ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2019, том 59, № 12, с. 2175–2184

УДК 519.958:535.42

МЕТОД ДИСКРЕТНЫХ ИСТОЧНИКОВ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЛИЯНИЯ НЕЛОКАЛЬНОСТИ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ РЕЗОНАТОРОВ ПЛАЗМОННОГО НАНОЛАЗЕРА

© 2019 г. Ю. А. Еремин[1,*], А. Г. Свешников[1]

([1] 119991 Москва, Ленинские горы, МГУ им. М.В. Ломоносова, факультет ВМК, Россия)

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

Поступила в редакцию 06.05.2019 г.
Переработанный вариант 06.05.2019 г.
Принята к публикации 05.08.2019 г.

Метод дискретных источников обобщается на случай исследования влияния эффекта нелокальности в слоистых частицах, расположенных на подложке. Подробно изложена схема построения приближенного решения и вычислительный алгоритм. Развитый подход применяется к исследованию оптических характеристик 3D резонаторов плазмонного нанолазера. Установлено, что учет эффекта нелокальности приводит к существенному снижению амплитуды плазмонного резонанса и коэффициента усиления интенсивности ближнего поля. Показано, что за счет изменения материала и толщины оболочки резонатора, а также изменения направления внешнего излучения возможно обеспечить увеличение коэффициента усиления более чем в 2 раза. Библ. 30. Фиг. 4.

Ключевые слова: метод дискретных источников, наноплазмоника, квантовый эффект нелокальности, плазмонный нанолазер (SPASER).

DOI: 10.1134/S0044466919100065

1. ВВЕДЕНИЕ

Плазмоны позволяют концентрировать электромагнитные поля в субнанометровом объеме, размеры которого далеко превосходят дифракционный предел оптической дифракции. Поверхностные плазмоны, которые являются следствием гибридизации между поверхностными зарядами и электромагнитными полями, инициировали появление предмета плазмоники как независимой части нанофотоники [1], [2]. Благодаря плазмонным эффектам стало возможным получать сверхвысокое усиление поля и его концентрацию в объемах, существенно превышающих релеевский предел разрешающей способности оптического оборудования [3]. В результате появился широкий спектр практических приложений, таких как наноразмерные фотонные схемы, оптические усилители, спектроскопия комбинационного рассеяния света и биосенсоринг [4], [5]. Позже, когда размер элементов плазмонных структур еще больше уменьшился, классические описания поведения электромагнитного поля стали недостаточными, и проявились квантово-механические эффекты, такие как эффект нелокальности и туннельный эффект [6]. Сегодня квантовая плазмоника создает много новых возможностей в расширении границ фундаментальной науки и прикладной квантовой технологии [7].

Фундаментальной научной проблемой в рамках квантовой плазмоники является проблема разработки и реализации наноразмерных источников когерентного излучения. Идея состоит в том, чтобы использовать плазмонные поля вместо фотонных, используемых в обычных лазерах. Дело в том, что плазмонные поля позволяют преодолеть дифракционное ограничение размера лазера. Плазмонный нанолазер называется: SPASER (Surface Plasmon Amplification by Simulated Emission of Radiation) [8]–[10]. Концепция спасера была впервые предложена Стокманом и Бергманом в 2003 г. (см. [11]). Одна из возможных реализаций спасера состоит из наночастиц благородного металла, выступающих в роли нанорезонаторов, заключенных в усиливающую среду [12]. В первой экспериментальной реализации спасера использовалась наноструктура ядро-оболочка, состоящая из золотой наносферы диаметром $D = 14$ нм со сферической оболочкой из SiO_2 с внешним диаметром 44 нм [13]. До настоящего времени ведутся многочисленные исследования, посвященные разработке различных перспективных схем плазмонных нанолазеров (см. [7], [10]).

Ключевым элементом плазмонного нанолазера является резонатор, который представляет собой совокупность металлических и диэлектрических наноструктур, усиливающих внешнее возбуждение. 3D резонатор спасера функционирует на основе локализованных поверхностных плазмонов, а в качестве его окружения используется усиливающий материал. Существуют две наиболее используемые конфигурации 3D резонатора. Конфигурация двухслойной частицы из благородного металла с усиливающей средой, непосредственно внедренной в оболочку, и плазмонной наночастицы с диэлектрической оболочкой, помещенной в усиливающую среду [9], [13]. Особенностью подобного нанорезонатора является усиление поля непосредственно у его внешней оболочки относительно внешнего возбуждающего поля. Следует отметить, что слоистые сферические наночастицы, так называемые “наноматрешки”, в настоящее время широко используются в многочисленных практических приложениях [14]–[16].

Дальнейший прогресс в области плазмоники ведет к тому, что размер элементов плазмонных структур переходит на наноразмерный уровень. В этом случае классическое описание полей в рамках теории Максвелла становится недостаточным, и начинают проявляться квантово-механические эффекты, такие как нелокальное экранирование и туннельные эффекты [7]. Рассмотрение этих квантовых эффектов обеспечивает критическое понимание фундаментальных границ локализации и усиления поля в наноплазмонике, а также установление правильного функционирования плазмонных нанорезонаторов. При этом используются как квазиклассические модели описания эффекта нелокальности [17]–[19], так и чисто квантовые, например функциональная теория плотности во временной области (TDDFT) [20]. Вместе с тем TDDFT, которая описывает коллективное движение электронов, моделируя поведение каждого электрона, хорошо подходит для объяснения экспериментальных результатов для размеров частиц, всего в несколько нанометров. В настоящее время квазиклассические модели для описания квантовых эффектов в наноплазмонике являются наиболее востребованными, так как позволяют правильно описывать поведение оптических характеристик частиц диаметрами менее 10–20 нм [21].

В настоящей работе метод дискретных источников (МДИ) [22] обобщается для исследования влияния эффекта нелокальности, в рамках модели обобщенного нелокального отклика (Generalized Non-local Optical Response – GNOR) [18] на характеристики 3D резонаторов спасера. Рассматривается полностью адекватная модель, использованная Ногиновым и соавторами в первой экспериментальной реализации спасера [13], а именно слоистый резонатор, состоящий из золотой частицы, покрытой слоем прозрачного диэлектрика, расположенной на прозрачной подложке и помещенной в активную среду [13], [23]. Анализируется влияние учета обобщенного эффекта нелокальности (ЭН) как на характеристики рассеяния, так и ближние поля. Отметим, что ранее модель ЭН уже использовалась авторами при рассмотрении однородных частиц, в том числе и в присутствии подложки [24], [25].

