ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ, 2022, том 58, № 12, с. 1694–1701

ИНТЕГРАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ

УДК 517.958

УНИВЕРСАЛЬНАЯ ФОРМУЛА ЭКСТИНКЦИИ ДЛЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА ПРИ ЛОКАЛЬНОМ ВОЗБУЖДЕНИИ

© 2022 г. Ю. А. Ерёмин, В. В. Лопушенко

На основе математического анализа решения системы уравнений Максвелла для граничной задачи возбуждения нелокального рассеивателя, расположенного вблизи прозрачной подложки, электрическим диполем произвольной поляризации получена универсальная формула для сечения экстинкции. Формула позволяет определять сечение экстинкции, вычисляя рассеянное поле лишь в одной единственной точке. Проведено обобщение полученного результата на случай возбуждения мультиполем произвольного порядка рассеивателя при наличии прозрачной подложки, при этом мультиполь может располагаться как вблизи рассеивателя, так и внутри подложки. На основе проведённых исследований получена формула для вычисления квантового выхода флюоресценции, исключающая необходимость вычисления сечения поглощения для рассеивателя с эффектом нелокальности.

DOI: 10.31857/S0374064122120111, EDN: NCWPAH

Введение. Явление флюоресценции широко используется в современных научных приборах как эффективное средство расшифровки спектров отдельных молекул [1, 2]. Критическим параметром для оценки разрешающей способности таких приборов является величина квантового выхода флюоресценции [3, 4]. Увеличение значений квантового выхода – первейшая задача разработчиков подобных устройств. Основным элементом устройств является совокупность плазмонных частиц, располагающихся вблизи прозрачной подложки, при этом наибольший интерес представляет использование слоистых частиц [5, 6]. Вследствие непрерывного развития технологий размеры самих частиц, равно как и толщины металлических слоёв, все время уменьшаются. Тенденция минитюаризации влечёт за собой проявление эффекта нелокального экранирования в плазменном металле [6, 7]. Как известно, данный эффект приводит к снижению интенсивности полей и сдвигу положения плазменного резонанса, что вызывает существенные трудности при построении технологических схем подобных устройств.

Математическое моделирование процесса флюоресценции предполагает наличие эффективного способа вычисления квантового выхода флюоресценции с необходимостью оценки сечения рассеяния структуры C_{scs}, которое, собственно, и регистрируется, а также сечения поглощения энергии в металле C_{abc}, которое представляется "паразитным" фактором, неизбежно возникающим при использовании металлов [2, 4]. Для определения последнего приходится выполнять трудоемкие расчёты с интегрированием полей по поверхности структуры в присутствии прозрачной подложки, что связано с многократным вычислением несобственных интегралов Зоммерфельда [5]. Кроме того, присутствие нелокальности в металле приводит к появлению продольных полей, которые осциллируют на порядок сильнее, чем классическое поперечное поле [6]. Все это делает весьма затратной процедуру вычисления сечения поглощения в заданном диапазоне частот. Однако, поскольку квантовый выход представляется в виде отношения $\eta = C_{\text{scs}}/(C_{\text{scs}} + C_{\text{abc}})$, возникает идея вычислять сечение экстинкции C_{ext}, представленное в виде суммы $C_{\text{ext}} = C_{\text{scs}} + C_{\text{abc}}$, используя оптическую теорему.

Оптическая теорема (ОТ) представляет собой фундаментальный результат математической теории дифракции [8, 9]. Первоначально доказанная для случая возбуждения рассеивателя плоской волной, она определяла сечение экстинкции как функционал от диаграммы направленности рассеянного поля на бесконечности в направлении прохождения плоской волны. Таким образом, сумма сечений рассеяния и поглощения определяется одним единственным легко вычисляемым числом. В дальнейшем появилось обобщение ОТ на случай присутствия прозрачной подложки [10, 11]. Существенным моментом при оценке квантового выхода флюоресценции является то, что возбуждение структуры в данном случае производится не плоской волной, а электрическим диполем, располагающимся вблизи поверхности рассеивателя [6, 7].

