) \tau_l(\theta)), \\ H_\phi^s &= \frac{\varepsilon_0 \cos \phi}{kr} \sum_{l=1}^{\infty} E_l (i a_l \xi_l(kr) \tau_l(\theta) + b_l \xi_l'(kr) \pi_l(\theta)), \end{aligned} \quad (1)$$

где l — порядок моды, $E_l = \frac{i E_0 (2l+1)}{l(l+1)}$, $\pi_l = \frac{P_l^1(\cos \theta)}{\sin \theta}$, $\tau_l = \frac{dP_l^1(\cos \theta)}{d\theta}$, $P_l^1(z) = (1-z^2)^{\frac{1}{2}} \frac{dP_l(z)}{dz}$ — присоединенные функции Лежандра l -ого порядка, $\xi_l(z) = \sqrt{\frac{\pi z}{2}} H_{l+\frac{1}{2}}^{(1)}(z)$, $H_{l+\frac{1}{2}}^{(1)}(z)$ — функция Ганкеля l -ого рода, $k = \frac{2\pi}{\lambda_0} \sqrt{\varepsilon_0}$ — волновое число падающего излучения во внешней по отношению к частице среде, ε_0 — диэлектрическая проницаемость среды. a_l и b_l — коэффициенты рассеянного поля (электриче-

ской и магнитной волн соответственно):

$$\begin{aligned} a_l &= \frac{m \psi_l(mx) \psi_l'(x) - \psi_l(x) \psi_l'(mx)}{m \psi_l(mx) \xi_l'(x) - \xi_l(x) \psi_l'(mx)} = \frac{F_l^a}{F_l^a + i G_l^a}, \\ b_l &= \frac{m \psi_l(x) \psi_l'(mx) - \psi_l(mx) \psi_l'(x)}{m \xi_l(x) \psi_l'(mx) - \psi_l(mx) \xi_l'(x)} = \frac{F_l^b}{F_l^b + i G_l^b}. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь $\psi_l(z) = \sqrt{\frac{\pi z}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(z)$, $J_{l+\frac{1}{2}}(z)$ — функция Бесселя, $x = kR$ — параметр размера, $m = n + i\kappa = \sqrt{\varepsilon/\varepsilon_0}$ — относительный показатель преломления.

Компоненты внутреннего поля записываются аналогично, электрическим волнам соответствуют коэффициенты d_l , магнитным — c_l . Разбиение каждой парциальной волны на две независимые субмоды следует из общей процедуры поиска решения в виде мультипольного разложения, в котором каждому l соответствуют две линейно независимые функции, называемые электрическими и магнитными волнами, название которых продиктовано тем, что у электрической волны отсутствует радиальная компонента напряженности магнитного поля, у магнитной — электрического [8]. Частица находится в воздухе ($\varepsilon_0 = 1$). Здесь и далее штрих ' обозначает производную соответствующей функции по ее полному аргументу.

Наблюдаемыми величинами являются вещественные поля, в то время как формулы (1) описывают их аналитическое продолжение на комплексную плоскость. Окончательное выражение, максимум которого ищется, — среднее по периоду колебаний поля значение модуля суммарного поля:

$$\langle |E|^2 \rangle = \frac{1}{2} (|E_r^s|^2 + |E_\theta^s|^2 + |E_\phi^s|^2), \quad (3)$$

где каждая компонента ($j = \{r, \theta, \phi\}$) равна:

$$|E_j^s|^2 = \sum_{l=1}^{\infty} |E_{lj}^s|^2 + 2 \sum_{p=1}^{\infty} \sum_{l < p, l=1}^{\infty} |E_{lj}^s| |E_{pj}^s| \cos(\alpha_{lj} - \alpha_{pj}). \quad (4)$$

