

УДК 535.36

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЗОЛОТЫХ НАНОДИСКОВ С ДВУМЯ ОТВЕРСТИЯМИ

А.С. Аференок<sup>1,2</sup>, Т.И. Шабатина<sup>1,2</sup>, В.Е. Боченков<sup>2\*</sup>

(<sup>1</sup> Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, факультет радиоэлектроники и лазерной техники; <sup>2</sup> Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет; e-mail: boch@kinet.chem.msu.ru)

Проведено численное моделирование локализованных плазмонных резонансов для эллиптического золотого нанодиска размером 300×400 нм и толщиной 20 нм с двумя цилиндрическими отверстиями диаметром 140 нм. Изучены плазмонные моды, возбуждаемые светом с продольной и поперечной поляризацией. Установлено, что чувствительность длины волн дипольной моды к изменению диэлектрической проницаемости среды выше при продольной поляризации и достигает значений порядка 1800 нм/RIU.

**Ключевые слова:** плазмоники, оптические биосенсоры, наноструктуры, компьютерное моделирование.

Наночастицы благородных металлов обладают уникальными оптическими свойствами, благодаря чему материалы на их основе могут найти применение в разных областях науки и технологий: от оптических приборов и микроэлектроники до фотокатализаторов, биомедицинских препаратов и биосенсоров. Эти свойства обусловлены возможностью возбуждения локализованного поверхностно-плазмонного резонанса (ППР) – коллективных осцилляций электронной плотности на границе металл–диэлектрик, сопровождающихся поглощением и рассеянием света определенной длины волны [1, 2].

В настоящее время основная часть промышленных оптических биосенсоров, основанных на явлении поверхностного плазмонного резонанса, представляет собой тонкий слой золота, нанесенного на стеклянную поверхность [3]. При определенном угле падения и длине волны падающего света в такой системе может произойти возбуждение распространяющихся по поверхности пленки волн электронной плотности (плазмон-поляритонов). При изменении диэлектрической проницаемости среды вблизи поверхности золота в результате адсорбции биомолекул изменяются условия резонанса. Регистрируемыми параметрами могут быть резонансная частота возбуждающего света при фиксированном угле падения луча или резонансный угол падения луча при фиксированной частоте, а также амплитуда или фаза света. Первые два типа ППР-детектирования называют спектроскопией поверхностных

плазмонов с частотными и угловыми спектрами соответственно [3].

В последние годы идет активная разработка чувствительных наносистем на основе наночастиц благородных металлов. В отличие от сплошных металлических слоев, в данных системах под действием света возбуждается локализованный плазмонный резонанс – осцилляции заряда, ограниченные поверхностью наночастицы. Чувствительность ППР к локальному изменению диэлектрической проницаемости определяется тем, насколько велико вызванное колебаниями электронной плотности электрическое поле и насколько сильно оно локализовано вблизи металлической поверхности. В целях оптимизации данных параметров широко исследуются наночастицы разной формы, в том числе наностержни, нанобипирамиды и нанокольца [4].

Сравнение чувствительности ППР наночастиц золота разной формы приведено в таблице. Так, чувствительность ППР наночастиц в форме сфер и кубов оказывается ниже, чем у наночастиц в форме колец и бипирамид. ППР наночастиц разных форм и размеров различаются. Так, при сравнении наночастиц золота в форме сферы, куба, блока, стержня и бипирамиды худшие результаты ППР-детекции получены для наносфер и нанокубов. Наилучшие показатели получены для наночастиц в форме колец [4].

В настоящей работе выполнено теоретическое исследование чувствительности локализованного поверхностного плазмонного резонанса

**Размеры, длина волны плазмонов и чувствительность различных наночастиц золота к изменению показателя преломления [4]**

Наночастицы	Длина, нм	Диаметр, нм	Длина волны плазмонного резонанса, нм	Чувствительность, нм/RIU
Наносферы		15	527	44
Нанокубы	44		538	83
Наноцилиндры	80		1141	703
Наностержни	40	17	653	195
Наностержни	55	16	728	224
Наностержни	74	17	846	288
Нанобипирамиды	27	19	645	150
Нанобипирамиды	50	18	735	212
Нанобипирамиды	103	26	886	392
Нанобипирамиды	189	40	1096	540
Нанокольца	–	150	1400	800

в наночастицах золота с формой эллиптического диска с двумя отверстиями.

