

мации, основанных на ориентации микропробоев и различаи в размерах. Разработанный алгоритм обладает высокой точностью и устойчивостью и может быть использован для метода записи информации.

#### Литература

1. *В.И. Емельяненко, О.О. Людчик.* Разработка метода записи информации внутри прозрачных материалов. Сборник работ 73-й научной конференции студентов и аспирантов Белорусского государственного университета: том 1. БГУ, 2016. – с.359 – 362.
2. *J. Zhang, M. Gecevičius, M. Beresna.* Seemingly unlimited lifetime data storage in nano-structured glass // *Phys. Rev. Lett.* 112, 2014.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ПЛАЗМОНОВ В НАНОЧАСТИЦАХ МЕТАЛЛОВ

А. И. Мухаммад

### ВВЕДЕНИЕ

Важность исследований плазмонных эффектов в наночастицах металлов обусловлена той широкой гаммой их практических применений в медицине, биологии и технике, которая сложилась к настоящему времени и прогнозируется в будущем [1,2]. Плазмоны - колебания электронов проводимости в металлических наночастицах - имеют фиксированную частоту резонанса, которая определяется геометрией наночастиц, а также свойствами частиц и окружающей среды [2]. Поэтому оптические свойства коллоидных растворов наночастиц металлов характеризуются наличием ярко выраженной резонансной полосы, называемой **полосой плазмонного резонанса (ППР)** [1].

Для моделирования плазмонных наноструктур используются различные численные методы, как во временной области, так и в частотной. Поверхностные плазмоны могут быть описаны макроскопической электромагнитной теорией (уравнениями Максвелла) на оптических частотах [1]. Поэтому целью практически всех численных методов является решение уравнений Максвелла. Решение этих уравнений может быть выполнено путем их обработки в интегральной или дифференциальной форме. В настоящей работе были исследованы два метода: основанный на теории Ми и метод конечных разностей во времени (FDTD-метод).

### МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

В настоящей работе методами компьютерного моделирования в сравнении с результатами экспериментальных исследований исследован

плазмонный резонанс в коллоидных растворах золота и серебра. В частности, проводились экспериментальные измерения и моделирование спектральных зависимостей оптического поглощения.

Для экспериментальных исследований были использованы стандартные сертифицированные образцы коллоидных растворов, полученные от фирмы Micronanosperes. Размеры наночастиц и их объемная плотность составляли соответственно для золота – 50 нм и  $4,5 \cdot 10^{10} \text{ м}^{-3}$ , а для серебра – 20 нм и  $2,5 \cdot 10^9 \text{ м}^{-3}$ . Оптические спектры экстинкции измеряли в спектральном диапазоне 300–800 нм с использованием спектрометра Metertech SP-8001. Размер наночастиц, их фазовый состав и морфологическое строение исследовались с помощью методов просвечивающей электронной микроскопии и электронной дифракции. Для исследований использовался прибор Hitachi H800.

Численное моделирование в рамках теории Ми проводили с использованием программы Nanosphere Optics Lab Field Simulator [3]. Эта программа имеет закрытый исходный код и представляет собой Java-апплет. Расчеты проводили в диапазоне длин волн от 300 до 800 нм. Для FDTD-метода применяли программу FDTD Solution [4]. Она также имеет закрытый исходный код и представляет собой программный продукт, позволяющий решать ряд задач, связанных с моделированием наноразмерных объектов и их свойств.

Для моделирования использовались граничные условия типа PML (Perfectly Matched Layer). В процессе моделирования также была использована сетка с шагом в 1 нм. В качестве источника света использовалась нормально падающая плоская волна с  $\lambda=300\text{-}900$  нм.

## ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Методами оптической спектрометрии проведены исследования коллоидных растворов. На рисунке 1 и 2 представлены спектры экстинкции коллоидных растворов золота и серебра (кривые 3 и 1 соответственно). При анализе спектров были учтены максимум пика ППР и ширина пика ППР на полувысоте. Видно, что спектры содержат пики плазмонного резонанса на длине волны 520 и 354 нм с шириной пика на полувысоте 43 и 79 нм (для золота и серебра соответственно). Это хорошо согласуется с данными других авторов [1] для аналогичных растворов с близкими параметрами.

На рисунках 1 и 2 приведены также спектры поглощения, рассчитанные методами Ми (кривые 1 и 3) а также методом FDTD (кривые 2 и 2). Из сравнения спектров следует, что все методы достаточно точно аппроксимируют экспериментальные данные. Однако, сравнивая два метода моделирования, можно отметить, что более простой метод, основанный на теории Ми, немного точнее, особенно для вычисления ширины ППР у золота. Большое расхождение спектров коллоидных растворов

золота в коротковолновой области может быть связано с использованием пластиковых кювет.

Хорошая корреляция экспериментальных данных с теоретическими, объясняется также небольшим разбросом размеров наночастиц золота в растворе (рис. 2б). Также на экспериментальном спектре в районе длин волн 650 – 900 нм наблюдается несколько пиков, меньших по амплитуде, чем основной. Их наличие можно объяснить выпадением осадка, а также появлением примесей в растворе.

Для коллоидного раствора серебра теория Ми аппроксимировала экспериментальные значения лучше, но только в области максимума плазмонного пика. С помощью FDTD-метода получились значения ширины пика ППР на полувысоте, хорошо коррелирующие с экспериментальными данными.