2. РЕЗОНАНСНЫЕ ЭФФЕКТЫ: ОБЩЕЕ РАССМОТРЕНИЕ

Как было указано выше, в работе обсуждаются эффекты резонансного рассеяния. Для металлов при малом параметре размера $x \rightarrow 0$ они соответствуют возбуждению локализованных поверхностных плазмонов и наблюдаются только для электрических волн, в окрестности значений $\varepsilon' = -\frac{l+1}{l}$ [9]. Кроме того, будем требовать малой диссипации ($\varepsilon'' \ll 1$), что не является необходимым условием, но в таком случае резонансы оказываются большими по амплитуде. Раскладывая F_l^a , F_l^b , G_l^a , G_l^b из формул (2) по малому x , получаем:

$$\begin{aligned}
 F_l^a &\simeq x^{2l+1} \frac{l+1}{[(2n+1)!!]^2} (m^2 - 1) + o(x^{2l+1}), \\
 G_l^a &\simeq \frac{n}{2l+1} \left(m^2 + \frac{l+1}{l} - x^2 \frac{m^2 - 1}{2} \left[\frac{m^2}{2l+3} + \frac{l+1}{l(2l-1)} \right] \right) + o(x^2), \\
 F_l^b &\simeq \frac{x^{2l+3}(1-m^2)}{[(2l+3)!!]^2(3+2l)}, \quad G_l^b \simeq O(1).
 \end{aligned} \tag{5}$$

Можно показать, что условия возбуждения резонансов сечения рассеяния соответствуют таким значениям параметров задачи, при которых $|a_l|$ оказывается порядка 1. Из формул (5) следует, что у магнитных волн нет резонансов, $|b_l| \sim x^{2l+3}$, поэтому при $x \rightarrow 0$ ими в разложении поля можно пренебречь.

На поверхности частицы $kr = kR = x$, поэтому радиальные функции в формулах (1) также раскладываются по малому аргументу и все компоненты l -й моды, без учета угловых зависимостей, приводятся к универсальному виду (первое выражение — для электрического поля, второе — для магнитного):

$$\begin{aligned}
 e_l &= \frac{a_l(x, \varepsilon)}{x^{l+2}}, \\
 h_l &= \frac{a_l(x, \varepsilon)}{x^{l+1}}.
 \end{aligned} \tag{6}$$

Когда мода порядка l оказывается в резонансе, то есть для вклада данной моды в сечение рассеяния

выполнены условия возбуждения резонанса [9], тогда $|a_l| \sim 1$ и соответствующие компоненты быстро растут при $x \rightarrow 0$. В противном случае $|a_l| \sim x^{2l+1}$ и компоненты поля убывают при $x \rightarrow 0$. Если представить вклад электрической волны моды порядка l в сечение рассеяния в виде лоренцевского профиля, как это сделано в [6], то можно показать, что расстояние между резонансами соседних мод в терминах ε' (то есть разность между значениями ε' , которые соответствуют условиям резонанса для мод порядка l и $l+1$) равно $|\Delta\varepsilon'_l| = \frac{l+1}{l} - \frac{l+2}{l+1} = \frac{1}{(l+1)l}$, а ширина линии резонанса, то есть ширина лоренцевского профиля, при малой диссипации равна $\gamma_l + 2\varepsilon''$, где $\gamma_l = \frac{2(l+1)x^{2l+1}}{[(2l-1)!!]^2}$ [9]. Таким образом, ширина лоренцевского профиля для резонанса некоторой моды порядка l оказывается много меньше, чем расстояние до центра соседней линии. Поэтому, разыскивая максимум в окрестности резонанса некоторой моды, достаточно учесть только ее вклад в суммарное поле. Тогда упрощенное выражение, максимум которого нужно найти, для электрического поля имеет вид:

$$|e_l| = \frac{x^{2l+1} \beta_l \frac{2l+1}{l}}{\sqrt{(x^{2l+1} \beta_l \frac{2l+1}{l} + \varepsilon'' \frac{l}{2l+1} (1 - \alpha_{1l} x^2))^2 + (\frac{l}{2l+1} (\delta\varepsilon + \alpha_{2l} x^2))^2}} \frac{1}{x^{l+2}} \tag{7}$$

Здесь $\delta\varepsilon = \varepsilon' + \frac{l+1}{l}$, $\alpha_{1l} = \frac{5 - 1(l-1)l}{2l(4l(l+1) - 3)}$, $\alpha_{2l} = \frac{2(l+1)(2l+1)}{l^2(4l(l+1) - 3)}$, $\beta_l = \frac{l+1}{[(2l+1)!!]^2}$.

Выражения для параметров системы, реализующие максимум формулы (7):

$$\varepsilon'_{max} = -\frac{l+1}{l} - \alpha_{2l} x^2, \tag{8}$$

где при $l = 1$

$$x_{max}^{(e)} = \frac{\varepsilon''}{6}, \tag{9}$$

а при $l \neq 1$

$$x_{max}^{(e)} = \left(\frac{\varepsilon''(l-1)}{A_l(l+2)} \right)^{1/(2l+1)}. \tag{10}$$

Здесь $A_l = \frac{l+1}{(l(2l-1)!!)^2}$.

