

УДК 535.36

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ДИМЕРОВ ЗОЛОТЫХ НАНОЧАСТИЦ ИСКАЖЕННОЙ ТРЕУГОЛЬНОЙ ФОРМЫ

Е.М. Лобанова<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)

С помощью компьютерного моделирования исследованы свойства наноструктуры типа «галстук-бабочка», образованной парой наночастиц с формой криволинейных треугольных призм. Показано, что усиление электромагнитного поля при возбуждении продольной моды поверхностно-плазмонного резонанса локализовано в зазоре между частицами и достигает значения  $|E|/|E_0| = 58$ .

**Ключевые слова:** плазмоника, поверхностный плазмонный резонанс, наноструктуры, коллоидная литография, компьютерное моделирование.

Наночастицы (НЧ) благородных металлов, таких как золото и серебро, в настоящее время стали объектом интенсивного изучения. Их применяют в различных областях науки и технологии, например в спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния, для фототермической терапии злокачественных опухолей, в фотокатализе, при создании новых материалов с уникальными оптическими свойствами и т.д. В первую очередь особые свойства подобных частиц обусловлены многократным локальным усилением электромагнитного поля при возбуждении поверхностно-плазмонного резонанса. Частотой плазмонного резонанса и степенью усиления электрического поля можно управлять с помощью изменения размера и формы НЧ [1]. Наноструктуры сложной формы позволяют локализовать высокое электромагнитное поле в заданных областях путем возбуждения определенных плазмонных мод. При этом большей степени усиления электромагнитного поля удастся достичь вблизи поверхности с высокой кривизной, а также в наноразмерных зазорах между частицами.

Пример одного из наиболее успешных применений данного эффекта – спектроскопия гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) света (Surface-enhanced Raman spectroscopy, SERS) [2]. Благодаря усилению локального поля при использовании подходящих субстратов метод ГКР позволяет достигать усиления сигнала комбинационного рассеяния в  $10^{10}$ – $10^{14}$  раз [3]. Субстраты ГКР представляют собой металлические наночастицы, нанесенные на диэлектрические подлож-

ки. Наиболее часто используют частицы серебра и золота, проводятся также исследования с применением других металлов, таких как медь, платина и палладий [4].

Ранее было показано, что сильная локализация поля при возбуждении поверхностно-плазмонного резонанса может наблюдаться в зазоре между частицами для наноструктур типа «галстук-бабочка». При этом важную роль играют структурные особенности частиц, включая угол при вершине треугольников, расстояние между частицами и т.д. [5]. Экспериментально подобные наноструктуры обычно получают с помощью электронно-лучевой литографии или травления сфокусированным пучком ионов. К одному из перспективных способов формирования наночастиц металлов, нанесенных на подложки, относится метод коллоидной литографии с нанесением слоя резиста *in situ* [6], основанный на самоорганизации полимерных микросфер [7]. В настоящей работе изучены оптические свойства димеров золотых наночастиц треугольной формы, имеющих вогнутую поверхность боковых граней и выпуклую поверхность оснований. Такие димеры могут быть получены экспериментально с помощью вышеуказанного метода. Для оценки влияния формы НЧ на их оптические свойства проведено моделирование спектров поглощения и расчет величины усиления локального поля.