В работе [12] было получено сечение экстинкции для мультиполя, располагающегося в свободном пространстве. В настоящей работе при анализе решения системы уравнений Максвелла для нелокального рассеивателя, расположенного вблизи прозрачной подложки и возбуждаемого электрическим диполем произвольной поляризации, получена универсальная формула для сечения экстинкции. Формула даёт возможность определять сечение экстинкции, вычисляя рассеянное поле в одной единственной точке – точке расположения диполя. Проведено обобщение этого результата на случай возбуждения мультиполем произвольного порядка рассеивателя, располагающегося вблизи прозрачного полупространства. При этом мультиполь может находиться как непосредственно вблизи рассеивателя, так и внутри прозрачного полупространства.

1. Постановка граничной задачи. Перейдём к математической постановке граничной задачи дифракции. Пусть локальный рассеиватель D_i, расположенный в верхнем полупространстве D_0 $(z>0):$ $\overline{D_i}\subset D_0$ вблизи границы нижнего полупространства D_1 $(z<0)$, возбуждается точечным диполем $\mathbf{J}(M,M_0)=\boldsymbol{e}\delta(M-M_0)$. Полные поля $(\mathbf{E}_{0,1},\mathbf{H}_{0,1})$ в каждом из полупространств $D_{0,1}$ являются решениями уравнений Максвелла

$$\nabla\times\mathbf{H}_0=jk\varepsilon_0\mathbf{E}_0+\mathbf{J},\quad \nabla\times\mathbf{E}_0=-jk\mu_0\mathbf{H}_0\quad\text{в}\quad D_0\backslash\overline{D_i},$$
$$\nabla\times\mathbf{H}_1=jk\varepsilon_1\mathbf{E}_1+\mathbf{J},\quad \nabla\times\mathbf{E}_1=-jk\mu_1\mathbf{H}_1\quad\text{в}\quad D_1,$$
$$\widehat{\mathbf{e}}_\mathrm{z}\times(\mathbf{E}_0-\mathbf{E}_1)=0,\quad \widehat{\mathbf{e}}_\mathrm{z}\times(\mathbf{H}_0-\mathbf{H}_1)=0\quad\text{на}\quad\Sigma:(z=0).\tag{1}$$

Временна́я зависимость величин выбрана в виде $\exp(j\omega t)$, где ω – частота колебаний, t – время, ε_0 и ε_1 – диэлектрические проницаемости сред в областях $D_0\backslash\overline{D_i}$ и D_1 соответственно, а $\widehat{\mathbf{e}}_\mathrm{z}$ – единичный вектор декартовой системы координат, соответствующий оси z. Кроме того, поля $(\mathbf{E}_{0,1},\mathbf{H}_{0,1})$ должны удовлетворять следующим условиям излучения на бесконечности [13]:

$$\lim_{r\to\infty} r\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\times\sqrt{\mu_{0,1}}\mathbf{H}_{0,1}-\sqrt{\varepsilon_{0,1}}\mathbf{E}_{0,1}\right)=0,\quad r=\sqrt{x^2+y^2+z^2},\quad z\neq0;$$
$$\max(|\mathbf{E}_{0,1}|,|\mathbf{H}_{0,1}|)=O(\rho^{-1/2});\quad \rho=\sqrt{x^2+y^2},\quad \rho\to\infty,\quad z=\pm0.\tag{2}$$

Внутри локального рассеивателя D_i полное поле $(\mathbf{E}_i,\mathbf{H}_i)$ удовлетворяет полуклассической системе уравнений Максвелла в рамках теории обобщённого нелокального отклика (GNOR) [14], т.е.