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ, МЕТОД ДИСКРЕТНЫХ ИСТОЧНИКОВ

Пусть все пространство $\mathbb{R}^3$ разделено на два полупространства: верхнее – $D_0:\ (z>0)$, вмещающее активную среду и область подложки – $D_1:\ (z<0)$. Обозначим через $\Sigma:\ (z=0)$ плоскую границу раздела. Пусть слоистая осесимметричная частица, ось симметрии которой совпадает с осью $0z$, целиком расположена в D_0. Плазмонное ядро будем обозначать как D_i, с гладкой границей $\partial D_i \subset C^{(2,\nu)}$, а внешнюю оболочку – D_s с внешней поверхностью $\partial D_s \subset C^{(2,\nu)}$. Пусть $\{\mathbf{E}^0,\mathbf{H}^0\}$ – поле плоской электромагнитной волны линейной поляризации, распространяющейся под углом $\pi-\theta_0$ относительно нормали к подложке D_1, совпадающей с осью $0z$. В этом случае рассматриваемая геометрическая структура: слоистая частица-подложка обладает осевой симметрией. Математическая постановка подобной задачи рассеяния с учетом ЭН может быть записана в следующем виде:

$$\operatorname{rot}\mathbf{H}_\zeta = jk\varepsilon_\zeta\mathbf{E}_\zeta,\quad \operatorname{rot}\mathbf{E}_\zeta = -jk\mu_\zeta\mathbf{H}_\zeta \quad \text{в} \quad D_\zeta,\quad \zeta = 0,1,i,s,$$

$$\operatorname{rot}\mathbf{H}_i = jk(\varepsilon_i + \eta^2\nabla\operatorname{div})\mathbf{E}_i(M),\quad \operatorname{rot}\mathbf{E}_i = -jk\mu_i\mathbf{H}_i \quad \text{в} \quad D_i,$$

$$\begin{gathered}\mathbf{n}_i \times (\mathbf{E}_i(P) - \mathbf{E}_s(P)) = 0, \\ \mathbf{n}_i \times (\mathbf{H}_i(P) - \mathbf{H}_s(P)) = 0, \quad P \in \partial D_i; \\ \varepsilon_L \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{E}_i(P) = \varepsilon_s \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{E}_s(P),\end{gathered} \qquad \begin{gathered}\mathbf{n}_s \times (\mathbf{E}_s(Q) - \mathbf{E}_0(Q)) = \mathbf{n}_s \times \mathbf{E}^0(Q), \\ \mathbf{n}_s \times (\mathbf{H}_s(Q) - \mathbf{H}_0(Q)) = \mathbf{n}_s \times \mathbf{H}^0(Q), \quad Q \in \partial D_s,\end{gathered}$$

$$\begin{gathered}\mathbf{e}_z \times (\mathbf{E}_0^t(M) - \mathbf{E}_1^t(M)) = 0, \\ \mathbf{e}_z \times (\mathbf{H}_0^t(M) - \mathbf{H}_1^t(M)) = 0, \quad M \in \Sigma, \\ \lim_{r\to\infty} r \cdot \left(\mathbf{H}_\xi \times \frac{\mathbf{r}}{r} - \mathbf{E}_\xi\right) = 0, \quad r = |M| \to \infty, \quad \xi = 0,1, \quad z \neq 0, \\ \max(|\mathbf{H}_\xi|, |\mathbf{E}_\xi|) = O(\rho^{-1/2}), \quad \rho = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \rho \to \infty, \quad z = \pm 0.\end{gathered} \tag{1}$$

Здесь $\{\mathbf{E}_{0,1}, \mathbf{H}_{0,1}\}$ – рассеянное, а $\{\mathbf{E}_{0,1}^t, \mathbf{H}_{0,1}^t\}$ – полное поле в $D_{0,1}$ соответственно, $\{\mathbf{E}_i, \mathbf{H}_i\}$ – поле внутри частицы, включающее поперечное (T) и продольное (L) поля $\mathbf{E}_i = \mathbf{E}_T + \mathbf{E}_L$, $\operatorname{div}\mathbf{E}_T = 0$, $\operatorname{rot}\mathbf{E}_L = 0$, $\{\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s\}$ – поле внутри оболочки, $\mathbf{n}_{i,s}$ – единичные нормали к поверхностям $\partial D_{i,s}$, $\mathbf{e}_z$ – нормаль в поверхности подложки, $k = \omega/c$, а характеристики среды выбраны таким образом, что $\operatorname{Im}\{\varepsilon_{0,1,s}; \mu_{0,1,s}\} = 0$, $\operatorname{Im}\varepsilon_i, \mu_i \le 0$, $\operatorname{Im}\varepsilon_L \le 0$. Предполагается, что временная зависимость выбрана в виде $\exp\{j\omega t\}$. Параметры η и ε_L описывают компоненты внутреннего продольного поля $\mathbf{E}_L$. Следует отметить, что из формулировки задачи (1) непосредственно вытекает, что продольная компонента поля, во-первых, локализована строго внутри частицы, и, во-вторых, не вносит вклад в магнитное поле $\mathbf{H}_i$, так как $\operatorname{rot}(\nabla\Psi) = 0$. Условия излучения сформулированы таким образом, чтобы обеспечить обращение в нуль потока энергии на бесконечности для однородной задачи (1) [26]. В соответствии с законом сохранения энергии будем полагать, что поставленная граничная задача (1) имеет единственное классическое решение [27].