### Методика численных экспериментов

Компьютерное моделирование взаимодействия золотых наночастиц треугольной формы

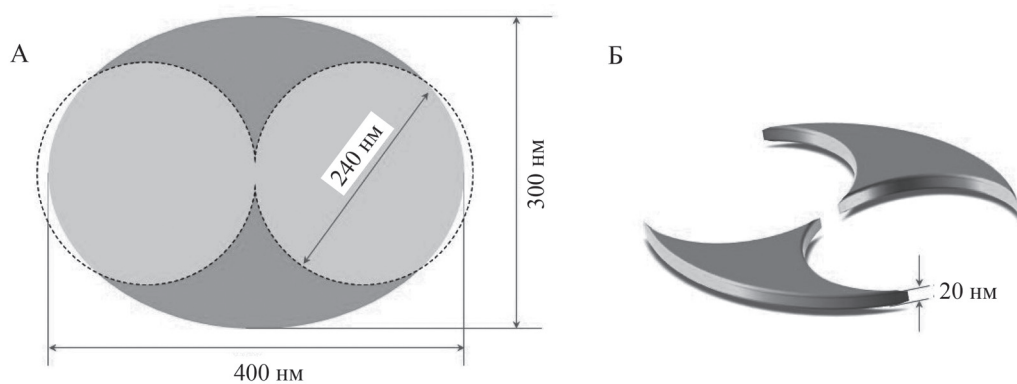


Рис. 1. Изученная структура: А – построение и размеры, Б – трехмерное изображение