**Методика численных экспериментов**

Проведено теоретическое моделирование спектров пропускания наночастиц в форме диска с двумя отверстиями методом конечных разностей во временной области с помощью программы FDTD Solutions (Lumerical). [5] Моделируемая система представляла собой эллиптический диск ( $h = 20$  нм,  $D1 = 300$  нм,  $D2 = 400$  нм) с двумя цилиндрическими отверстиями диаметром  $d = 140$  нм, как представлено на рис. 1.

Для золота использовали приближенную диэлектрическую функцию, построенную на осно-

ве экспериментальных данных [6], для остальной области применяли постоянный показатель преломления. В области наночастиц использовали сетку с пространственной дискретизацией 2 нм. Для ограничения размера моделируемой системы в качестве граничных условий использовали идеально согласованные слои (perfectly matched layers, PML). Спектры пропускания получали путем определения количества энергии, проходящей через поверхность заданной площади после взаимодействия со структурой.

**Результаты и обсуждение**

На рис. 2, 3 представлены рассчитанные спектры пропускания исследованных наночастиц для продольной и поперечной поляризации

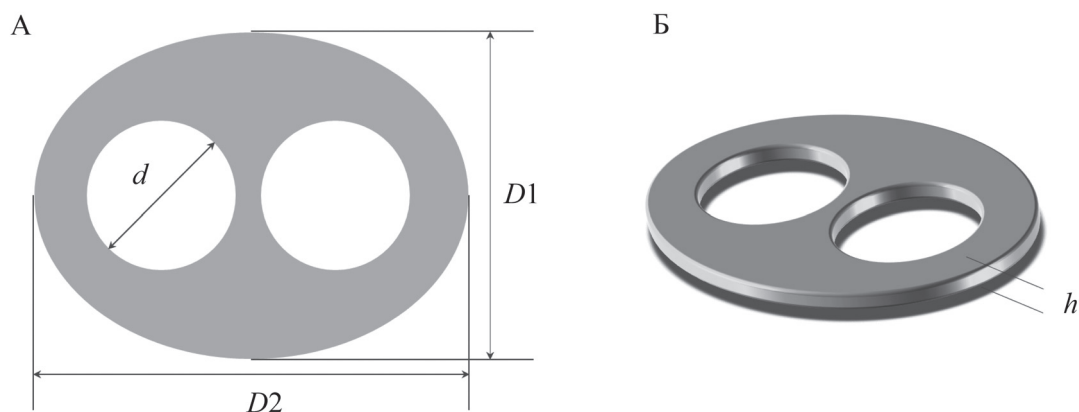


Рис. 1. Моделируемая система

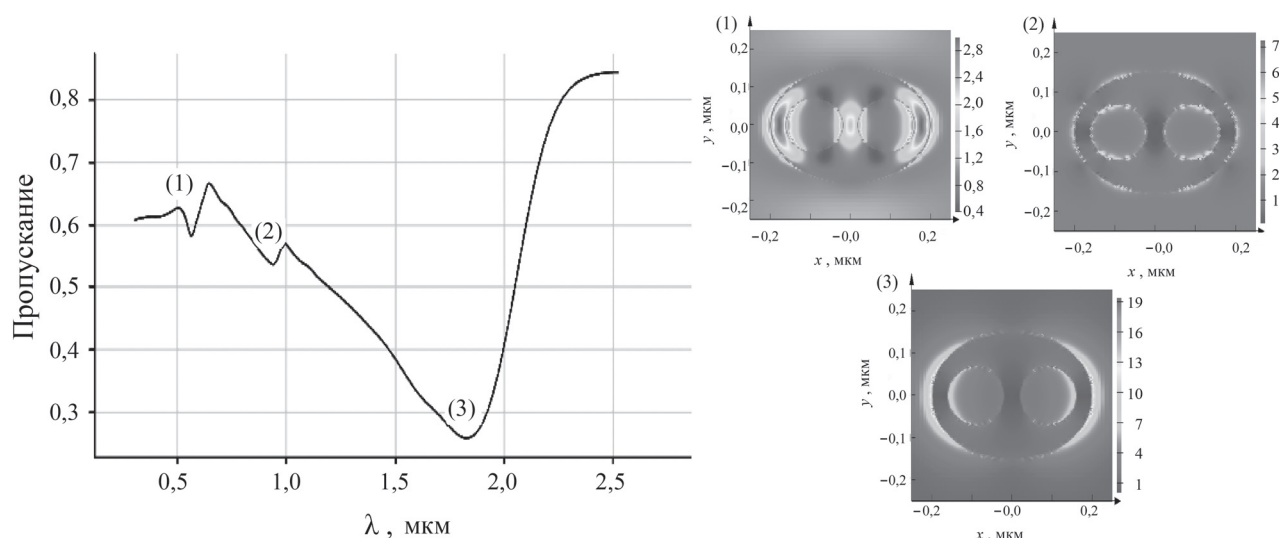


Рис. 2. Рассчитанный спектр плазмонного резонанса для продольной поляризации с распределениями электрического поля для мод (1), (2) и (3)

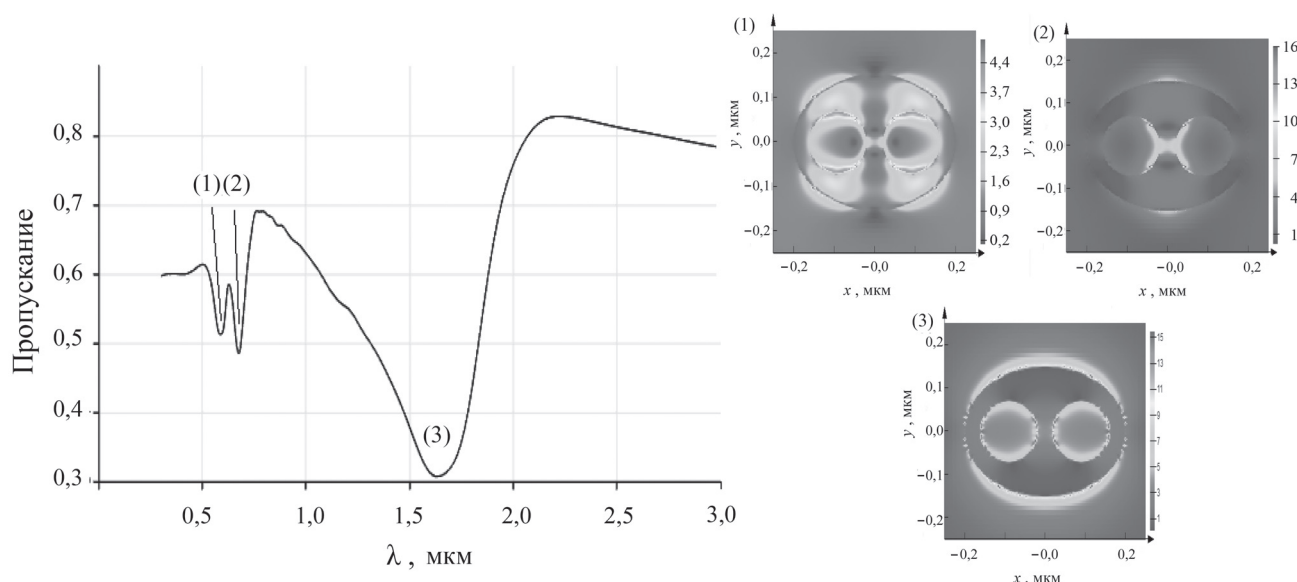


Рис. 3. Рассчитанный спектр плазмонного резонанса для поперечной поляризации с распределениями электрического поля для мод (1), (2) и (3)