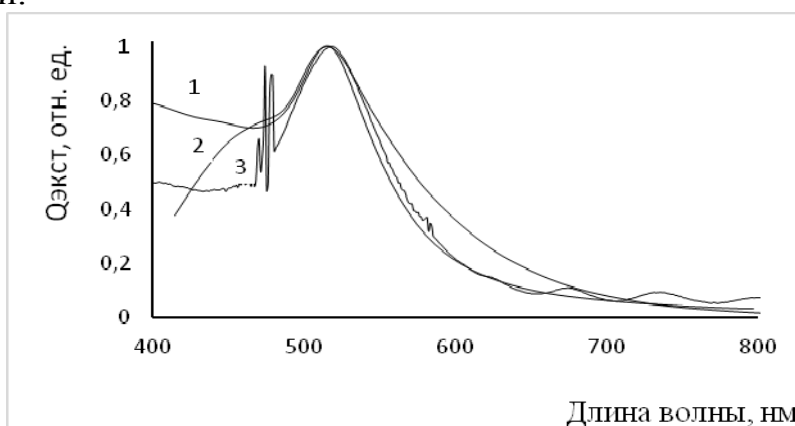


Рис. 1. Спектры экстинкции коллоидного раствора золота с размером частиц 50 нм:  
1 – теория Ми, 2 – FDTD-метод, 3 – экспериментальные данные

В растворе серебра наблюдался большой разброс размеров НЧ (рисунок 3а). Вероятно, именно это повлияло на ширину плазмонного пика, так как для коллоидных растворов серебра характерен резкий и узкий пик [2].

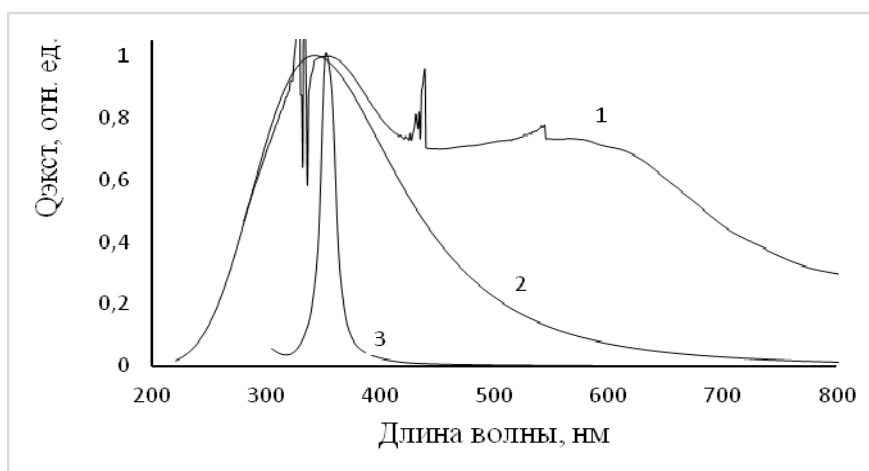


Рис. 2. Спектры экстинкции коллоидного раствора серебра с размером частиц 20 нм:  
1 – экспериментальные данные, 2 – FDTD-метод, 3 – теория Ми

Также можно заметить появление дополнительного пика меньшей эффективности на длине волны 600 нм. Это можно объяснить образованием в растворе кластеров наночастиц. Поскольку при моделировании они не учитывались, появились такие расхождения экспериментальных данных с теоретическими в длинноволновой области.

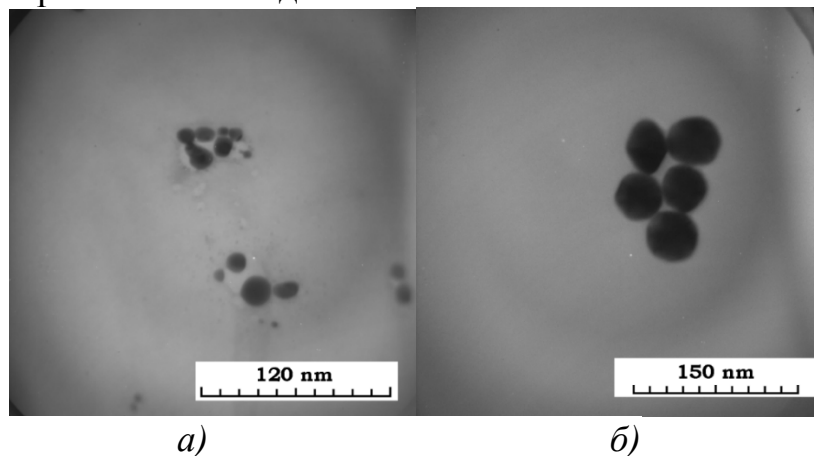


Рис. 3.. Светлопольные микрофотографии наночастиц золота (а) и серебра (б), полученные с помощью просвечивающего электронного микроскопа

Исходя из полученных результатов, можно сделать вывод: теория Ми лучше аппроксимировала экспериментальные данные для исследованных растворов. Это можно объяснить тем, что для частиц, с формой близкой к сферической, теория Ми представляет собой точное решение задачи о дифракции плоской волны, а метод конечных разностей во времени – решение приближенное.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При компьютерном моделировании локализованных плазмонов в простых структурах предпочтительнее пользоваться более простым в реализации и менее затратным по времени методом (Теория Ми), так как полученные результаты показали весьма незначительные расхождения.

## Литература

1. Климов В. В., Наноплазмоника. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. – 480с.
2. S. A. Maier, Plasmonics: Fundamentals and Applications// Springer, 2007.
3. Lumerical FDTD Solutions <http://www.lumerical.com/>
4. T. Baudilio, T. Tyler, A. Logan, C. S. George, Nanosphere Optics Lab Field Simulator // 2014.