$$\nabla\times\mathbf{H}_i=jk[\varepsilon_i+\xi^2\nabla(\nabla\cdot)]\mathbf{E}_i,\quad \nabla\times\mathbf{E}_i=-jk\mathbf{H}_i\quad\text{в}\quad D_i.\tag{3}$$

Здесь $k=\omega/c$ – волновое число, c – скорость света, ε_i – диэлектрическая проницаемость среды внутри D_i, а

$$\xi^2=\varepsilon_\mathrm{b}\left[\frac{\beta^2}{\omega(\omega-j\gamma)}+j\frac{D}{\omega}\right],$$

ξ – корреляционная длина нелокальности в рамках модели GNOR, $\varepsilon_\mathrm{b}=\varepsilon_i+\omega_p^2/(\omega(\omega-j\gamma))$, ω_p – плазмонная частота металла, $\beta^2=(3/5)v_\mathrm{F}^2$, v_F – скорость Ферми, γ – скорость затухания и D – коэффициент диффузии электронов. Граничные условия на поверхности рассеивателя ∂D_i, включая дополнительное условие, могут быть записаны как

$$\widehat{\mathbf{n}}_i\times(\mathbf{E}_i-\mathbf{E}_0)=0,\quad \widehat{\mathbf{n}}_i\times(\mathbf{H}_i-\mathbf{H}_0)=0,\quad \varepsilon_\mathrm{b}\widehat{\mathbf{n}}_i\cdot\mathbf{E}_i=\varepsilon_0\widehat{\mathbf{n}}_i\cdot\mathbf{E}_0\quad\text{в}\quad\partial D_i.\tag{4}$$

Будем считать, что $\partial D_i\in C^{(2,\alpha)}$, а параметры среды удовлетворяют условиям $\operatorname{Im}\varepsilon_i\leqslant0$, $\operatorname{Im}\varepsilon_{0,1}=0$, $\mu_{0,1}=1$. Тогда на основании результатов, представленных в работе [15], будем полагать, что сформулированная выше граничная задача (1)–(4) имеет единственное классическое решение.

2. Оптическая теорема. Проведём некоторые предварительные построения. Выберем сферу Σ_R с центром на плоскости Ξ, которая заключает область D_i и точку источника M_0 внутри. Обозначим получившуюся внутреннюю область как D_R. Плоскость Ξ разрезает D_R на два полушара $D_R^{\pm}$ с поверхностями $\Sigma_R^{\pm}$, располагающихся в областях $D_{0,1}$ соответственно. Применив формулу Гаусса к решению граничной задачи (1)–(4) в области D_R^+/D_i, получим

$$\int\limits_{D_R^+/D_i} \nabla\cdot[\mathbf{E}_0\times\mathbf{H}_0^*]\,d\tau = \int\limits_{D_R^+/D_i} [\mathbf{H}_0^*\cdot\nabla\times\mathbf{E}_0 - \mathbf{E}_0\cdot\nabla\times\mathbf{H}_0^*]\,d\tau =$$

$$= \int\limits_{D_R^+/D_i} [-jk|\mathbf{H}_0^*|^2 + jk\varepsilon_0|\mathbf{E}_0|^2 - (\mathbf{E}_0\cdot\mathbf{J}^*)]\,d\tau = \int\limits_{\Sigma_R^+\bigcup\partial D_i\bigcup\Xi_R} [\mathbf{E}_0\times\mathbf{H}_0^*]\cdot\mathbf{n}\,d\sigma, \tag{5}$$

здесь $\mathbf{n}$ – внешняя нормаль к соответствующим поверхностям, Ξ_R – круг радиуса R на плоскости Ξ, отсекаемый сферой Σ_R. Учитывая условия сопряжения для тангенциальных компонент полей на ∂D_i, имеем

$$\int\limits_{\partial D_i} [\mathbf{E}_0\times\mathbf{H}_0^*]\cdot\mathbf{n}\,d\sigma = \int\limits_{\partial D_i} [\mathbf{E}_i\times\mathbf{H}_i^*]\cdot\mathbf{n}\,d\sigma. \tag{6}$$