Подстановка (8)–(10) в (7) дает следующие зависимости:

$$|e_{l \neq 1}^{max(1)}| = \frac{(l-1)}{(2l+1)} \left(\frac{A_l(l+2)}{\varepsilon''(l-1)} \right)^{\frac{l+2}{2l+1}}, \tag{11}$$

$$|e_1^{max(1)}| = \frac{2}{\varepsilon''}. \tag{12}$$

Аналогично можно максимизировать $|h_l|$. Тогда выражение для действительной части диэлектрической проницаемости, реализующей этот максимум, ε'_{max} по-прежнему задается формулой (8), однако теперь

$$x_{max}^{(h)} = \left(\frac{\varepsilon'' l}{A_l(l+1)} \right)^{1/(2l+1)}. \tag{13}$$

Что касается диэлектриков, то при резонансном возбуждении внутренних мод возможно многократное (на порядки величин) усиление поля внутри частицы [7]. По непрерывности тангенциальных компонент можно было бы ожидать и соответствующее усиление рассеянного поля. Однако резонансное

возбуждение внутренних мод аналогично возбуждению стоячих волн в резонаторе, то есть на поверхности частицы находятся узлы поля, в которых оно сильно ослабевает [12]. Поэтому основная идея использования таких резонансов состоит в том, чтобы несколько сместиться от резонансных частот, сдвинув тем самым узлы внутренних компонент поля с поверхности частицы.

При достаточно большом n резонансы d_l и c_l задаются соответственно уравнениями [7]:

$$\psi_l(nx) = 0, \quad (14)$$

$$\psi'_l(nx) = 0. \quad (15)$$

При $nx \gg 1$ уравнения (14)–(15) переходят в первом порядке в условия возбуждения стоячих волн и их корни совпадают для бесконечного числа мод одновременно (возбуждаются «каскады» [7]). Первое перекрытие резонансов происходит при $x > 1.5$.

Вводя $\delta n = n - n^r(x)$, где $n^r(x)x = c$, c — корень одного из уравнений (14)–(15), получаем следующий набор параметров системы, по которым ищется максимум: $(\delta n, x, \kappa)$. В диэлектриках есть достаточно жесткое ограничение по параметру размера x . При $x \rightarrow 0$ рассеяние переходит в рэлеевское, которое не дает в случае диэлектриков никаких эффектов усиления. В то же время с ростом x модули радиальных функций, входящих в формулы (1), быстро убывают по x (например, для радиальных компонент первых трех мод уже при $x \simeq 1$ радиальные функции практически обнуляются). Это, во-первых, дает возможность, с учетом условия перекрытия резонансов, упомянутого в предыдущем абзаце, не рассматривать каскады резонансов; во-вторых, рассматривать резонанс только магнитной волны дипольной моды, так как для большинства диэлектриков $n \sim 1$ и только для нее уравнение (15) дает решения с x в оптимальном диапазоне. Диссипации вновь считаем малыми. Это приводит к условию $\kappa \ll 1/n$, а при указанной выше оценке на n для реальных веществ $\kappa \ll 1$.

Вновь пользуемся тем, что максимум компонент поля некоторой моды по показателю преломления (то же, что и по диэлектрической проницаемости) совпадает с максимумом коэффициента рассеяния. В данном случае нас интересует b_1 . В [7] показано, что коэффициенты рассеяния можно представить в виде профиля резонанса Фано. Так, для $|b_1|$ справедливо выражение

$$|b_1|^2 = \frac{(\epsilon' + q)^2 + \epsilon''^2}{(1 + q^2)((1 + \epsilon'')^2 + \epsilon'^2)}, \quad (16)$$

где $q = \frac{\chi_1(x)}{\psi_1(x)}$, $\epsilon = \epsilon' + i\epsilon'' = -\frac{F_1^b \psi_1(x) - G_1^b \chi_1(x)}{\psi_1(mx)}$, $\chi_l(z) = -\sqrt{\frac{\pi z}{2}} N_{l+\frac{1}{2}}(z)$, $N_{l+\frac{1}{2}}(z)$ — функция Неймана.

