

Влияние пространственной дисперсии в металле на оптические характеристики кластера магнетоплазмонных слоистых наночастиц

Ю. А. Еремин,^{1,*} А. С. Пензарь^{2,†}

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
факультет ВМК, кафедра математической физики
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 52

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

(Поступила в редакцию 08.04.2023; после доработки 31.07.2023; принята к публикации 02.08.2023)

В настоящей работе рассматривается задача дифракции плоской электромагнитной волны на кластере двух слоистых наноцилиндров, состоящих из магнетоплазмонного ядра и золотой оболочки. Учет возникающих эффектов пространственной дисперсии в золотой оболочке осуществляется в рамках теории обобщенного нелокального оптического отклика. На основе схемы метода дискретных источников проводится анализ влияния взаимного расположения частиц, их деформации и эффекта пространственной дисперсии на поведение сечения поглощения и коэффициента усиления ближнего поля. Показано, что положение плазмонного резонанса можно сдвигать в область прозрачности биологических тканей за счет вариации расстояния между частицами и материала ядра. Установлено, что учет пространственной дисперсии в золотой оболочке приводит к снижению интенсивности и небольшому сдвигу положения плазмонного резонанса в коротковолновую область, не выходя за пределы области прозрачности тканей.

PACS: 42.25.Fx, 03.65.Ud, 03.50.De, 02.60.Cy. УДК: 535.42, 519.63.

Ключевые слова: метод дискретных источников, наноплазмоника, пространственная дисперсия, магнетоплазмонные наноструктуры, кластер частиц.

DOI: [10.55959/MSU0579-9392.78.2350105](https://doi.org/10.55959/MSU0579-9392.78.2350105)

ВВЕДЕНИЕ

Оптические свойства структур, включающих наличие благородных металлов, представляют особый интерес как для физиков, так и для технологов. Этот интерес связан с возникновением в этих структурах локализованных поверхностных плазмонных резонансов (ПР) [1]. ПР приводит к резкому увеличению рассеяния и поглощения света, концентрируя энергию вблизи поверхности. Свет, поглощаемый металлической структурой, трансформируется внутри в тепло за счет эффекта Джоуля из-за высокой электропроводности плазмонных металлов. Это явление порождает новую область плазмоники, называемую термоплазмоникой, которая использует фототермические свойства металлических наночастиц. Область термоплазмоники является ключом к множеству захватывающих приложений в фототермической терапии, стерилизации и дезинфекции, клеточной биологии, фототермической химии, сборе солнечного света, выработке тепловой энергии и опреснении воды [2, 3].

Особый интерес вызывают гибридные наночастицы ядро@оболочка, ядро которых представляет собой магнитный материал (Fe_3O_4 или Fe_2O_3),

а оболочка состоит из благородных металлов — золота (Au) или серебра (Ag) [4]. Этот интерес связан с тем, что такая гибридная наноструктура сочетает в себе супермагнитные свойства наночастиц магнетита и уникальные оптические свойства гибридных наноматериалов благородных металлов. Эта двойная функциональность делает такие магнетоплазмонные наночастицы потенциальными кандидатами в многочисленных практических приложениях [5].

Онкологические заболевания стали широко распространенной и постоянно растущей проблемой общественного здравоохранения в развитых и в большинстве развивающихся стран. Согласно базе данных GLOBOCAN 2020, опубликованной Международным агентством по изучению рака, в 2020 году число новых больных раком составило 19.3 миллиона, а число смертей от рака составило почти 10 миллионов [6]. К настоящему времени с углублением понимания сущности рака и обновлением концепций его лечения были изучены разнообразные методы лечения раковых опухолей, включая хирургию, химиотерапию, лучевую терапию, термотерапию, а также магнито-фототерапию [7].

Фототермическая терапия — важный терапевтический подход, основанный на облучении светом, считается эффективным неинвазивным методом лечения рака [8]. Внедренные наночастицы после облучения светом ближнего инфракрасного диапазона могут эффективно преобразовывать свет в теп-

* E-mail: eremin@cs.msu.ru

† E-mail: penzar.as17@physics.msu.ru

ло, действуя как агенты фототермической терапии, уничтожая злокачественные клетки и снижая побочные воздействия на здоровые ткани [9, 10]. В частности, благодаря суперпарамагнитной природе ядер Fe_3O_4 и наличию оболочек из Au хорошо разработанные наноконкомпозиты $\text{Fe}_3\text{O}_4@Au$ могут использоваться в качестве идеальных нанотерапевтических агентов и они могут проникать в области опухоли и накапливаться в них. Кроме того, ядра Fe_3O_4 наделили гибриды Fe_3O_4Au способностью нацеливания, что еще больше способствует распространению нанотерапевтических агентов в раковых клетках с помощью внешнего магнитного поля и, таким образом, уменьшает повреждение здоровых клеток [11].

В настоящее время магнитное «нацеливание» широко признано идеальной технологией доставки магнитоплазмонных частиц в нужное место. Во-первых, магнитное нацеливание обладает хорошей управляемостью и предсказуемостью при стимуляции внешним постоянным магнитным полем, что позволяет добиться точечной доставки без изменения характера окружающей среды. Во-вторых, магнитное нацеливание может вызвать эффективное быстрое накопление магнитоплазмонных частиц в местах опухоли и, таким образом, уменьшить повреждение нормальных тканей [12]. Следует отметить, что комбинация магнитных наночастиц, состоящих из суперпарамагнитного ядра Fe_3O_4 , покрытого Au-пленкой, позволяет не только преодолеть недостаточное накопление их в опухолевых тканях, но и избежать использования избыточной мощности лазера и тем самым расширить область клинического применения фототерапии [13].