В правой части равенства (6) стоит сечение поглощения C_{abc}. Выделяя реальные значения от обеих частей (5), с учётом (6) получаем

$$C_{\text{abc}} + \mathrm{Re}\int\limits_{\Sigma_R^+} [\mathbf{E}_0\times\mathbf{H}_0^*]\cdot\mathbf{e}_r\,d\sigma + \mathrm{Re}\int\limits_{\Xi_R} [\mathbf{E}_0\times\mathbf{H}_0^*]\cdot\mathbf{i}_z\,d\sigma = -\mathrm{Re}\int\limits_{D_R^+/D_i} (\mathbf{E}_0\cdot\mathbf{J}^*)\,d\tau.$$

Аналогично в области D_R^- имеем

$$\mathrm{Re}\int\limits_{\Sigma_R^-} [\mathbf{E}_1\times\mathbf{H}_1^*]\cdot\mathbf{e}_r\,d\sigma - \mathrm{Re}\int\limits_{\Xi_R} [\mathbf{E}_1\times\mathbf{H}_1^*]\cdot\mathbf{i}_z\,d\sigma = 0.$$

Складывая два последних соотношения, с учётом условий сопряжения для полей на границе раздела Ξ полупространств получаем следующее соотношение:

$$C_{\text{abc}} + \mathrm{Re}\int\limits_{\Sigma_R^+} [\mathbf{E}_0\times\mathbf{H}_0^*]\cdot\mathbf{e}_r\,d\sigma + \mathrm{Re}\int\limits_{\Sigma_R^-} [\mathbf{E}_1\times\mathbf{H}_1^*]\cdot\mathbf{e}_r\,d\sigma = -\mathrm{Re}\int\limits_{D_R^+/D_i} (\mathbf{E}_0\cdot\mathbf{J}^*)\,d\tau. \tag{7}$$

Введём в рассмотрение диаграммы рассеяния $\mathbf{F}_{0,1}(\theta,\varphi)$ (см. [16, с. 131]) полей в верхнем и нижнем полупространствах соответственно

$$\mathbf{E}_{0,1}(M) = \frac{e^{-jk_{0,1}r}}{r}\mathbf{F}_{0,1}(\theta,\varphi) + o(r^{-1}), \quad r\to\infty,$$

определённые на единичных полусферах $\Theta^{\pm}$, и $k_{0,1} = k\sqrt{\epsilon_{0,1}\mu_{0,1}}$. Для перехода к пределам при $R\to\infty$ в соотношении (7) следует учитывать особенности использования условий излучения (2) в присутствии подложки. Выделим сферический слой толщиной h, отсекаемый плоскостями, параллельными плоскости Ξ и расположенными по разные стороны от неё в верхнем и нижнем полупространствах. Внутри областей, ограниченных верхней и нижней оставшимися частями сфер $\Sigma_R^{\pm}$, справедливы классические условия излучения Сильвера–Мюллера. В окрестности Ξ имеет место оценка $\max(|\mathbf{E}_{0,1}|, |\mathbf{H}_{0,1}|) = O(\rho^{-1/2})$, $\rho\to\infty$. Тогда поток энергии через боковую поверхность сферического слоя толщиной h имеет порядок $O(h)$, причём эта оценка не зависит от R. Устремляя $h \to 0$, $R \to \infty$ и учитывая классические условия излучения, получаем из (5) соотношение

$$C_{\text{abc}} + \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \int\limits_{\Theta^+} |\mathbf{F}_0|^2 \, d\varpi + \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} \int\limits_{\Theta^-} |\mathbf{F}_1|^2 \, d\varpi = -\mathrm{Re} \int\limits_{D_R^+/D_i} (\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{J}^*) \, d\tau. \tag{8}$$