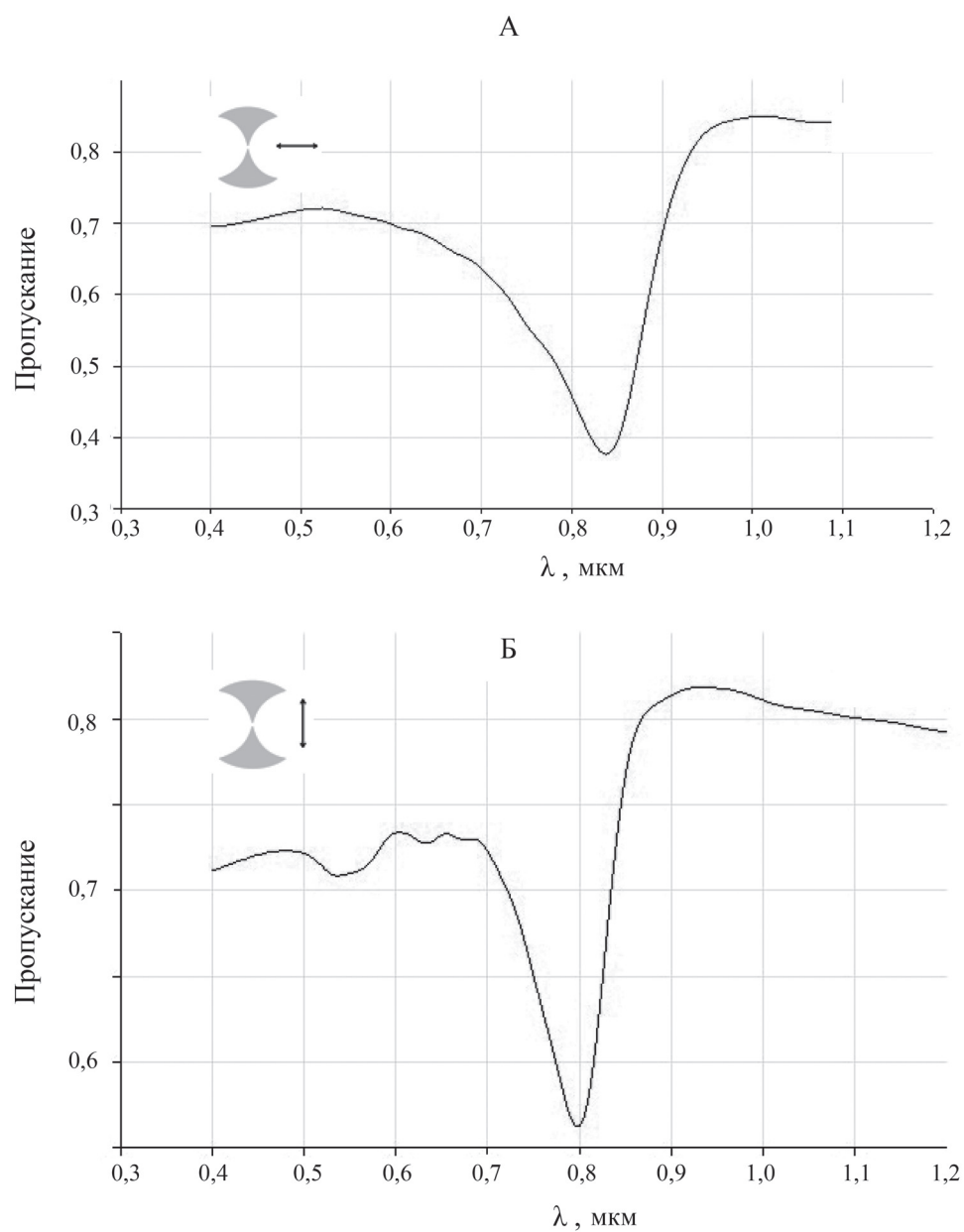


Рис. 2. Спектры пропускания при поперечной (А) и продольной (Б) поляризации света

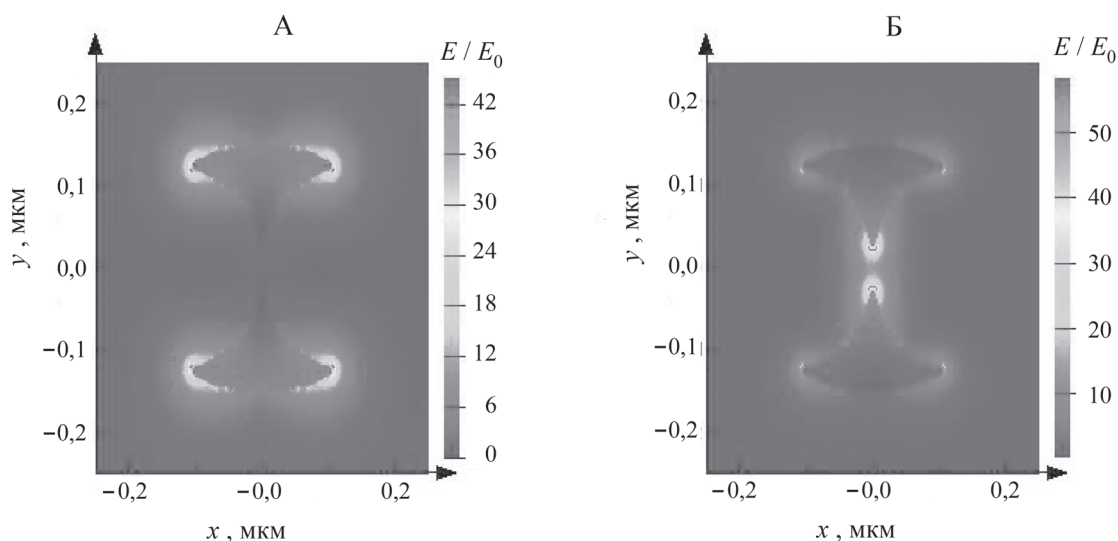


Рис. 3. Напряженность электрического поля при возбуждении плазмонного резонанса в случае поперечной (А) и продольной (В) поляризации света

с электромагнитной волной проводили методом конечных разностей во временной области (Finite-difference time domain, FDTD) с помощью программы Lumerical FDTD Solutions [8]. Данный метод основан на приближенном решении дифференциальных уравнений Максвелла. Моделируемая система представляла собой две одинаковые золотые наночастицы, ориентированные, как показано на рис. 1. Данная форма задавалась пересечением двух соприкасающихся цилиндров диаметром 240 нм с эллиптическим диском, длина, ширина и толщина которого составляла соответственно 400, 300 и 20 нм.

Для золота использовали приближенную диэлектрическую функцию, построенную на основе экспериментальных данных [9], для остальной области применяли постоянный показатель преломления  $n = 1$ . В области наночастиц использовали сетку с пространственной дискретизацией не хуже  $2,5 \times 2,5 \times 2,5$  нм. Для управления объемом моделирования 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 с наноструктурой.

### Результаты и обсуждение

На рис. 2 представлены рассчитанные спектры пропускания исследованных наночастиц для поперечной (рис. 2, а) и продольной (рис. 2, б) поляризации падающей волны. На спектрах вблизи 800–850 нм имеется полоса поглощения, отвеча-

ющая поверхностно-плазмонному резонансу для исследованной структуры.