Быстрый прогресс синтеза магнитоплазмонных наноструктур обуславливает их стремительное уменьшение в размерах. Например, сейчас синтезируются гибридные частицы со средним размером 16–20 нм, включая толщину золотой оболочки, составляющую всего 2–5 нм [14, 15]. Вместе с тем уменьшение толщины золотой оболочки до нескольких нанометров приводит к возникновению пространственной дисперсии металла. В этом случае нарушаются обычные локальные соотношения между электрическим полем и смещением, входящими в систему уравнений Максвелла. Как следствие, возникает квантовый эффект пространственной дисперсии (ПД) [16, 17]. Последнее означает, что электрическое смещение в данной точке определяется не только электрическим полем в той же точке, но и значениями поля в окрестности (нелокальность).

Следует отметить, что в физике эффектом пространственной дисперсии называют зависимость диэлектрической проницаемости не только от частоты (частотная дисперсия), но и от волнового вектора [18, 19]. Последний случай не является присущим исключительно плазмонным наноструктурам, что существенно отличает его от квантового эффекта нелокальности, влияние которого исследуется в данной статье.

Для изучения эффектов ПД можно использовать чисто квантовый подход, основанный на решении уравнения Шредингера для облака электронов в металле [20]. Однако такой подход становится обременительным в вычислительном отношении для частиц размером более десятка нанометров и для металлов с высокой плотностью свободных носителей заряда, таких как благородные металлы Au, Ag, Pt [21].

В последнем случае наиболее приемлемым является использование квазиклассических моделей, позволяющих исследовать плазмонные эффекты в рамках системы Максвелла. Одним из таких подходов, позволяющим учитывать пространственную дисперсию плазмонного металла, является теория обобщенного нелокального отклика (ОНО) [22, 23]. Эта теория позволяет исследовать оптические характеристики плазмонных слоистых наночастиц с учётом пространственной дисперсии материала оболочки [24].

В предыдущей статье авторов [25] было исследовано влияние пространственной дисперсии на характеристики поглощения слоистой частицей, обладающей цилиндрической симметрией. В частности, было показано, что за счет вариации толщины золотого слоя и вещества ядра удается обеспечить сдвиг максимума поглощения в область прозрачности человеческих тканей, расположенную правее 750 нанометров. Установлено, что деформация частицы меняет как амплитуду сечения поглощения, так и расположение его максимума в зависимости от направления внешнего возбуждения. Определено, что учет пространственной дисперсии в оболочке приводит к снижению интенсивности поглощения и сдвигу положения максимума в коротковолновую область.

В настоящей статье исследуется влияние ПД на характеристики поглощения и усиления интенсивности ближнего поля кластера слоистых наночастиц цилиндрической симметрии. Особое внимание уделяется влиянию расстояния между частицами на распределение интенсивности поля и на положение ПР. Установлено, что увеличение этого расстояния по-разному изменяет положение и амплитуду ПР в зависимости от угла падения внешнего возбуждения. Также проведен анализ влияния смещения ядра относительно геометрического центра частицы на усредненные по углу падения характеристики поглощения и усиления ближнего поля.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Будем рассматривать задачу дифракции поля плоской линейно поляризованной волны на кластере двух бесконечных наночилиндрах произвольного поперечного сечения, состоящих из магнитного ядра (Fe_3O_4 или Fe_2O_3) D_1 и золотой оболочки D_2 , расположенных в однородной изотропной среде D_0 (рис. 1). Расстояние между частицами равно δ . Поле плоской P-поляризованной волны $\{\mathbf{E}^{inc}, \mathbf{H}^{inc}\}$

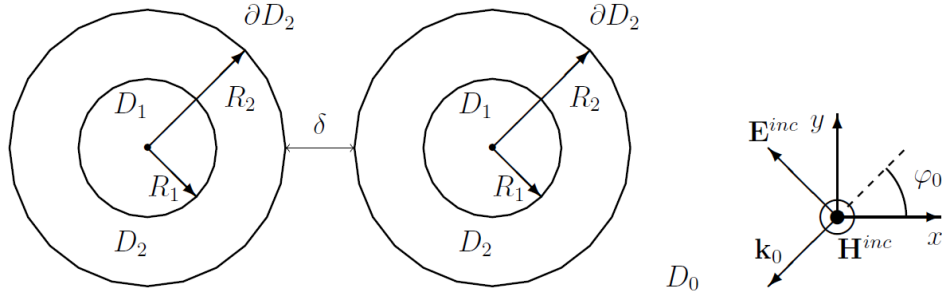


Рис. 1. Геометрия задачи

при этом имеет вид

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^{inc}(M) &= (-\mathbf{e}_x \sin \varphi_0 + \mathbf{e}_y \cos \varphi_0) \times \\ &\quad \times e^{-ik_0(x \cos \varphi_0 + y \sin \varphi_0)}, \\ \mathbf{H}^{inc}(M) &= -n_0 \mathbf{e}_z e^{-ik_0(x \cos \varphi_0 + y \sin \varphi_0)}, \end{aligned} \quad (1)$$