Будем строить приближенное решение задачи (1), руководствуясь базовой схемой МДИ [22]. Сначала решим задачу отражения и преломления поля плоской волны $\{\mathbf{E}^0, \mathbf{H}^0\}$ на границе раздела полупространств Σ. Поскольку частица располагается целиком в верхнем полупространстве – D_0, то суммарное поле падающей и отраженной волны обозначим через $\{\mathbf{E}_0^0, \mathbf{H}_0^0\}$. Введем следующие обозначения:

$$\psi_0^\pm = \exp\{-jk_0(x\sin\theta_0 \pm z\cos\theta_0)\}, \quad \mathbf{e}_0^\pm = (\mp\mathbf{e}_x\cos\theta_0 + \mathbf{e}_z\sin\theta_0);$$

здесь $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$, $\mathbf{e}_z$ – единичные векторы базиса декартовой системы координат. Тогда для случая P/S-поляризации плоской волны получим

$$\mathbf{E}_0^{0(P,S)} = \mathbf{E}_0^{P,S(-)} + R_{P,S} \cdot \mathbf{E}_0^{P,S(+)}; \quad \mathbf{H}_0^{0(P,S)} = \mathbf{H}_0^{P,S(-)} + R_{P,S} \cdot \mathbf{H}_0^{P,S(+)}, \tag{2}$$

где

$$\mathbf{E}_0^{P(\pm)} = \mathbf{e}_0^\pm\psi_0^\pm; \quad \mathbf{H}_0^{P(\pm)} = -\mathbf{e}_y n_0 \psi_0^\pm, \quad \mathbf{E}_0^{S(\pm)} = \mathbf{e}_y\psi_0^\pm; \quad \mathbf{H}_0^{S(\pm)} = \mathbf{e}_0^\pm n_0 \psi_0^\pm, \quad n_0 = \sqrt{\varepsilon_0\mu_0},$$

а $R_{P,S}$ – коэффициенты отражения Френеля [28]. Таким образом, внешнее возбуждение, удовлетворяющее условиям сопряжения на Σ (2), построено.

Будем строить приближенное решение задачи (1) для рассеянного поля в D_0, учитывая осевую симметрию и поляризацию [22]. Представим рассеянное поле вне слоистой частицы, в $D_{0,1}$, в виде конечной линейной комбинации полей распределенных диполей и мультиполей, поля которых аналитически удовлетворяют системе уравнений Максвелла в областях $D_{0,1}$, условиям излучения на бесконечности, а также условиям сопряжения для тангенциальных компонент рассеянного поля на поверхности подложки Σ. В основу конструкции положим фурье-компоненты тензора Грина полупространства, которые могут быть записаны в виде интегральных представлений Вейля-Зоммерфельда [25]:

$$G_m^{e,h}(\xi, z_0) = \int J_m(\lambda\rho) v_{11}^{e,h}(\lambda, z, z_0)\lambda^{1+m} d\lambda, \quad g_m^{e,h}(\xi, z_0) = \int J_m(\lambda\rho) v_{31}^{e,h}(\lambda, z, z_0)\lambda^{1+m} d\lambda; \tag{3}$$

здесь $J_m(.)$ – цилиндрическая функция Бесселя, точка $\xi = (\rho, z)$ располагается в полуплоскости $\varphi = \mathrm{const}$, а координаты мультиполей расположены вдоль оси симметрии $z_0 \in Oz$ строго внутри

$D_i \cup D_s$ или могут содержать дополнительный комплексный параметр [22]. Спектральные функции электрического и магнитного типов $v_{11}^{e,h}$, $v_{31}^{e,h}$, обеспечивающие выполнение условий сопряжения на плоскости $z = 0$, имеют следующий вид [25]:

$$\begin{gathered} v_{11}^{e,h}(\lambda, z, z_0) = \frac{\exp\{-\eta_0|z - z_0|\}}{\eta_0} + A_{11}^{e,h}(\lambda)\exp\{-\eta_0(z + z_0)\}, \quad z_0 > 0, \quad z \geq 0; \\ v_{31}^{e,h}(\lambda, z, z_0) = A_{31}^{e,h}(\lambda)\exp\{-\eta_0(z + z_0)\}, \quad z_0 > 0, \quad z \geq 0. \end{gathered} \tag{4}$$

Спектральные коэффициенты A, B определяются из условий при $z = 0$ в виде

$$A_{11}^{e,h}(\lambda, z_0) = \frac{\chi_0^{e,h} - \chi_1^{e,h}}{\chi_0^{e,h} + \chi_1^{e,h}}\frac{1}{\eta_0}; \quad A_{31}^{e,h}(\lambda, z_0) = \frac{2\delta}{(\chi_0^e + \chi_1^e)(\chi_0^h + \chi_1^h)},$$

здесь введены обозначения:

$$\eta_\zeta = \sqrt{\lambda^2 - k_\zeta^2}, \quad \chi_\zeta^e = \frac{\eta_\zeta}{\mu_\zeta}, \quad \chi_\zeta^h = \frac{\eta_\zeta}{\varepsilon_\zeta}, \quad \delta = \frac{1}{\varepsilon_0\mu_0} - \frac{1}{\varepsilon_1\mu_1}, \quad \zeta = 0,1.$$

Перейдем к построению приближенного решения, учитывающего как осевую симметрию, так и поляризацию внешнего возбуждения [22]. Для построения рассеянного поля в $D_{0,1}$ вне слоистой частицы (область e) введем в рассмотрение следующие векторные потенциалы [25], которые в цилиндрической системе координат (ρ, φ, z) принимают вид

$$\begin{gathered} \mathbf{A}_{mn}^{(e)e} = \{G_m^e(\xi, z_n^e)\cos(m+1)\varphi; -G_m^e(\xi, z_n^e)\sin(m+1)\varphi; -g_m^e(\xi, z_n^e)\cos(m+1)\varphi\}, \\ \mathbf{A}_{mn}^{(h)e} = \{G_m^h(\xi, z_n^e)\sin(m+1)\varphi; \mathrm{G}_m^h(\xi, z_n^e \cos(m+1)\varphi; -g_{m+1}^h(\xi, z_n^e)\sin(m+1)\varphi\}, \quad \mathbf{A}_{0n}^{(e)e} = \mathrm{G}_0^h(\xi, z_n^e)\mathbf{e}_z. \end{gathered} \tag{5}$$