В качестве $n^r(x)$ выбираем только первый корень (15):

$$n_{c_1}^r(x) = \frac{2.7}{x}, \quad (17)$$

Далее, раскладывая ϵ по малым κ и δn , получим, что:

$$\begin{aligned} \epsilon' &\simeq -n_{c_1}^r \delta n x \frac{\psi_1''(n_{c_1}^r x)}{\psi_1(n_{c_1}^r x)} (\psi_1'^2(x) + \chi_1'^2(x)) + \\ &+ \psi_1'(x) \psi_1(x) + \chi_1'(x) \chi_1(x); \end{aligned} \quad (18)$$

$$\epsilon'' \simeq \kappa n_{c_1}^r x \frac{\psi_1''(n_{c_1}^r x)}{\psi_1(n_{c_1}^r x)} (\psi_1'^2(x) + \chi_1'^2(x)). \quad (19)$$

Из формул (18)–(19) следует, что ϵ' зависит только от $x, \delta n$, а ϵ'' только от x, κ . Это позволяет свести поиск максимума (16) по δn к поиску максимума по ϵ' и найти таким образом $\delta n_{b_1}^{res} = \delta n_{b_1}^{res}(x, \kappa)$ (данное выражение слишком громоздко, поэтому здесь не приведено). На данном этапе все возможные упрощения заканчиваются, и далее задача на поиск экстремума по x аналитически не решается, что требует применения численных методов.

По этой причине имеет смысл применить алгоритм поиска приближенного решения, который состоит в следующем. Для модуля суммарного поля, в котором учитывается вклад только магнитной волны дипольной моды, ищется максимум по углам. Для магнитного поля в оптимальном диапазоне по x соответствующие углы равны: $\theta = \pi/2, \phi = \{\pi/2, 3\pi/2\}$. Для электрического: $\theta = \{0; \pi\}, \phi = \{0, \pi/2, \pi, 3\pi/2\}$. С помощью функции фиттинга в Wolfram Mathematica в диапазоне по κ [0.01, 0.1] рассчитывается кривая $x_{max} = x_{max}(\kappa)$, реализующая максимум поля (см. рис. 3, а). Полученные зависимости

$$E : x_E(\kappa) = 0.6 - 0.11\sqrt{\kappa} - 0.55\kappa, \quad (20)$$

$$H : x_H(\kappa) = 0.47 + 0.006\sqrt{\kappa} - 2\kappa. \quad (21)$$

Подстановка (20)–(21) в $n_{c_1}^r(x) + \delta n_{b_1}^{res}(x, \kappa)$ дает $n_{c_1}^E(\kappa)$ и $n_{c_1}^H(\kappa)$, реализующие максимум электрического и магнитного полей соответственно:

$$n_{c_1}^E(\kappa) = n_{c_1}^r(x_E(\kappa)) + \delta n_{b_1}^{res}(x_E(\kappa), \kappa), \quad (22)$$

$$n_{c_1}^H(\kappa) = n_{c_1}^r(x_H(\kappa)) + \delta n_{b_1}^{res}(x_H(\kappa), \kappa). \quad (23)$$

Таким образом, в данном разделе были выведены формулы, которые позволяют найти параметры системы, реализующие максимумы напряженности суммарного электрического или магнитного полей. Для металлов они имеют вид уравнений, связывающих между собой диэлектрическую проницаемость и параметр размера (формулы (8)–(13)), для диэлектриков — показатель преломления и параметр размера (формулы (20)–(23)). Экспериментально измеряемыми величинами являются длина волны падающего излучения λ (или частота ω) и радиус частицы R . Так как диэлектрическая проницаемость, показатель преломления и параметр размера являются функциями от этих величин, то в действительности указанные формулы представляют собой уравнения относительно λ и R , реализующих максимумы напряженностей рассеянных полей.