возбуждающей электромагнитной волны. На спектрах видны три основные полосы, отвечающие трем плазмонным модам. Рядом со спектром приведены распределения электрического поля  $|E|/|E_0|$  вблизи частицы для мод (1), (2) и (3) соответственно. Наиболее интенсивная полоса (3) в спектрах отвечает длинноволновой плазмонной моде, имеющей дипольный характер. При этом основное усиление поля наблюдается вблизи внешней границы наночастицы и достигает значений 19 для продольной и 15 для поперечной поляризации возбуждающей волны. Более коротковолновые полосы в спектрах от-

вечают гибридным плазмонным модам цилиндрических отверстий с модами нанодиска более высокого порядка.

Для оценки чувствительности наночастиц данной формы было проведено моделирование сдвигов спектральных полос в зависимости от коэффициента преломления среды в диапазоне 1,33–1,48. Результаты для продольной и поперечной поляризации представлены на рис. 4.

При разных коэффициентах преломления был произведен расчет теоретических значений чувствительности в зависимости от сдвига длины волны.

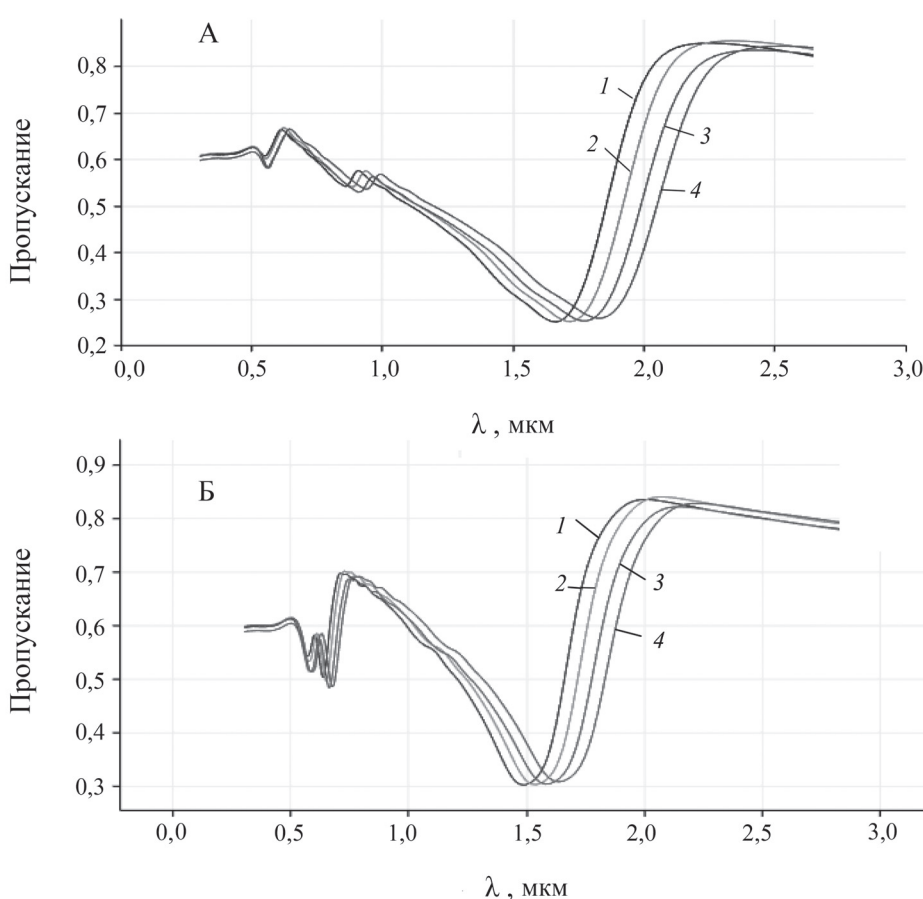


Рис. 4. Спектры пропускания в зависимости от коэффициента преломления (1 – 1,33; 2 – 1,38; 3 – 1,43; 4 – 1,48) для продольной (А) и поперечной (Б) поляризации света