Для построения поля внутри слоистой частицы будем использовать следующие потенциалы:

$$\begin{gathered} \mathbf{A}_{mn}^{(e)\nu} = Y_m^\nu(\xi, z_n^\nu)\cos[(m+1)\varphi]\mathbf{e}_\rho - Y_m^\nu(\xi, z_n^\nu)\sin[(m+1)\varphi]\mathbf{e}_\varphi, \quad \nu = i, s\pm, \\ \mathbf{A}_{mn}^{(h)\nu} = Y_m^\nu(\xi, z_n^\nu)\sin[(m+1)\varphi]\mathbf{e}_\rho + Y_m^\nu(\xi, z_n^\nu)[\cos(m+1)\varphi]\mathbf{e}_\rho, \quad \mathbf{A}_n^{(e)\nu} = Y_0^\nu(\xi, z_n^\nu)\mathbf{e}_z, \end{gathered} \tag{6}$$

где

$$Y_m^i(\xi, z_n^i) = j_m(k_i R_{\xi z_n^i})(\rho/R_{\xi z_n^i})^m,$$

$j_m(.)$ – сферическая функция Бесселя,

$$R_{\xi z_n}^2 = \rho^2 + (z - z_n)^2, \quad Y_m^{s\pm}(\xi, z_n^s) = h_m^{(2,1)}(k_s R_{\xi z_n^s})(\rho/R_{\xi z_n^s})^m,$$

$h_m^{(2,1)}(.)$ – сферические функции Ханкеля, соответствующие “уходящим” и “приходящим” волнам, $k_\alpha = k\sqrt{\varepsilon_\alpha\mu_\alpha}$, $\alpha = i, s$, z_n – координаты дискретных источников (ДИ).

Для учета ЭН и формирования приближенного решения для продольного поля $\mathbf{E}_L$ внутри частицы необходимо определить величины ε_L и η, входящие в формулировку задачи (1). В соответствии с [21] $\varepsilon_L = \varepsilon_i - \omega_p^2/(j\gamma\omega - \omega^2)$, где ω_p – плазменная частота для данного металла, γ – коэффициент затухания в металле. Скалярный потенциал, определяющий продольное поле, удовлетворяет уравнению Гельмгольца $(\Delta + k_L^2)\Psi(M) = 0$, а величина продольного волнового числа определяется как $k_L^2 = \varepsilon_i(\omega)/\eta^2$, где $\eta^2 = \varepsilon_L(\beta^2 + D(\gamma + j\omega))/(\omega^2 - j\gamma\omega)$ в рамках GNOR [18]. Коэффициент β – гидродинамическая скорость в плазме, связан со скоростью Ферма v_F соотношением $\beta^2 = 3/5v_F^2$, D – коэффициент диффузии электронов [18].

Перейдем теперь к построению приближенного решения для P-поляризации. В этом случае продольное поле строится на основе следующих скалярных потенциалов:

$$\Psi_{mn}^P(M) = j_{m+1}(k_L R_{\xi z_n^i})\cos(m+1)\varphi, \quad m = 0,1,\ldots,M, \quad n = 1,2,\ldots,N_L, \quad \Psi_n(M) = j_0(k_L R_{\xi z_n^i}). \tag{7}$$

Тогда выражения для полей принимают вид

$$\begin{gathered}\mathbf{E}_{\beta}^{N}=\sum_{m=0}^{M}\sum_{n=1}^{N_{\beta}^{m}}\left\{p_{mn}^{\beta}\frac{j}{k\varepsilon_{\beta}\mu_{\beta}}\nabla\times\nabla\times\mathbf{A}_{mn}^{(e)\beta}+q_{mn}^{\beta}\frac{1}{\varepsilon_{\beta}}\nabla\times\mathbf{A}_{mn}^{(h)\beta}\right\}+\sum_{n=1}^{N_{\beta}^{0}}r_{n}^{\beta}\frac{j}{k\varepsilon_{\beta}\mu_{\beta}}\nabla\times\nabla\times\mathbf{A}_{n}^{(e)\beta},\\ \mathbf{E}_{L}^{N}=\sum_{m=0}^{M}\sum_{n=1}^{N_{L}}p_{mn}^{L}\nabla\Psi_{mn}^{P}(M)+\sum_{n=1}^{N_{L}}r_{n}^{L}\nabla\Psi_{n}(M);\quad \mathbf{H}_{\beta}^{N}=\frac{j}{k\mu_{\beta}}\nabla\times\mathbf{E}_{\beta}^{N},\quad \beta=e,T,s\mp.\end{gathered}\tag{8}$$

Отметим, что внутри частицы $\mathbf{E}_i^N=\mathbf{E}_T^N+\mathbf{E}_L^N$, а внутри оболочки $\mathbf{E}_s^N=\mathbf{E}_{s+}^N+\mathbf{E}_{s-}^N$. При этом рассеянное поле в D_e строится на основе потенциалов (5), а полное поле внутри слоистой частицы на основе (6), (7).

Рассмотрим теперь случай S-поляризации. В этом случае для продольного поля будем использовать потенциалы вида

$$\Psi_{mn}^{S}(M)=j_{m+1}(k_L R_{\xi z_n^i})\sin(m+1)\varphi,\quad m=0,1,\ldots,M,\quad n=1,2,\ldots,N_L.\tag{9}$$

Представления для полей в этом случае записываются как

$$\begin{gathered}\mathbf{E}_{\beta}^{N}=\sum_{m=0}^{M}\sum_{n=1}^{N_{\beta}^{m}}\left\{p_{mn}^{\beta}\frac{j}{k\varepsilon_{\beta}\mu_{\beta}}\nabla\times\nabla\times\mathbf{A}_{mn}^{(h)\beta}+q_{mn}^{\beta}\frac{1}{\varepsilon_{\beta}}\nabla\times\mathbf{A}_{mn}^{(e)\beta}\right\}+\sum_{n=1}^{N_{\beta}^{0}}r_{n}^{\beta}\frac{j}{k\varepsilon_{\beta}\mu_{\beta}}\nabla\times\mathbf{A}_{n}^{(e)\beta},\\ \mathbf{E}_{L}^{N}=\sum_{m=0}^{M}\sum_{n=1}^{N_{L}}p_{mn}^{L}\nabla\Psi_{mn}^{S}(M);\quad \mathbf{H}_{\beta}^{N}=\frac{j}{k\mu_{\beta}}\nabla\times\mathbf{E}_{\beta}^{N},\quad \beta=e,T,s\mp.\end{gathered}\tag{10}$$

Сравнивая представления (8) и (10), замечаем отсутствие вклада продольного поля $\mathbf{E}_L^N$ в независящую от φ гармонику (10). Это является следствием того, что в случае S-поляризации отсутствует нормальная компонента электрического поля в не зависящей от φ гармоники.

3. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ МДИ

Прежде всего следует отметить, что представления для приближенного решения (8), (10) удовлетворяют всем условиям граничной задачи (1) за исключением условий сопряжения на поверхностях $\partial D_{i,s}$. Остановимся кратко на схеме вычислительного алгоритма определения вектора амплитуд ДИ $\mathbf{p}_m=\{p_{mn}^T,p_{mn}^L,q_{mn}^T,p_{mn}^{s\pm},q_{mn}^{s\pm},p_{mn}^e,q_{mn}^e\}$, $m=0,1,\ldots,M$. Отметим, что для любой фурье-гармоники размерность вектора амплитуд составляет $(2N_T+N_L+2N_{s+}+2N_{s-}+2N_e)$, для его определения у нас имеется девять граничных условий: пять на ∂D_i и четыре на ∂D_s. Эти условия используются для определения неизвестных амплитуд дискретных источников (ДИ). Для независящей от φ гармоники размерность вектора неизвестных равна $(N_T+N_L+N_{s+}+N_{s-}+N_e)$, для его определения имеется три условия на ∂D_i и два на ∂D_s. Условия для определения $\mathbf{p}_m$, $m=0,1,\ldots,M$, могут быть записаны в виде

$$\begin{gathered}\mathbf{n}_i\times\int_0^{2\pi}[\mathbf{E}_T^N(\xi_k,\varphi)+\mathbf{E}_L^N(\xi_k,\varphi)-\mathbf{E}_{s+}^N(\xi_k,\varphi)-\mathbf{E}_{s-}^N(\xi_k,\varphi)]e^{-jm\varphi}d\varphi=0,\\ \mathbf{n}_i\times\int_0^{2\pi}[\mathbf{H}_i^N(\xi_k,\varphi)-\mathbf{H}_{s+}^N(\xi_k,\varphi)-\mathbf{H}_{s-}^N(\xi_k,\varphi)]e^{-jm\varphi}d\varphi=0,\quad \{\xi_k\}_{k=1}^{K_i},\\ \mathbf{n}_i\times\int_0^{2\pi}[\varepsilon_L(\mathbf{E}_T^N(\xi_k,\varphi)+\mathbf{E}_L^N(\xi_k,\varphi))-\varepsilon_s(\mathbf{E}_{s+}^N(\xi_k,\varphi)+\mathbf{E}_{s-}^N(\xi_k,\varphi))]e^{-jm\varphi}d\varphi=0,\\ \mathbf{n}_s\times\int_0^{2\pi}[\mathbf{E}_{s+}^N(\zeta_k,\varphi)+\mathbf{E}_{s-}^N(\zeta_k,\varphi)-\mathbf{E}_e^N(\zeta_k,\varphi)]e^{-jm\varphi}d\varphi=\mathbf{n}_s\times\int_0^{2\pi}\mathbf{E}_0^0(\zeta_k,\varphi)e^{-jm\varphi}d\varphi,\\ \mathbf{n}_s\times\int_0^{2\pi}[\mathbf{H}_{s+}^N(\zeta_k,\varphi)+\mathbf{H}_{s-}^N(\zeta_k,\varphi)-\mathbf{H}_e^N(\zeta_k,\varphi)]e^{-jm\varphi}d\varphi=\mathbf{n}_s\times\int_0^{2\pi}\mathbf{H}_0^0(\zeta_k,\varphi)e^{-jm\varphi}d\varphi,\quad \{\zeta_k\}_{k=1}^{K_s},\end{gathered}\tag{11}$$

где $\{\xi_k\}_{k=1}^{K_i}$, $\{\zeta_k\}_{k=1}^{K_s}$ – точки коллокаций, распределенные по образующим поверхностей $\partial D_{i,s}$. Далее алгоритм дословно повторяет описание численной схемы МДИ, изложенной в [24]. Аналогично строится численная схема определения амплитуд ДИ не зависящей от φ гармоники.

Определив амплитуды ДИ, легко вычислить как ближние поля (8), (10), так и характеристики рассеяния в дальней зоне. Нам понадобится диаграмма направленности рассеянного поля $\mathbf{F}(\theta,\varphi)$ [29], (θ,φ) – компоненты которой на единичной верхней полусфере для P-поляризации принимают вид

$$F_\theta^P(\theta,\varphi) = jk_0\sum_{m=0}^{M}\cos\left((m+1)\varphi\right)(jk_0\sin\theta)^m \times$$
$$\times\sum_{n=1}^{N_0^m}\{p_{nm}^0[\bar{G}_n^e\cos\theta + jk_0\bar{g}_n^e\sin^2\theta] + q_{nm}^0\bar{G}_n^h\} - j\frac{k_0}{\varepsilon_0}\sin\theta\sum_{n=1}^{N_0^0} r_n^0\bar{G}_n^h, \tag{12}$$
$$F_\varphi^P(\theta,\varphi) = -jk_0\sum_{m=0}^{M}\sin\left((m+1)\varphi\right)(jk_0\sin\theta)^m\sum_{n=1}^{N_0^m}\{p_{nm}^0\bar{G}_n^e + q_{nm}^0[\bar{G}_n^h\cos\theta + jk_0\bar{g}_n^h\sin^2\theta]\},$$