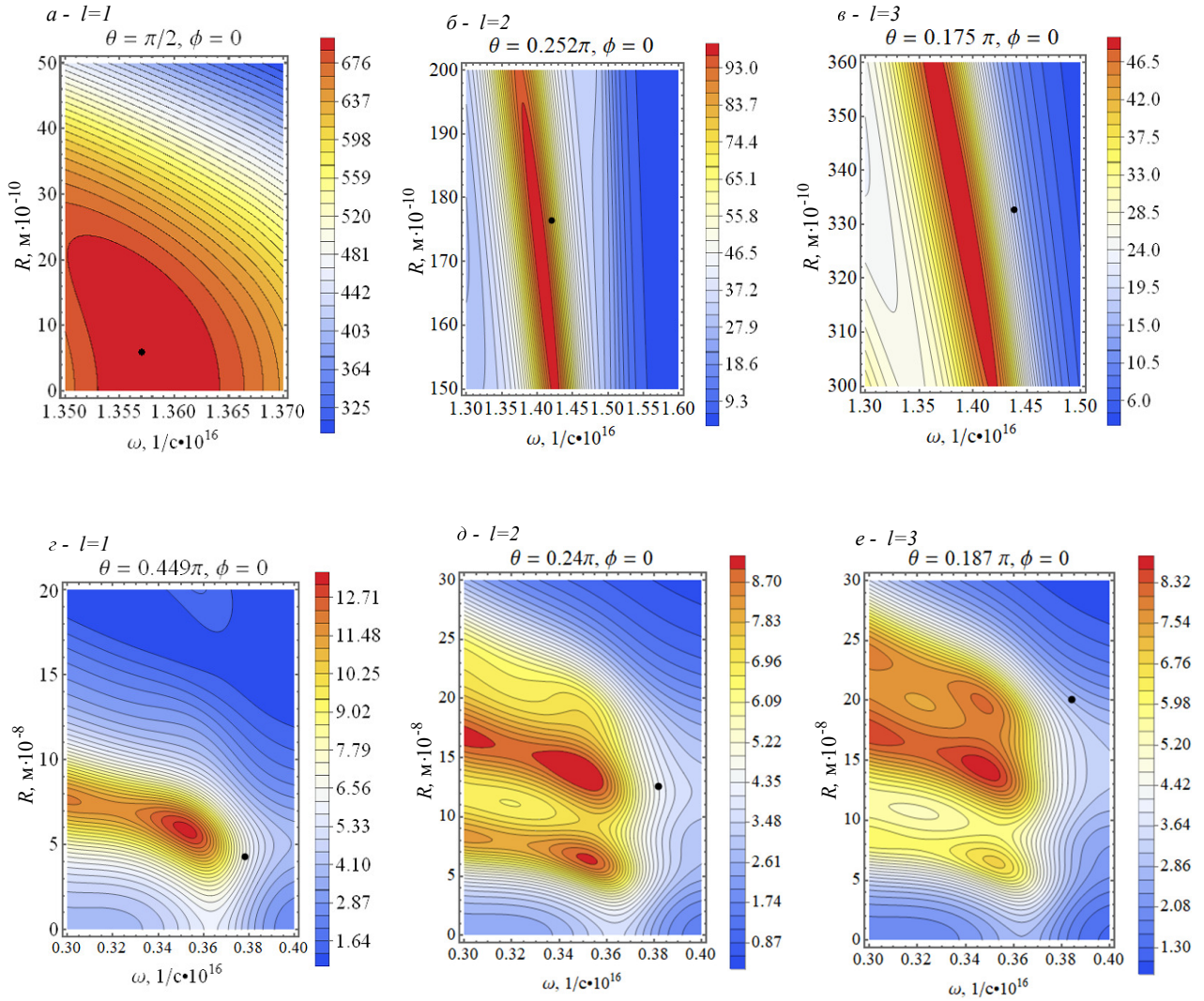


Рис. 1. Зависимость квадрата модуля электрической компоненты рассеянного поля, нормированного на E_0 , $\langle |E/E_0|^2 \rangle$ от R и ω в окрестности резонанса l -й моды (см. таблицу) при фиксированных θ и ϕ : a - δ – Al, z - e – Au. Графики были построены в Wolfram Mathematica на основе численных расчетов с использованием формул (1)–(3). Черная точка на каждом графике соответствует значениям $R = R_l^{max}$, $\omega = \omega_l^{max}$ из таблицы Углы выбирались как точки максимума диаграммы направленности $\langle |E/E_0|^2 \rangle$

3. РЕЗОНАНСНЫЕ ЭФФЕКТЫ: КОНКРЕТНЫЕ ПРИМЕРЫ

В данном разделе приведены результаты применения развитого подхода к конкретным материалам, оптические свойства которых были взяты из [10, 11].