где $\{\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\}$ — базис декартовой системы координат, φ_0 — угол падения плоской волны, а ось z направлена вдоль оси цилиндров, $k_i = k\varepsilon_i$ — волновое число в среде D_i , $i = 0, 1, 2$, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, λ — длина волны внешнего возбуждения, $n_0 = \sqrt{\varepsilon_0}$, а зависимость от времени имеет вид $e^{-i\omega t}$. Заметим, что для S-поляризации эффекты нелокальности не возникают благодаря тому, что в этом случае у вектора электрического поля только E_z -компонента является

$$\begin{aligned} \text{rot} \mathbf{H}_1(M) &= -ik\varepsilon_1 \mathbf{E}_1(M), \quad \text{rot} \mathbf{E}_1(M) = ik \mathbf{H}_1(M), \quad M \in D_1, \\ \text{rot} \mathbf{H}_0(M) &= -ik\varepsilon_0 \mathbf{E}_0(M), \quad \text{rot} \mathbf{E}_0(M) = ik \mathbf{H}_0(M), \\ \mathbf{E}_0(M) &= \mathbf{E}_e(M) + \mathbf{E}^{inc}(M), \quad \mathbf{H}_0(M) = \mathbf{H}_e(M) + \mathbf{H}^{inc}(M), \quad M \in D_0, \\ \text{rot} \mathbf{H}_2(M) &= ik[-\varepsilon_{T_2} \mathbf{E}_{T_2}(M) + \xi^2 \text{grad div} \mathbf{E}_L(M)], \quad \text{rot} \mathbf{E}_2(M) = ik \mathbf{H}_2(M), \\ \mathbf{E}_2(M) &= \mathbf{E}_{T_2}(M) + \mathbf{E}_L(M), \quad M \in D_2, \end{aligned} \quad (2)$$

где ξ характеризует масштаб пространственной дисперсии и, в соответствии с теорией ОНО, вычисляется по следующей формуле [27]:

$$\xi^2 = \varepsilon_L(\beta^2 + D(\gamma - i\omega))/(\omega^2 + i\gamma\omega).$$

Здесь ω — частота колебания электромагнитного поля, D — коэффициент диффузии электронов, $\beta^2 = 3/5v_F^2$, v_F — скорость Ферми. Вклад в диэлектрическую проницаемость от связанных электронов и ионов с учетом межзонных переходов ε_L и соответствующее волновое число определяются в соответствии с теорией Друде–Зоммерфельда оптических свойств металлов с учетом выбранной временной зависимости:

$$\varepsilon_L = \varepsilon_{T_2} + \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega}, \quad k_L^2 = \varepsilon_L/\xi^2,$$

где ω_p — плазменная частота металла, γ — частота столкновений электронов. Все величины, относящиеся к ПД, указаны только для оболочки из плазмонного металла D_2 , так как в магнитном ядре D_1 подобных эффектов не возникает.

ненулевой. Все среды предполагаются немагнитными в оптическом диапазоне длин волн, а магнитные свойства ядра проявляются только в статическом магнитном поле. В случае описанной геометрии и внешнего возбуждения (1) рассматриваемая задача дифракции может быть сведена к рассмотрению задачи в плоскости (x, y) [26].

Обозначим $\{\mathbf{E}_e, \mathbf{H}_e\}$ — рассеянное поле в D_0 , $\{\mathbf{E}_i, \mathbf{H}_i\}$ — полное поле в каждой из областей D_i , $i = 0, 1, 2$. Также предположим, что поверхности обоих слоев наночастицы $\partial D_i \in C^2$, $i = 1, 2$. Математическая постановка аналогичной задачи дифракции на одной частице была приведена в работе [23]. В данной задаче уравнения Максвелла во всех областях D_i остаются без изменений:

Однако стоит учесть, что здесь поле $\{\mathbf{E}_e, \mathbf{H}_e\}$ включает в себя рассеянное поле как от первой, так и от второй частицы:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_e(M) &= \mathbf{E}_e^{(1)}(M) + \mathbf{E}_e^{(2)}(M), \\ \mathbf{H}_e(M) &= \mathbf{H}_e^{(1)}(M) + \mathbf{H}_e^{(2)}(M), \quad M \in D_0, \end{aligned} \quad (3)$$

Далее выпишем условия сопряжения для тангенциальных компонент полей на ∂D_1 и ∂D_2 :

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_{P_1} \times [\mathbf{E}_1(P) - \mathbf{E}_2(P)] &= 0, \\ \mathbf{n}_{P_1} \times [\mathbf{H}_1(P) - \mathbf{H}_2(P)] &= 0, \quad P \in \partial D_1, \\ \mathbf{n}_{P_2} \times [\mathbf{E}_2(P) - \mathbf{E}_e(P)] &= \mathbf{n}_{P_2} \times \mathbf{E}^{inc}(P), \\ \mathbf{n}_{P_2} \times [\mathbf{H}_2(P) - \mathbf{H}_e(P)] &= \mathbf{n}_{P_2} \times \mathbf{H}^{inc}(P), \quad P \in \partial D_2, \end{aligned} \quad (4)$$

где \mathbf{n}_{P_i} — внешняя единичная нормаль к поверхностям ∂D_i , $i = 1, 2$. Кроме того, появляются дополнительные граничные условия на нормальные компоненты полей, связанные с возникновением продоль-

ных полей в плазмонной среде:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 \mathbf{n}_{P_1} \cdot \mathbf{E}_1(P) &= \varepsilon_L \mathbf{n}_{P_1} \cdot \mathbf{E}_2(P), & P \in \partial D_1, \\ \varepsilon_L \mathbf{n}_{P_2} \cdot \mathbf{E}_2(P) &= \varepsilon_0 \mathbf{n}_{P_2} \cdot \mathbf{E}_0(P), & P \in \partial D_2. \end{aligned} \quad (5)$$

Наконец, используем условие излучения Сильвера–Мюллера [28] на бесконечности:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \sqrt{r} [\sqrt{\varepsilon_0} \mathbf{E}_e(M) \times \frac{\mathbf{r}}{r} - \mathbf{H}_e(M)] = 0, \quad (6)$$

$$r = |M| \rightarrow \infty.$$

Кроме того, $\text{Im } \varepsilon_{T_2}, \text{Im } \varepsilon_1, \text{Im } \varepsilon_L \geq 0, i = 1, 2$. Будем полагать, что задача дифракции (2) с условиями сопряжения (4), дополнительными условиями (5), условием излучения (6) и с внешним возбуждением (1) имеет единственное решение.