а для S-поляризации могут быть записаны в виде

$$F_\theta^S(\theta,\varphi) = jk_0\sum_{m=0}^{M}\sin\left((m+1)\varphi\right)(jk_0\sin\theta)^m\sum_{n=1}^{N_0^m}\{p_{nm}^0[\bar{G}_n^e\cos\theta + \mathrm{j}k_0\bar{g}_n^e\sin^2\theta] - q_{nm}^0\bar{G}_n^h\},$$
$$F_\varphi^S(\theta,\varphi) = jk_0\sum_{m=0}^{M}\cos\left((m+1)\varphi\right)(jk_0\sin\theta)^m \times \tag{13}$$
$$\times\sum_{n=1}^{N_0^m}\{p_{nm}^0\bar{G}_n^e - q_{nm}^0[\bar{G}_n^h\cos\theta + jk_0\bar{g}_n^h\sin^2\theta]\} + j\frac{k_0}{\mu_0}\sin\theta\sum_{n=1}^{N_0^0} r_n^0\bar{G}_n^e,$$

где соответствующие спектральные функции $\bar{G}_n^{e,h}$, $\bar{g}_n^h$ имеют представления

$$\begin{gathered}\bar{G}_n^{e,h}(\theta) = \exp\{jk_0z_n^e\cos\theta\} + A_{11}^{e,h}(k_0\sin\theta)\times\exp\{-jk_0z_n^e\cos\theta\}, \quad z_n^e > 0,\\ \bar{g}_n^{e,h}(\theta) = jk_0\cos\theta v_{31}^{e,h}(k_0\sin\theta,\, z=0,\, z_n^e).\end{gathered} \tag{14}$$

Таким образом, определив амплитуды ДИ для рассеянного поля, можно легко вычислить компоненты диаграммы направленности (12), (13) на единичной полусфере $\Omega^+ = \{0 \le \theta \le \pi/2;\ 0 \le \varphi \le 2\pi\}$. Напомним, что угол θ отсчитывается от нормали к подложке.

4. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Определим интенсивность рассеянного поля (DSC) на единичной полусфере в виде

$$\mathrm{DSC}^{P,S}(\theta_0,\theta,\varphi) = \left|F_\theta^{P,S}(\theta_0,\theta,\varphi)\right|^2 + \left|F_\varphi^{P,S}(\theta_0,\theta,\varphi)\right|^2.$$

Тогда сечение рассеяния (SCS), которое представляет собой суммарную интенсивность рассеянного поля в верхнее полупространство, будет иметь вид

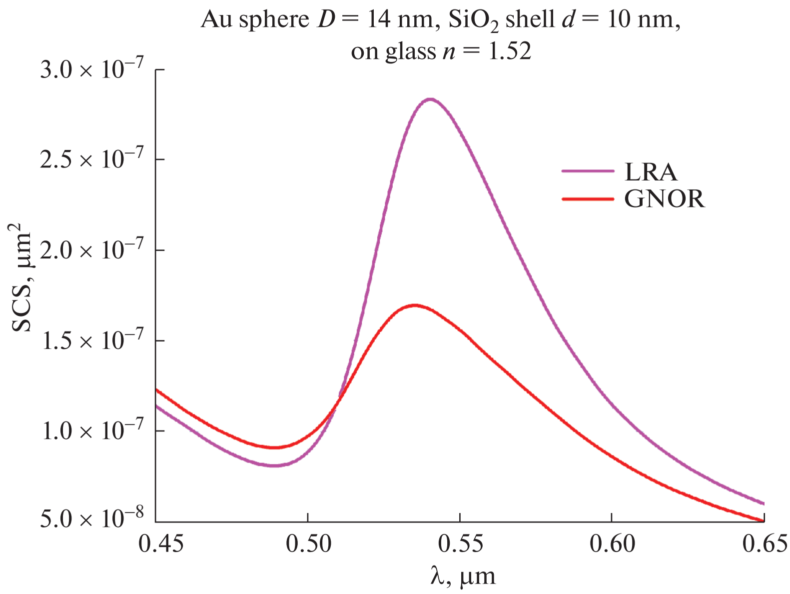
$$\sigma^{P,S}(\theta_0) = \int_{\Omega^+}\mathrm{DSC}^{P,S}\,(\theta_0,\theta,\varphi)d\omega. \tag{15}$$

Размерность сечения рассеяния σ дается в мкм^2.

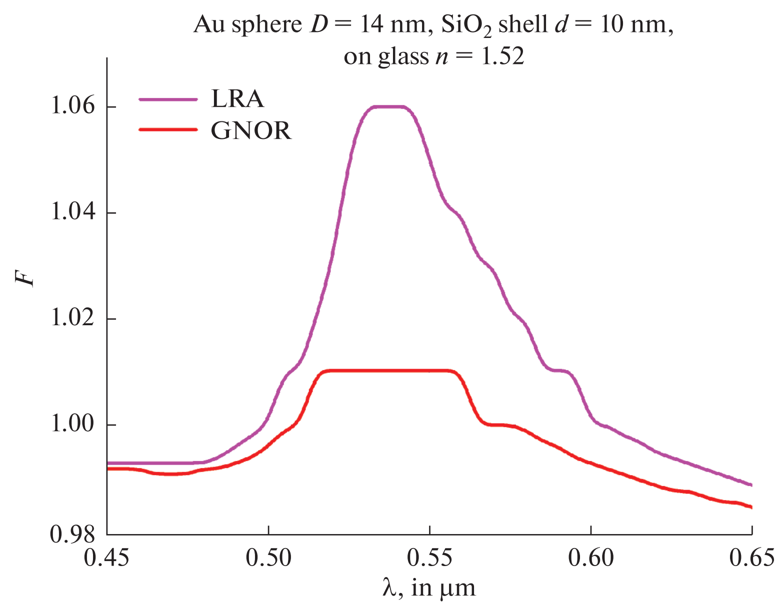
Будем рассматривать модель, использованную в первой экспериментальной реализации спасера, а именно золотую наносферу диаметром $D = 14$ нм со сферической оболочкой из SiO_2 (толщиной $d = 10$ нм) с внешним диаметром 44 нм [13]. Квантовые параметры, необходимые для определения ε_L и продольного волнового числа k_L, выбраны в соответствии с [18] в виде

$$\hbar\omega_p = 9.02\ \mathrm{eV}, \quad \hbar\gamma = 0.071\ \mathrm{eV}, \quad v_F = 1.39\ \text{мкм/с}, \quad D = 8.62\times10^8\ \text{мкм}^2/\text{с}.$$

Отметим, что локальное значение диэлектрической проницаемости для Au – $\varepsilon_i(\omega)$ определялось с учетом частотной дисперсии золота [30]. В качестве материала подложки выбрано стекло BK7



Фиг. 1. Сечение рассеяния SCS: (15) с учетом ЭН (GNOR) и без учета (LRA) для золотой (Au) сферы $D = 14$ нм, покрытой оболочкой SiO_2 толщиной $d = 10$ нм.