Из металлов в работе были рассмотрены золото [11] и алюминий [10] и производилась максимизация модуля напряженности электрического поля. Для нахождения параметров системы, реализующих максимум, в формулы (8)–(13) были подставлены зависимости $\varepsilon' = \varepsilon'(\omega)$, $\varepsilon'' = \varepsilon''(\omega)$ для конкретного вещества и $x = \omega R/c$, где c – скорость света в вакууме. Полученные системы уравнений относительно ω и R были решены численно в Wolfram Mathematica. Результаты представлены в таблице

Чтобы проверить, действительно ли найденные величины соответствуют максимуму, были постро-

ены графики среднего по периоду квадрата модуля напряженности суммарного поля, рассеянного сферической частицей из алюминия (рис. 1, a - δ) и золота (рис. 1, z - e), на поверхности частицы как функции ω и R в окрестности значений из таблицы. Из полученных графиков видно, что найденное решение дает все менее точные координаты максимума с увеличением порядка моды. Это объясняется тем, что зависимость для x_{max} от ε'' , указанная в (9)–(10), отражает условие преобладания радиационного затухания над диссипативным, при нарушении которого невозможен эффективный переход энергии возбужденного локализованного поверхностного плазмона в рассеянное поле [6]. Данное условие может быть записано в виде $\varepsilon'' \sim x^{2l+1}$. То есть с ростом l на соответствующих резонансных частотах ε'' должно достаточно быстро убывать, чтобы в точке максимума оставалось справедливым приближение малого x . Как видно из табли-

Таблица. Значения параметров частицы из Al и Au, реализующие максимум вклада моды порядка l в напряженность суммарного электрического поля (см. формулу 3) исходя из формул (8)–(10), и величина среднего по периоду колебаний поля модуля напряженности суммарного электрического поля $\langle |E|^2 \rangle$, нормированная на E_0 , при данных параметрах. Углы выбирались как точки максимума диаграммы направленности $\langle |E|^2 \rangle$. Здесь ω_l^{max} и R_l^{max} — частота падающего излучения и радиус частицы, реализующие максимум ε_l^{max} , $\varepsilon_l^{i,max}$ и x_l^{max} — действительная и мнимая части диэлектрической проницаемости и параметр размера при $\omega = \omega_l^{max}$, $R = R_l^{max}$.

Al						
Порядок моды l	$\omega_l^{max}, c^{-1} \cdot 10^{16}$	$R_l^{max}, m \cdot 10^{-9}$	ε_l^{max}	$\varepsilon_l^{i,max}$	x_l^{max}	$\langle E/E_0 ^2 \rangle$
1	1.357	0.6	-2.002	0.161	0.027	702.08
2	1.42	17.7	-1.749	0.136	0.837	82.95
3	1.438	33	-1.685	0.13	1.595	18.22
Au						
1	3.78	43	-2.7	3.25	0.54	6.65
2	3.82	126	-2.41	3.5	1.6	4.37
3	3.84	200	-2.25	3.68	2.6	2.82

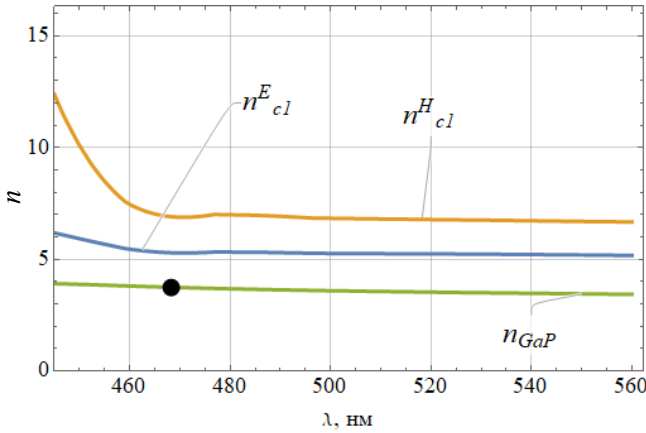


Рис. 2. Решение уравнения (24) с помощью графика для GaP. Зеленый цвет соответствует зависимости $n_{GaP}(\lambda)$, синий — $n_{c1}^E(\kappa_{GaP}(\lambda))$, желтый — $n_{c1}^H(\kappa_{GaP}(\lambda))$. Точка пересечения зеленой линии с желтой и синей дала бы значение длины волны, реализующей максимум модуля напряженности соответствующего поля, рассеянного частицей из GaP. Черным кружком отмечена область длин волн, где находятся реальные максимумы компонент поля, рассеянного частицей из GaP, соответствующие области наибольших значений поля на рис. 3, б

цы, в случае алюминия этого не происходит. Однако, несмотря на растущую неточность с ростом l , решение (8)–(10) все равно дает значения в окрестности максимума, что значительно упрощает задачу его поиска.