2. ПОСТРОЕНИЕ РЕШЕНИЯ

2.1. Метод дискретных источников

В данной работе для построения решения используется схема метода дискретных источников, неоднократно описанная, например, в работе [29]. Кратко обозначим вид представлений поперечных

$$\mathbf{E}_\alpha^{T,N} = \frac{1}{k} \sum_{n=1}^N p_n^\alpha \text{rot}(\mathbf{e}_z U_\alpha(M, M_n)), \quad \alpha = 0, 1, 2 \quad (7)$$

и продольных электромагнитных полей

$$\mathbf{E}_\pm^{L,N} = \frac{1}{k} \sum_{n=1}^N p_n^{\pm} \text{grad} V^\pm(M, M_n) \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} U_1(M, M_n) &= J_0(k_1 R_{MM_n}) \\ U_0(M, M_n) &= H_0^{(1)}(k_0 R_{MM_n}) \\ U_{2\pm}(M, M_n) &= H_0^{(1,2)}(k_2 R_{MM_n}) \\ V^\pm &= H_0^{(1,2)}(k_L R_{MM_n}) \\ R_{MM_n} &= \sqrt{(x - x_n)^2 + (y - y_n)^2} \end{aligned}$$

Координаты дискретных источников (ДИ) располагаются на вспомогательной поверхности внутри ядра каждой частицы. Отметим, что внутри слоя D_2 поля представляются в виде суперпозиции уходящих и «приходящих» волн, то есть $\mathbf{E}_2^{T,N} = \mathbf{E}_{2+}^{T,N} + \mathbf{E}_{2-}^{T,N}$, $\mathbf{E}_2^{L,N} = \mathbf{E}_+^{L,N} + \mathbf{E}_-^{L,N}$.

Магнитное поле во всех областях определяется из уравнения Максвелла как

$$\mathbf{H}_\alpha^N = -\frac{i}{k} \text{rot} \mathbf{E}_\alpha^{T,N}, \quad \alpha = 0, 1, 2. \quad (9)$$

Приближенное решение (7)–(9) удовлетворяет системе уравнений Максвелла (2) и условиям излучения (6). Неизвестные амплитуды ДИ

$\{p_n^\alpha, q_n^\alpha, p_n^{L\pm}, q_n^{L\pm}\}$, $\alpha = \pm 0, 1, 2$, определяются с помощью метода коллокаций из условий сопряжения на поверхностях цилиндра (4)–(5). Амплитуды находятся методами минимизации невязки в норме L_2 как псевдорешение получившейся системы уравнений [30].

Также здесь важно отметить, что представления полей (7)–(9) зависят только от расстояния R_{MM_n} и от области D_i . Именно эта особенность позволяет перейти от задачи дифракции на кластере двух частиц к двум задачам дифракции на одной частице, вдвое уменьшая размерность матриц системы.

2.2. Переход к двум задачам дифракции

Пусть на внешней границе каждого цилиндра ∂D_2 расположены M точек коллокаций и N ДИ внутри на некоторой вспомогательной поверхности. Тогда, потребовав выполнение граничных условий в точках коллокации на двух частицах, запишем получившуюся систему уравнений:

$$\begin{cases} U_i^{(1)}(S_1) - U_e^{(1)}(S_1) - U_e^{(2)}(S_1) = U^{(0)}(S_1), \\ U_i^{(2)}(S_2) - U_e^{(1)}(S_2) - U_e^{(2)}(S_2) = U^{(0)}(S_2), \end{cases} \quad (10)$$

где $U^{(i)}(S_i)$, $i = 1, 2$ — электромагнитные поля частицы на границе этой же частицы, $U^{(i)}(S_j)$, $i \neq j = 1, 2$, — поле i -й частицы на поверхности j -й частицы, U_i , U_e , $U^{(0)}$ — поле в золотой оболочке, рассеянное поле и поле падающей волны соответственно. Как видно, частицы взаимодействуют только через рассеянное поле.

Запишем граничные условия (10) в матричном виде:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A_1 & A_2 \\ A_3 & A_4 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} P_1 \\ P_2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix}, \\ A_1 &= \left(U_i^{(1)}(S_1) - U_e^{(1)}(S_1) \right), \quad A_2 = \left(0 - U_e^{(2)}(S_1) \right) \\ A_3 &= \left(0 - U_e^{(1)}(S_2) \right), \quad A_4 = \left(U_i^{(2)}(S_2) - U_e^{(2)}(S_2) \right), \end{aligned}$$

где столбец $\mathbf{P} = \begin{pmatrix} P_1 \\ P_2 \end{pmatrix}$ обозначает амплитуды ДИ на первой и второй частицах.

Учитывая, что вследствие равенства расстояний $U^{(1)}(S_1) = U^{(2)}(S_2)$ и $U_e^{(2)}(S_1) = U_e^{(1)}(S_2)$, получим $A_1 = A_4$ и $A_2 = A_3$ и перепишем в следующем виде:

$$\begin{pmatrix} A_1 & A_2 \\ A_2 & A_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} P_1 \\ P_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix}, \quad (11)$$

где матрица \mathbf{A} и столбцы \mathbf{P} и \mathbf{B} являются клеточными.