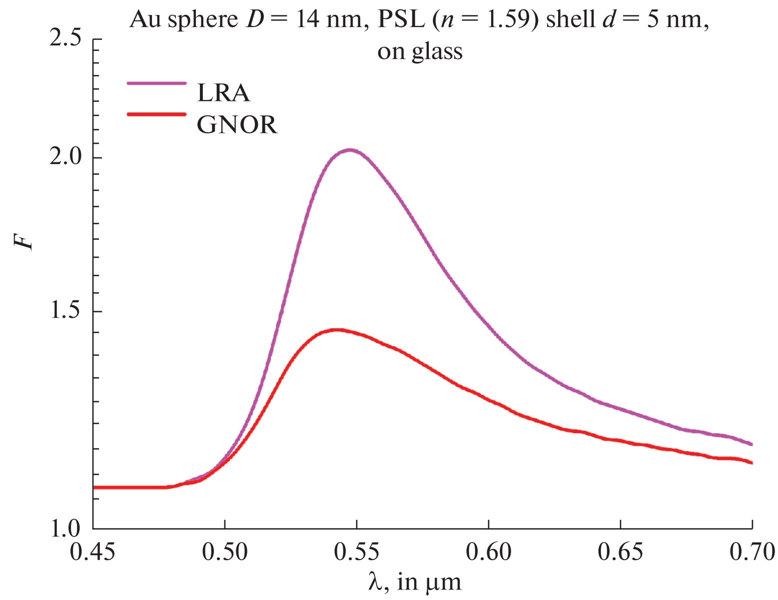


Фиг. 2. Коэффициент усиления $F(\lambda)$ с учетом и без учета ЭН для той же частицы, что и в предыдущем случае.

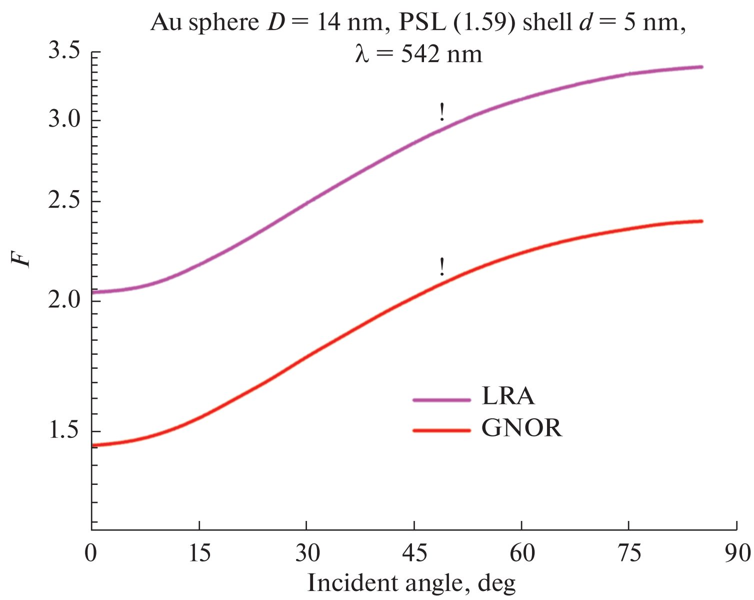
($n_1 = 1.52$), а в качестве активной среды – вещество CTAB ($n_0 = 1.336$) [12]. Предполагается, что плоская волна распространяется перпендикулярно подложке $\theta_0 = 0^\circ$.

Сначала рассмотрим поведение SCS: (15) в диапазоне частот. Как видно из фиг. 1, учет ЭН (GNOR) приводит к снижению амплитуды ПР более чем на 40%. На фиг. 2 показан расчет коэффициента усиления интенсивности поля

$$F = \int\limits_{\partial D_s} \left|\mathbf{E}_e + \mathbf{E}_0^0\right|^2 \Big/ \left|\mathbf{E}_0^0\right|^2 d\sigma$$



Фиг. 3. $F(\lambda)$для Au сферы $D = 14$ нм с оболочкой PSL толщиной $d = 5$ нм с учетом и без учета ЭН.



Фиг. 4. Коэффициент усиления в зависимости от угла падения волны $F(\theta_0)$, при $\lambda = 542$ нм для той же частицы, что и в предыдущем случае.

вблизи поверхности оболочки ∂D_s. Как и раньше, наблюдается заметное снижение усиления при учете ЭН. Вместе с тем следует отметить, что сам коэффициент усиления F не превышает 6%.