Что касается золота, то у него диссипация на резонансных частотах примерно в 20 раз больше (см. таблицу), чем у алюминия. Это приводит, во-первых, к значительному уменьшению величины поля в максимуме (наибольшее отношение $\sqrt{\langle |E/E_0|^2 \rangle}$ для золота — 2.6), во-вторых, к потере точности полученного решения (см. рис. 1) по указанным выше причинам.

Чтобы получить длину волны в случае диэлектриков, необходимо для конкретного вещества решить следующее уравнение:

$$n_{c1}^{E/H}(\kappa_{mat}(\lambda)) = n_{mat}(\lambda), \quad (24)$$

где $n_{mat}(\lambda), \kappa_{mat}(\lambda)$ — спектральные зависимости оптических характеристик исследуемого вещества. По найденному из уравнения (24) значению λ можно получить все остальные параметры системы, если такое решение существует.

В настоящей работе был проведен анализ полученного решения в применении к GaP [10]. На рис. 2 представлены графики для левой и правой частей уравнения (24). Отсутствие пересечений говорит о том, что в данном диапазоне нет длины волны, при которой было бы возможно усиление на величину, предсказанную теоретически при выводе формул (20)–(21) (см. рис. 3, а). На рис. 3, б изображен график квадрата модуля напряженности магнитного поля, рассеянного частицей из GaP, из которого видно, что максимальное усиление, то есть, наибольшее отношение $\sqrt{\langle |H/E_0|^2 \rangle}$, — всего в 4.6 раз, что меньше возможного усиления на рис. 3, а. Тем не менее оно больше, чем у золота.

Дело в том, что для реальных веществ значение n оказывается ограничено по величине, однако формулы для рассеянных полей являются гладкими функциями аргументов, по которым происходил поиск максимума в ходе работы — (n, κ, x) . Это приводит к тому, что достигается максимум по переменным, от которых зависит сам набор указанных ранее аргументов — R, λ , — диапазон значений которых неограничен. Что касается закономерностей, которым они подчиняются, то, определив по графику координаты максимума, мы убедимся, что они соответствуют значениям, при которых наблюдается максимум модуля c_1 — предположение, от которого отталкивалась данная работа и кото-

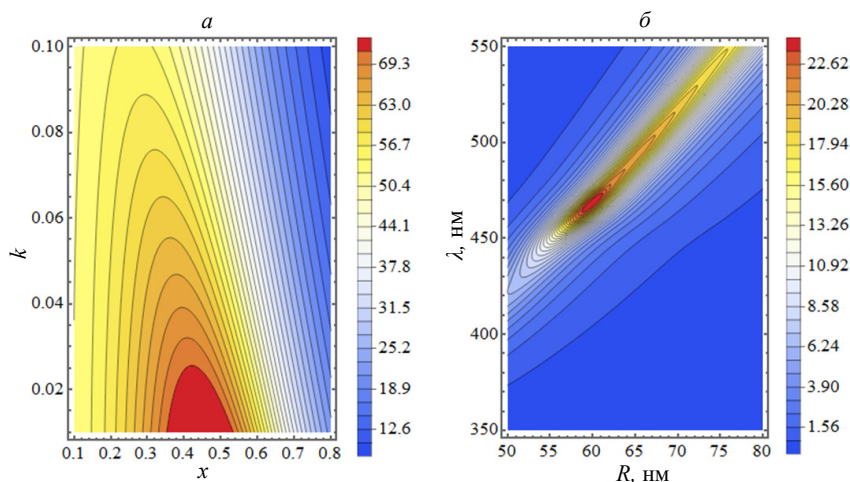


Рис. 3. *a* — График $\langle |H/E_0|^2 \rangle$ как функции x и k , полученной при подстановке в формулы для рассеянных полей (1)–(3) в качестве действительной части показателя преломления $n_{c1}^r(x) + \delta n_{b1}^{res}(x, k)$, и с учетом вклада только магнитной волны дипольной моды. *б* — Зависимость квадрата модуля напряженности магнитного поля $\langle |H/E_0|^2 \rangle$, рассеянного частицей из GaP, с учетом вклада только магнитной волны дипольной моды. Напряженность нормирована на E_0 . Углы выбирались как точки максимума диаграммы направленности $\langle |H/E_0|^2 \rangle$. Графики были построены в Wolfram Mathematica на основе численных расчетов с использованием формул (1)–(3)