Заметим, что матрица \mathbf{A} — циркулянтная, а значит, имеет место разложение [31]

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} F_2^* \cdot \text{diag}(F_2 c) \cdot F_2,$$

где c — первый столбец матрицы \mathbf{A} , $F_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & e^{\frac{2\pi i}{2}} \end{pmatrix}$ — матрица дискретного преобразования Фурье. Далее система (11) преобразуется к следующему виду:

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_1 + A_2 & 0 \\ 0 & A_1 - A_2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} P_1 \\ P_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} A_1 + A_2 & 0 \\ 0 & A_1 - A_2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} P'_1 \\ P'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B'_1 \\ B'_2 \end{pmatrix},$$

где $\begin{pmatrix} P'_1 \\ P'_2 \end{pmatrix} = F_2 \cdot \begin{pmatrix} P_1 \\ P_2 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} B'_1 \\ B'_2 \end{pmatrix} = 2 \cdot (F_2^*)^{-1} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix}$.

Таким образом, получаем две системы уравнений, каждую из которых будем решать по отдельности, что снижает погрешность решения и ускоряет расчеты:

$$\begin{cases} (A_1 + A_2) \cdot P'_1 = B'_1, \\ (A_1 - A_2) \cdot P'_2 = B'_2. \end{cases} \quad (12)$$

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Определим диаграмму рассеяния с помощью следующей формулы [28]:

$$\frac{|\mathbf{E}_e^N(M)|}{|\mathbf{E}^{inc}(M)|} = F(\varphi) \cdot \frac{e^{ik_0 r}}{\sqrt{r}} + o\left(\frac{1}{\sqrt{r}}\right), \quad r \rightarrow \infty,$$

и также определим полное сечение рассеяния, которое представляет собой суммарную интенсивность рассеянного поля на бесконечности, с помощью следующего интеграла.

$$\sigma_{scs} = \int_0^{2\pi} |F(\varphi)|^2 d\varphi. \quad (13)$$

Учитывая асимптотику функции Ханкеля [32], из (13) получаем

$$F(\varphi) = \sqrt{\frac{2}{\pi k_0}} \cdot e^{-i\frac{\pi}{4}} \cdot \sum_{n=1}^N \left((p_n^0)^1 \cdot e^{-ik_0(x_n - \frac{d}{2}) \cos \varphi} + (p_n^0)^2 \cdot e^{-ik_0(x_n + \frac{d}{2}) \cos \varphi} \right), \quad (14)$$

где $(p_n^0)^1, (p_n^0)^2$ — амплитуды ДИ, характеризующие рассеянное первой и второй частицей поле соответственно.

Используя формулу для сечения экстинкции [25]

$$\sigma_{ext} = 2\sqrt{\frac{\pi}{k}} \left\{ \text{Im}F(\pi + \varphi_0) - \text{Re}F(\pi + \varphi_0) \right\} \quad (15)$$

и оптическую теорему $\sigma_{abs} = \sigma_{ext} - \sigma_{scs}$, можем вычислить сечение поглощения. Также для определения усиления поля вблизи частиц, которая может быть использована для визуализации тканей, будем

вычислять коэффициент усиления в среднем по поверхности частицы (Surface enhancement factor).

$$SEF = \frac{\int |E_e + E^0|^2 d\sigma}{\int |E^0|^2 d\sigma}. \quad (16)$$

Рассмотрим численные результаты анализа оптических характеристик кластера слоистых частиц, состоящих из магнитного ядра Fe_2O_3 или Fe_3O_4 . В предыдущей работе было показано [25], что в случае данных материалов, а также при диаметре ядра $D_1 = 12$ нм и толщине золотой оболочки $d = 2$ нм достигается наиболее оптимальный сдвиг положения ПР в длинноволновую область как в локальном, так и в нелокальном случаях. Поэтому при моделировании результатов были выбраны именно эти параметры. Кластер располагается в воде с индексом рефракции $n_0 = 1.33$, квантовые характеристики модели ОНО для золота $\hbar\omega_p = 9.02$ эВ, $v_F = 1.39 \cdot 10^6$ мс⁻¹, $D = 8.62 \cdot 10^{-4}$ м²с⁻¹, $\hbar\gamma = 0.071$ эВ взяты из работы [23]. Величина диэлектрической проницаемости определялась в соответствии с частотной дисперсией материала: для золота [33] и для материала ядра [34].

Нахождение «оптимального» расстояния δ между частицами является важной задачей, так как вопросы поддержания определенного расстояния между наночастицами в кластерах играют весьма существенную роль в некоторых практических приложениях. Например, при намерениях организации горячей точки (hot spot) в промежуток между частицами для усиления ближнего поля. В этом случае используют дополнительное прозрачное покрытие, а в самое последнее время этого добиваются, организуя «суперкристаллы». Покрытия образуются после помещения частиц в специальные жидкости, показатель преломления которых близок к среде внедрения, и последующей сушки [35].

На рис. 2 приведены результаты для коэффициента усиления. Рис. 2, а демонстрирует, что при угле падения внешнего возбуждения $\varphi_0 = \pi/2$, то есть в случае падения перпендикулярно оси, соединяющей центр частиц, амплитуда ПР максимальна, а положение пикового значения смещено в длинноволновую область около 950 нм. Данное явление связано с тем, что частицы возбуждаются симметрично, вследствие чего амплитуда резонанса возрастает. На графике рис. 2, б показано, что при угле падения $\varphi_0 = \pi/2$ амплитуда резонанса с увеличением δ уменьшается, а его положение слегка сдвигается в коротковолновую область. Такое поведение вполне естественно, так как интенсивность в горячей точке (hot spot) будет тем больше, чем меньше расстояние между частицами. Таким образом, оптимальными характеристиками для достижения максимального усиления поля вблизи частиц являются $\varphi_0 = \pi/2$ и $\delta = 2$ нм, что и будет использовано в последующих графиках. Также продемонстрировано, что учет эффектов нелокальности приводит к незначительному снижению интенсивности