Зададимся вопросом: как увеличить коэффициент усиления? Это можно сделать за счет вариации параметров модели. Исследования показали, что наибольшее влияние оказывают материал оболочки и ее толщина. На фиг. 3 можно видеть зависимость $F(\lambda)$ для оболочки из PSL ($n = 1.59$) толщиной $d = 5$ нм. В этом случае коэффициент усиления увеличивается на 50%. Зафиксируем теперь длину волны в районе ПР (фиг. 3 – λ = 542 нм) и рассмотрим поведение $F(\theta_0)$ от угла падения плоской волны для P-поляризации. Фиг. 4 показывает, что коэффициент усиления монотонно возрастает по мере увеличения наклона падения плоской волны. Эта ситуация не является неожиданной, так как еще в ранних работах авторов было отмечено, что интенсивность рассеянного поля для P-поляризации возрастает при увеличении угла наклона [22]. Данное явление связано с появлением вертикальной компоненты поля, которая превалирует над остальными. Однако следует заметить, что увеличение $F(\theta_0)$ связано собственно с усилением интенсивности поля только до значения $\theta_0 \simeq 45^{\circ}$. Так как далее рост $F(\theta_0)$ обусловлен уменьшением знаменателя, т.е. $\left|\mathbf{E}_0^0\right|^2$.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Метод ДИ был обобщен на случай анализа характеристик моделей 3D резонаторов плазмонного нанолазера, расположенных на подложке, с учетом эффекта нелокальности. В результате моделирования было установлено, что учет ЭН в рамках модели GNOR приводит как к существенному снижению амплитуды ПР, так и коэффициента усиления интенсивности ближнего поля. Показано, что за счет изменения материала и толщины оболочки резонатора, а также изменения направления внешнего излучения возможно увеличить коэффициент усиления более чем в 2 раза.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Pelton M., Bryant G.* Introduction to Metal-Nanoparticle Plasmonics. John Wiley & Sons, 2013.
2. *Polman A., Atwater H.A.* Plasmonics: optics at the nanoscale // Mater. Today. 2005. V. 8. № 1. P. 56.
3. *Gramotnev D.K., Bozhevolnyi S.I.* Plasmonics beyond the diffraction limit // Nat. Photonics. 2010. V. 4. P. 83–91.
4. *Stockman M.I.* Nanoplasmonic sensing and detection // Science. 2015. V. 348. P. 287–288.
5. *Anker J.N., Hall W.P., Lyandres O. et al.* Biosensing with plasmonic nanosensors // Nat. Mater. 2008. V. 7. P. 442–453.
6. *Xu D., Xiong X., Wu L. et al.* Quantum plasmonics: new opportunity in fundamental and applied photonics. Review // Advances in Optics and Photonics. 2018. V. 10. № 4. P. 703–756.
7. *Stockman M.I., Kneipp K., Bozhevolnyi S.I. et al.* Roadmap on plasmonics // J. Opt. 2018. V. 20. N043001.
8. *Oulton R.F.* Surface plasmon lasers: sources of nanoscopic light. Review // Materials Today. 2012. V. 15. № 1–2. P. 26–34.
9. *Premaratne M., Stockman M.* Theory and technology of SPASERs. Review // Advances in Optics and Photonics. 2017. V. 9. № 1. P. 79–128.
10. *Балыкин В.И.* Плазмонный нанолазер: современное состояние и перспективы // Успехи физ. наук. 2018. Т. 188. № 9. С. 935–963.
11. *Bergman D.J., Stockman M.I.* Surface plasmon amplification by stimulated emission of radiation: quantum generation of coherent surface plasmons in nanosystems // Phys. Rev. Lett. 2003. V. 90. N027402.
12. *Solowan H.-P., Kryschi C.* Facile Design of a Plasmonic Nanolaser // Condens. Matter. 2017. V. 2. № 8. P. 1–7.
13. *Noginov M.A., Zhu G., Belgrave A.M. et al.* Demonstration of a Spaser-Based Nanolaser // Nature. 2009. V. 460. P. 1110–1113.
14. *Phan A.D., Nga D.T., Viet N.A.* Theoretical model for plasmonic photothermal response of gold nanostructures solutions // Optics Communications. 2018. V. 410. P. 108–111.
15. *Jeong Y., Kook Y.-M., Lee K., Koh W.-G.* Metal enhanced fluorescence (MEF) for biosensors: General approaches and a review of recent developments // Biosensors and Bioelectronics. 2018. V. 111. P. 102–116.
16. *Dong T., Shi Y., Liu H., Chen F. et al.* Investigation on plasmonic responses in multilayered nanospheres including asymmetry and spatial nonlocal effects // J. Phys. D: Appl. Phys. 2017. V. 50. N495302.
17. *Fernandez-Dominguez A.I., Wiener A., García-Vidal F.J. et al.* Transformation-optics description of nonlocal effects in plasmonic nanostructures // Phys. Rev. Lett. 2012. V. 108. N106802.
18. *Mortensen N.A., Raza S., Wubs M. et al.* A generalized non-local optical response theory for plasmonic nanostructures // Nat. Commun. 2014. V. 5. N3809.
19. *Toscano G., Straubel J., Kwiatkowski A. et al.* Resonance shifts and spill-out effects in self-consistent hydrodynamic nanoplasmonics // Nat. Commun. 2015. V. 6. N7132.
20. *Barbry M., Koval P., Marchesin F. et al.* Atomistic near-field nanoplasmonics: reaching atomic-scale resolution in nanooptics // Nano Lett. 2015. V. 15. N3410.
21. *Wubs M., Mortensen A.* Nonlocal Response in Plasmonic Nanostructures/Quantum Plasmonics / S.I. Bozhevolnyi et al., Eds. Switzerland: Springer, 2017. P. 279–302.

22. *Еремин Ю.А., Свешников А.Г.* Математические модели задач нанооптики и биофотоники на основе метода Дискретных источников // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2007. Т. 47. № 2. С. 266–284.
23. *Ringe E., Sharma B., Henry R.-I. et al.* Single nanoparticle plasmonics // Phys. Chem. Chem. Phys. 2013. V. 15. N4110.
24. *Еремин Ю.А., Свешников А.Г.* Математическая модель учета эффекта нелокальности плазмонных структур на основе метода дискретных источников // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2018. Т. 58. № 4. С. 586–594.
25. *Еремин Ю.А., Свешников А.Г.* Метод анализа рассеивающих свойств плазмонных частиц на подложке с учетом эффекта нелокальности // Докл. АН. 2017. V. 477. № 2. P. 153–158.
26. *Jerez-Hanckes C., Nedelec J.-C.* Asymptotics for Helmholtz and Maxwell solutions in 3-D open waveguides // Research report № 2010-07. February 2010. ETH, Swiss Federal Institute of Technology Zurich. 25 p.
27. *Schmitt N., Scheid C., Lanteri S., Moreau A., Viquerat J.* A DGTD method for the numerical modeling of the interaction of light with nanometer scale metallic structures taking into account non-local dispersion effects // J. Computat. Phys. 2016. V. 316. P. 396–415.
28. *Борн М., Вольф Э.* Основы оптики. М.: Наука, 1973. 713 с.
29. *Колтон Д., Кресс Р.* Методы интегральных уравнений в теории рассеяния. М.: Мир, 1987. 312 с.
30. http://www.refractiveindex.info.