рое может быть использовано в случае веществ с недостаточно большим n .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, для обоих классов веществ получены выражения для параметров системы, позволяющие для реальных веществ находить максимумы (или их окрестности) рассеянных полей. Если сравнивать, какой класс веществ сильнее рассеивает падающее излучение, то фаворитами являются металлы с малыми диссипациями. Однако в тех исследо-

ваниях, где они неприменимы, первенство переходит к диэлектрикам, несмотря на то, что они не реализуют предсказанные максимумы. Если же будут созданы метаматериалы с достаточным коэффициентом преломления, соответствующим полученному решению, то эффективность данного класса веществ можно значительно повысить.

Автор выражает благодарность М. И. Трибельскому за постановку задачи и полезные обсуждения. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 20-02-00086, все аналитические вычисления) и РНФ (грант № 21-12-00151, численные расчеты и компьютерная графика).

- [1] Kuznetsov A. I., Miroshnichenko A. E., Brongersma M. L. et al. // *Science*. **354**. 843. (2016).
- [2] Willets K. A., Van Duyne R. P. // *Annual Review of Physical Chemistry*. **58**. 267. (2007).
- [3] Bontempi N., Chong K. E. // *Nanoscale*. **9**. 4972. (2017).
- [4] Mie G. // *Ann. Physik*. **25**. 1. (1908).
- [5] Bohren C. F., Huffman D. R. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. New York, 2008.
- [6] Трибельский М. И., Мирошниченко А. Е. *УФН*. **192**, 45–68 (2022).
- [7] Tribelsky M. I., Miroshnichenko A. E. // *Phys. Rev. A*. **93**. 053837. (2016).
- [8] Борн М., Вольф Э. *Основы оптики*. М., 1973.
- [9] Tribelsky M. I. // *EPL*. **94**. 14004. (2011).
- [10] Polyanskiy M. N. Refractive index database. <https://refractiveindex.info>
- [11] Palik E. D. *Handbook of Optical Constants of Solids*. Orlando, 1985–1998.
- [12] Kuznetsov A. I., Miroshnichenko A. E., Fu Y. H., Zhang J. // *Scientific Reports*. **2**. 492. (2012).

Optimization of Near-Field Amplification at Resonant Light Scattering by Nanoparticles

E. A. Trukhan^{1,2,a}

¹Department of Polymer and Crystal Physics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University Moscow 119991, Russia

²Skolkovo Institute of Science and Technology, Moscow, 121205, Russia
E-mail: ^atrukhan.wa17@physics.msu.ru

The resonant scattering of a linearly polarized plane EM wave by a spherical nonmagnetic particle is studied within the framework of the exact Mie solution. Separately for metals and for dielectrics, expressions for the parameters of the system are obtained that realize the maximum of the scattered field on the surface of the particle. The solution for metals is found in the form of exact formulas; for dielectrics, an algorithm for finding the coordinates of the maximum is presented. The behaviour of the solution obtained as applied to real substances (Al, Au, GaP) is considered. In the case of metals, with a relatively small dissipation at resonant frequencies, it accurately points to the with an increase in dissipation only vicinity of the maximum is localized. For dielectrics, it is shown that the maxima predicted in the theory turn out to be unattainable due to limitations on the refractive index of the substance, and the reasons for the presence of a maximum, despite the indicated limitation, are investigated. In particular, it was established that the wavelength of the incident radiation and the radius of the particle at the maxima for GaP coincide with the resonance values for the coefficients of the internal field—the assumption from which this study was based. The results obtained in this work provide a guideline for searching for the field maximum upon scattering by other dielectric spherical particles with a relatively small refractive indices.

PACS: 42.90.+m, 42.88.h, 42.70.-a, 78.67.-n.

Keywords: ultrahigh resolution spectroscopy, light scattering, Mie scattering, Fano resonances, nanoparticles, biomarkers.

Received 14 May 2022.

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2023. **78**, No. 3. Pp. 353–360.

Сведения об авторе

Трухан Елена Алексеевна — студентка 1-ого курса магистратуры Сколковского института науки и технологий направления «Material Science»; e-mail: trukhan.ea17@physics.msu.ru.