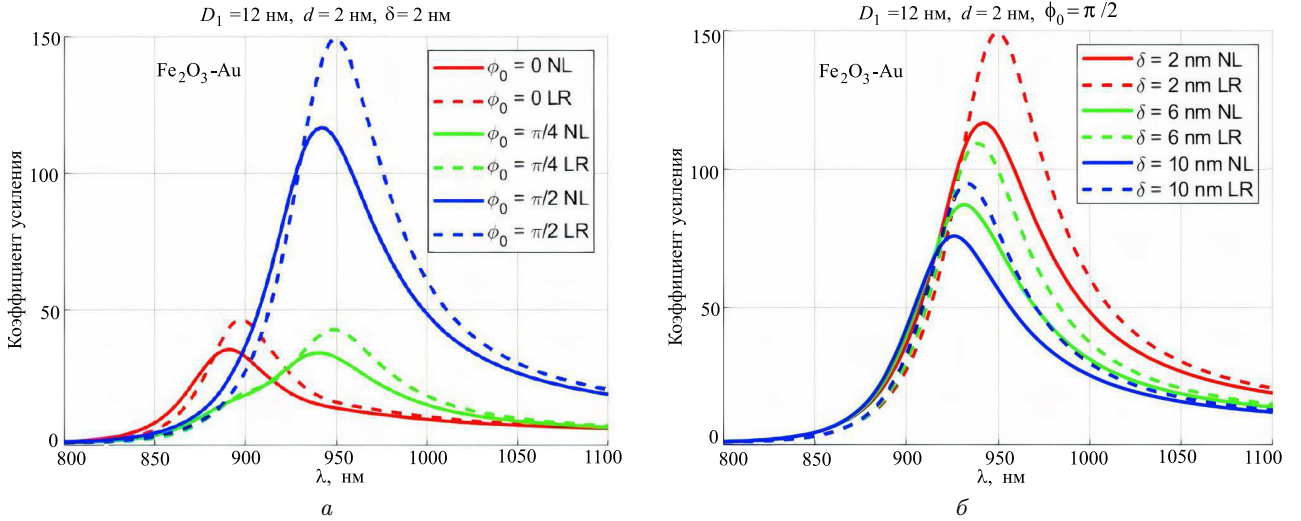


Рис. 2. Коэффициент усиления кластера двух цилиндрических частиц кругового сечения с ядрами Fe_2O_3 диаметра $D_1 = 12$ нм, покрытыми золотой оболочкой толщиной 2 нм с различным углом падения внешнего возбуждения φ_0 (а) в зависимости от расстояния между частицами при угле падения $\varphi_0 = \pi/2$ (б). Сравнение локального случая (LR) с нелокальным ОНО (NL)

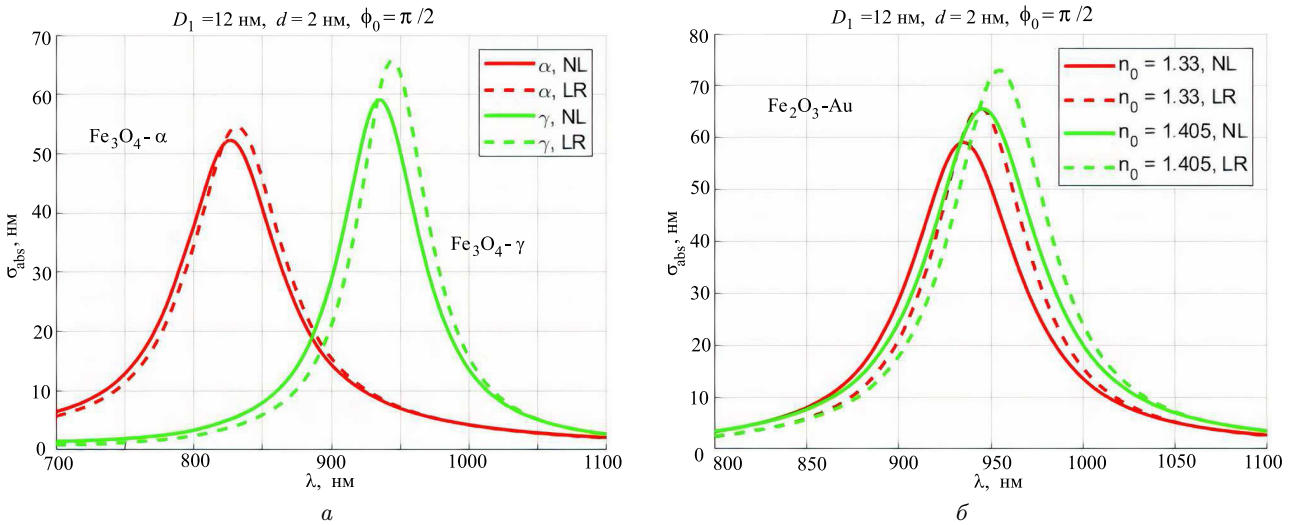


Рис. 3. Сечение поглощения кластера двух цилиндрических частиц кругового сечения с различными ядрами (а), Fe_3O_4 и Fe_2O_3 , и ядром Fe_2O_3 диаметра $D_1 = 12$ нм, покрытыми золотой оболочкой толщиной 2 нм с различным индексом рефракции среды n_0 (б). Сравнение локального случая (LR) с нелокальным ОНО (NL)

и сдвигу плазмонного резонанса (ПР) в область коротких волн. Аналогичные результаты имеют место и для сечения поглощения.