На рис. 3 приведены карты пространственного распределения электрического поля при возбуждении поверхностно-плазмонного резонанса светом с поперечной и продольной поляризацией. При возбуждении поперечной моды области с усиленным полем локализованы вблизи углов противоположных сторон треугольных нанопризм, при этом максимальное усиление поля составляет порядка 40. При возбуждении продольной моды область с максимальным усилением поля локализована в зазоре между частицами, коэффициент усиления достигает 58. Порядок величины усиления локального поля соответствует результатам, полученным для аналогичных систем в других работах [10].

Следует отметить, что при экспериментальном получении данных структур на поверхности стекла можно ожидать проявления качественно таких же резонансов и величины локального усиления поля, однако соответствующие пики в спектрах экстинкции будут сдвинуты в более длинноволновую область спектра за счет повышения эффективного показателя преломления среды.

### Выводы

В работе с помощью численного моделирования исследованы оптические свойства наноструктур типа «галстук-бабочка», построенных из димеров золотых наночастиц искаженной треугольной формы. Показано, что значение усиления электромагнитного поля в зазоре между частицами достигает  $|E|/|E_0| = 58$ . Таким образом,

данные структуры могут быть использованы для приложений, в которых требуется усиление локального поля, в том числе в качестве субстрата при проведении спектроскопии ГКР.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 17-13-01276).

Конфликта интересов нет.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Bochenkov V.E., Sutherland D.S.* From Rings to Crescents: A Novel Fabrication Technique Uncovers the Transition Details / *Nano Letters*. 2013. P. 5.
2. *Зубова А.В., Суцинский М.М., Шувалов И.К.* Современные направления в спектроскопии комбинационного рассеяния света / *Успехи физических наук*. 1966. Т. 89. Вып. 1.
3. *Jeanmaire D.L., Van Duyne R.P.* // *Journal of Electroanalytical Chemistry and Interfacial Electrochemistry*. 1977. Vol. 84. N 1. P. 1.
4. *Duval Malinsky M., Kelly K.L., Schatz G.C., Van Duyne R.P.* // *J. Phys. Chem. B*. 2001. Vol. 105. N 12. P. 2343.
5. *Wei Ding et al.* // *J. Applied Physics*. 2010. Vol. 108. P. 124314.
6. *Bochenkov V.E.* // *AIP Conf. Proc.* 1874. 030004. 2017.
7. *Per Hanarp, Duncan S. Sutherland, Julie Gold, Bengt Kasemo* // *Colloids and Surfaces A: Physicochem.* 2002. P. 14.
8. Lumerical Inc. URL: <http://www.lumerical.com/tcad-products/fdtd>.
9. *Johnson P.B., Christy R.W.* // *Phys. Rev. B*. 1972. Vol. 6. N 12. P. 4370.
10. *Stephanie Dodson, Mohamed Haggui, Renaud Bachelot, Jérôme Plain, Shuzhou Li, Qihua Xiong* // *J. Phys. Chem. Lett.* 2013. Vol. 4. P. 496.

Поступила в редакцию 01.02.2019

Получена после доработки 26.02.2019

Принята к публикации 12.03.2019

## COMPUTER SIMULATIONS OF OPTICAL PROPERTIES OF TRIANGULAR GOLD NANOPARTICLE DIMERS

**E.M. Lobanova<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*)

**In this paper the properties of a “bowtie” nanostructure formed by a pair of distorted triangular nanoparticles are investigated using computer simulation. It is shown that the the electromagnetic field enhancement upon excitation of the longitudinal surface plasmon resonance mode is localized in the gap between the particles and reaches the value  $|E|/|E_0| = 58$ .**

**Key words:** plasmonics, nanostructures, colloidal lithography, computer simulation.

**Сведения об авторах:** *Лобанова Екатерина Михайловна* – инженер кафедры химической кинетики химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова ([katerinla95@gmail.com](mailto:katerinla95@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)).