Для продольной поляризации:

$$1,33 - 1,38 : S = \frac{(1,78002 - 1,68962)}{(1,38 - 1,33)} \times 1000 = 1808.$$

Для поперечной поляризации:

$$1,33 - 1,38 : S = \frac{(1,53381 - 1,47925)}{(1,38 - 1,33)} \times 1000 = 1091.$$

Полученные значения чувствительности превышают чувствительность ранее изученных наноструктур другой формы (таблица), что свидетельствует о перспективности их использования для биосенсорных приложений. В дальнейшей работе планируется изучить влияние размера и положения отверстий в диске на его оптические свойства а также провести экспериментальное получение и изучение наночастиц данной формы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Goettmann F., Daniel M.C., Quinn B.M. // New Journal of Chemistry. 2006. Vol. 30. N 8. P. 1121.  
 2. Martin C.R. // Science. 1994. Vol. 266. C. 1961.

**Заключение**

Результаты проведенного моделирования свидетельствуют о том, что при возбуждении локализованного поверхностного плазмонного резонанса в наночастицах с формой нанодиска размером 300×400 нм, имеющего два отверстия диаметром 140 нм, наблюдаются области с высоким локальным полем. Локализацией областей можно управлять путем изменения поляризации и длины волны. На основании теоретических расчетов чувствительности можно утверждать, что плазмонные нанодиски с двумя отверстиями для биосенсорных приложений эффективнее по сравнению с наночастицами других геометрических форм. (1808 нм/RIU и 1091 нм/RIU).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-03-00730).

Конфликта интересов нет.

3. Surface Plasmon Resonance Based Sensors, ed. by J. Homola // Springer, Berlin, Heidelberg, 2006.

4. *Chen H., Kou X., Yang Z., Ni W., Wang J.* // *Langmuir*. 2008. Vol. 24. P. 5233.
5. Lumerical Inc. [Электронный ресурс] : <http://www.lumerical.com/tcad-products/fdtd/>

6. *Johnson P.B., Christy R.W.* // *Phys. Rev. B*. 1972. Vol. 6. N 12. С. 4370.

Поступила в редакцию 01.02.2019  
Получена после доработки 26.02.2019  
Принята к публикации 12.03.2019

## MODELING THE OPTICAL PROPERTIES OF GOLD NANODISKS WITH TWO HOLES

A.S. Aferenok<sup>1,2</sup>, T.I. Shabatina<sup>1,2</sup>, V.E. Bochenkov<sup>2</sup>

(<sup>1</sup> *Moscow State Technicahl University. N.E. Bauman, Faculty of Radioelectronics and Laser Engineering*; <sup>2</sup> *Moscow State University. M.V. Lomonosov, Faculty of Chemistry, Department of Chemical Kinetics*; e-mail: [boch@kinet.chem.msu.ru](mailto:boch@kinet.chem.msu.ru))

**Localized surface plasmon resonances in gold nanodisk of 300x400 nm, 20 nm thick and with two 140 nm holes have been investigated by numerical modeling. The modes excited by longitudinal and transverse-polarized light, are observed. The refractive index sensitivity of low-energy dipolar mode is higher for longitudinal light polarization and reaches values of 1800 nm/RIU.**

**Key words:** plasmonics, optical biosensors, nanostructures, computer simulation of nanostructures.

**Сведения об авторах:** *Аференок Александр Сергеевич* – инженер кафедры химической кинетики химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова ([alexaferenok@gmail.com](mailto:alexaferenok@gmail.com)); *Шабатина Татьяна Игоревна* – вед. науч. сотр. кафедры химической кинетики химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, докт. хим. наук ([tatyana-shabatina@yandex.ru](mailto:tatyana-shabatina@yandex.ru)); *Боченков Владимир Евгеньевич* – вед. науч. сотр. кафедры химической кинетики химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, канд. физ.-матем. наук ([boch@kinet.chem.msu.ru](mailto:boch@kinet.chem.msu.ru)).