На рис. 3 продемонстрированы результаты для сечения поглощения. Рис. 3, а показывает, что сечение поглощения кластера частиц с ядрами Fe_3O_4 имеет максимум вблизи 825 нм, а в случае ядер Fe_2O_3 максимум смещается в длинноволновую область — около 940 нм. Также можно заметить, что во втором случае амплитуда ПР немногим, чем в первом. Последняя особенность связана с тем, что материал Fe_2O_3 обладает более высоким индексом рефракции, чем Fe_3O_4 . Однако магнитные свойства в случае Fe_3O_4 более сильные, что слегка упрощает доставку таких частиц в необходимое место в человеческих тканях. На рис. 3, б представлено сравне-

ние сечения поглощения в случае различных внешних сред: воды $n_0 = 1.33$ и тканей женской груди $n_0 = 1.405$. Видно, что с увеличением плотности внешней среды положение ПР слегка сдвигается в инфракрасную область, а амплитуда незначительно увеличивается.

Стоит отметить, что синтез наночастиц с заданной геометрией не всегда проходит успешно, в результате чего допускаются погрешности. Например, в результате синтеза ядро может оказаться смещено относительно геометрического центра частицы. На рис. 4 представлены результаты для сечения поглощения и коэффициента усиления кластера двух частиц в случае сдвига ядра относительно геометрического центра частицы вплоть до $s = 1$ нм. Амплитуда ПР в этом случае смещается

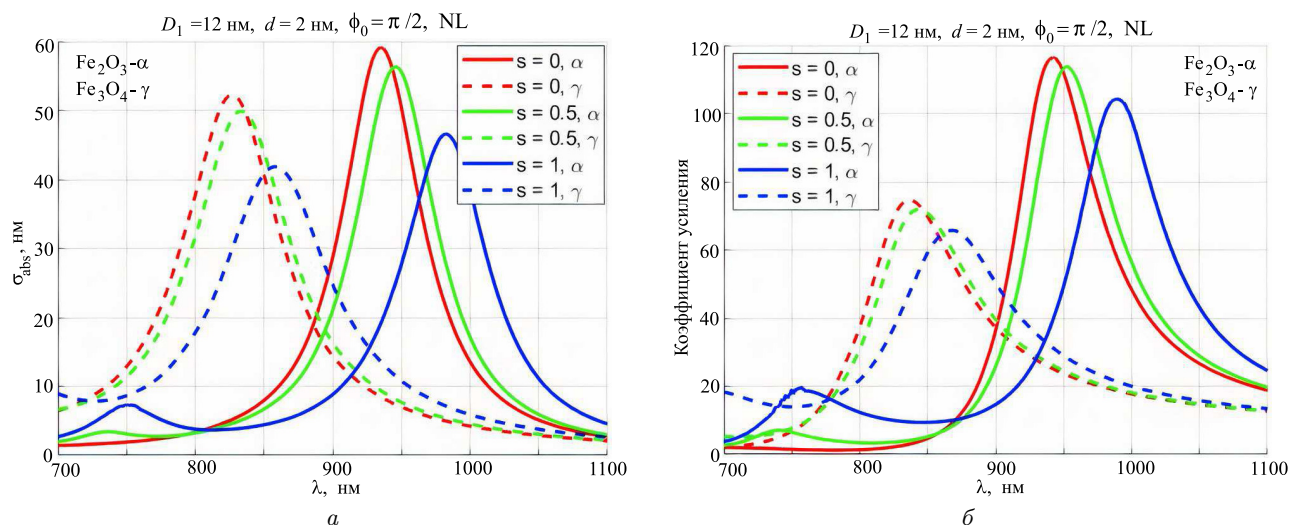


Рис. 4. Сечение поглощения (а) и коэффициент усиления средней по поверхности интенсивности поля (б) кластера двух частиц кругового сечения с различными ядрами, $\text{Fe}_2\text{O}_3 - \alpha$ и $\text{Fe}_3\text{O}_4 - \gamma$, при различных сдвигах ядра. Нелокальный случай

в длинноволновую область, а значение максимума незначительно уменьшается как для ядра Fe_3O_4 , так и для Fe_2O_3 . Вследствие этого на практике необходимо учитывать, что положение ПР может варьироваться в зависимости от того, как точно были синтезированы частицы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Показано, что за счет вариации расстояния между частицами и использования различного вещества ядра можно управлять положением максимумов сечения поглощения и коэффициента усиления.
2. Продемонстрировано, что при падении внешнего возбуждения перпендикулярно оси, соединяющей центры двух частиц, достигается

максимальное усиление поля вблизи частиц, а положение ПР смещается в длинноволновую область до 950 нм.

3. Показано, что увеличение плотности внешней среды влечет за собой сдвиг положения максимума поглощения в инфракрасную область и незначительное увеличение амплитуды.
4. Установлено, что смещение ядра относительно геометрического центра частицы существенно влияет на положение максимума как в случае сечения поглощения, так и в случае коэффициента усиления, причём амплитуда уменьшается с увеличением смещения.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №22-21-00110.

- [1] Yeneayehu K., Senbeta T., Mesfin B. // *Ph. E Low-dim. Syst. Nan.* **134**, 114822. (2021).
- [2] Baffou G., Cichos F., Quidant R. // *Nat. Mater.* **19**, 946. (2020).
- [3] Kreibig U., Vollme M. // *Optical Properties of Metal Clusters*. Springer. Berlin. 1995.
- [4] Duan H., Chen R., Yuan Z., Xu C. // *Opt Express*. **26**, 23. 29956. (2018).
- [5] Chehaidar A. // *Int. J. Thermal Sciences*. **188**, 108227. (2023).
- [6] Sung H., Ferlay J., Siegel R. et al. // *J. Clin.* **71**, 3. 209. (2021).
- [7] Ali E.S., Sharker S.M., Islam M.T. et al. // *Semin. Cancer Biol.* **69**. 52. (2021).
- [8] Zhan X., Nie X., Gao F. et al. // *Biomater. Sci.* **8**, 5931. (2020).
- [9] Chen Y., Li Y., Liu J. et al. // *J. Control. Release*. **335**, 345. (2021).
- [10] Luk'yanchuk B., Miroshnichenko A., Tribelsky M. et al. // *New J. of Phys.* **14**. 093022. (2012).
- [11] Tianxiang Z.T., Huang J., Zhao W. et al. // *J. Alloys Comp.* **944**. 169206. (2023).
- [12] Yand D., Yang G., Yang P. et al. // *Adv. Funct. Mater.* **27**, 18. 1700371. (2017).
- [13] Yand Y., Wang C., Tian C. et al. // *J. Mater. Chem. B*. **6**, 42. 6848. (2018).
- [14] Rajkumar S., Prabakaran M. // *Colloids Surf. B: Biointerfaces*. **174**, 252. (2019).
- [15] Dhey M.A., Aziz A.A., Jameel M.S. et al. // *Ultras. Sonochem.* **64**. 104865. (2020).
- [16] David C., Garcia de Abajo F.J. // *J. Phys. Chem. C*. **115**, 40. 19470. (2011).
- [17] Kinsler P. // *Photonics Nanostr. - Fundamentals Appl.* **43**, 100897. (2021).
- [18] Агранович В.М., Гинзбург В.Л. // *УФН*. **76**, № 4. 643. (1962).

- [19] *Halas N., Lal S., Chang W.-C. et al. // Chem. Rev. 111, 6. 3913. (2011).*
- [20] *Barbry M., Koval P., Marchesin F. et al. // Nano Lett. 15. 3410. (2015).*
- [21] *Zheng X., Kupresak M., Verellen N. et al. // Adv. Th. Simul. 3, 1, 1900172. (2019).*
- [22] *Mortensen N.A., Raza S., Wubs M. et al. // Nat. Commun. 5, 3809. (2014).*
- [23] *Wubs M., Mortensen N.A. Quantum Plasmonics. / S.I. Bozhevolnyi et al. (eds.). Springer. Switzerland. (2017). P. 279.*
- [24] *Еремин Ю.А., Свешников А.Г. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. Физ. Астрон. № 5. 91. (2020). (Eremin Yu.A., Sveshnikov A.G. // Moscow Univ. Phys. Bull. 75, 480 (2020)).*
- [25] *Еремин Ю.А., Пензарь А.С. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. Физ. Астрон. № 4. 3. (2022). (Eremin Yu.A., Penzar A.S. // Moscow Univ. Phys. Bull. 77, 581 (2022)).*
- [26] *Дмитриев В.И., Захаров Е.В. // Метод инт. ур. в выч. эл. М.: Макс пресс. 2008.*
- [27] *Raza S., Bozhevolnyi S.I., Wubs M., Mortensen N.A. // J. Phys. Condens. Matter. 27, 18. 1. (2015).*
- [28] *Colton D., Kress R. Integral Equation Methods in Scattering Theory. Wiley. 1983.*
- [29] *Eremin Y.A., Fikioris G., Tsitsas N.L., Wriedt T. // J. Comp. Appl. Math. 386, 113231. (2021).*
- [30] *Пензарь А.С., Еремин Ю.А. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 15. Вычисл. матем. и киберн. № 4. 20. (2022).*
- [31] *Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А. Матрицы и вычисления. М.: Наука. 1984.*
- [32] *Korn A., Korn M. Mathematical Handbook for Scientists and Engineers. McGraw-Hill. 1961.*
- [33] *Johnson P.B., Christy R.W. // Phys. Rev. 6. 12. 4370. (1972).*
- [34] www.refractiveindex.info
- [35] *Liu D., Li C., Zhou F. et al. // Sci. Rep. 5, 7686. (2015).*

Influence of spatial dispersion in metal on optical characteristics of a magnetoplasmonic layered nanoparticle cluster

Yu.A. Eremin^{1,a}, A.S. Penzar^{2,b}

¹*Computational Mathematics and Cybernetics Faculty, Department of Mathematical Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia*

²*Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia*
E-mail: ^aeremin@cs.msu.ru, ^bpenzar.as17@physics.msu.ru

In the current work, the diffraction problem of a plane electromagnetic wave on a cluster of two layered nanocylinders consisting of a magnetoplasmonic core and a gold shell is considered. The arising effects of spatial dispersion in the gold shell are taken into account within the framework of the generalized nonlocal optical response theory. Based on the discrete source method scheme, an analysis of the influence of the mutual arrangement of particles, their deformation, and the effect of spatial dispersion on the behaviour of the absorption cross-section and the near-field enhancement factor is conducted. It is shown that the position of the plasmon resonance can be shifted to the transparency region of biological tissues by varying the distance between particles and the core material. It has been established that taking into account spatial dispersion in the gold shell leads to a decrease in intensity and a slight shift of the plasmon resonance position to the shortwave region, without going beyond the tissue transparency region.

PACS: 42.25.Fx, 03.65.Ud, 03.50.De, 02.60.Cb.

Keywords: discrete source method, nanoplasmonics, spatial dispersion, magnetoplasmonic nanostructures, particle cluster.

Received 08 April 2023.

English version: *Moscow University Physics Bulletin. 2023. 78, No. 5, pp. 609–617.*

Сведения об авторах

1. Еремин Юрий Александрович — доктор физ.-мат. наук, вед. науч. сотрудник; e-mail: eremin@cs.msu.ru .
2. Пензарь Александр Сергеевич — аспирант; e-mail: sashapenzar@yandex.ru.