Введём сечения рассеяния в верхнее и нижнее полупространство соответственно:

$$C_{\text{scs}}^{\pm} = \sqrt{\frac{\varepsilon_{0,1}}{\mu_{0,1}}} \int\limits_{\Theta^{\pm}} |\mathbf{F}_{0,1}|^2 \, d\varpi.$$

Тогда по аналогии со свободным пространством определим сечение экстинкции

$$C_{\text{ext}} = C_{\text{abc}} + C_{\text{scs}}^{+} + C_{\text{scs}}^{-}.$$

Разобьем поле в верхнем полупространстве на рассеянное поле и поле диполя $\mathbf{E}_0 = \mathbf{E}_0^s + \mathbf{E}_0^d$. При этом будем полагать, что каждое из них удовлетворяет условиям сопряжения на Ξ. Тогда правая часть (8) может быть записана как

$$C_{\text{ext}} = -\mathrm{Re}\,(\mathbf{e} \cdot \mathbf{E}_0^s(M_0)) - \mathrm{Re}\,(\mathbf{e} \cdot \mathbf{E}_0^d(M)|_{M=M_0}). \tag{9}$$

Для вычисления конкретного вида выражений в правой части (9) понадобится представление для поля электрического диполя в присутствии полупространства. Соответствующий векторный потенциал имеет вид [17, с. 37]

$$\mathbf{A}(M) = \frac{1}{4\pi} \int\limits_{D_0/D_i} \mathbf{G}^e(M,P)\mathbf{J}(P) \, d\tau_P,$$

где $\mathbf{G}^e(M, M_0)$ – тензор Грина полупространства

$$\mathbf{G}^e(M, M_0) = \begin{bmatrix} G_{11} & 0 & 0 \\ 0 & G_{11} & 0 \\ \partial g/\partial x & \partial g/\partial y & G_{33} \end{bmatrix}. \tag{10}$$

Компоненты тензора Грина могут быть записаны в виде интегралов Зоммерфельда:

$$G_{\beta\beta}(M, M_0) = \int\limits_0^\infty J_0(\lambda r) v_{\beta\beta}(\lambda, z, z_0) \lambda \, d\lambda, \quad \beta = 1, 3; \quad g_{31}(M, M_0) = \int\limits_0^\infty J_0(\lambda r) v_{31}(\lambda, z, z_0) \lambda \, d\lambda.$$

Здесь $r^2 = (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2$, J_0 – цилиндрическая функция Бесселя, (x_0, y_0, z_0) – декартовы координаты источника, расположенного в точке M_0. В данном случае для спектральных функций v_{11}, v_{33}, v_{31} [17, с. 39], обеспечивающих непрерывность тангенциальных компонент полей при $z = 0$, имеют место следующие представления:

$$v_{\beta\beta}(\lambda, z, z_0) = \frac{\exp\{-\eta_0 |z - z_0|\}}{\eta_0} + A_{\beta\beta}(\lambda, z_0) \frac{\exp\{-\eta_0 z\}}{\eta_0}, \quad z_0 > 0, \quad z > 0;$$

$$v_{31}(\lambda, z, z_0) = A_{31}(\lambda, z_0) \exp\{-\eta_0 z_0\}, \quad z_0 > 0, \quad z > 0,$$

где $\eta_{0,1}^2 = \lambda^2 - k_{0,1}^2$. Спектральные коэффициенты определяются из условий для скачков полей при $z = 0$ [17, с. 40]. Отсюда легко получается, что

$$A_{11}(\lambda, z_0) = \frac{\eta_0 - \eta_1}{\eta_0 + \eta_1} \exp\{-\eta_0 z_0\}, \quad A_{33}(\lambda, z_0) = \frac{\varepsilon_1 \eta_0 - \varepsilon_0 \eta_1}{\varepsilon_1 \eta_0 + \varepsilon_0 \eta_1} \exp\{-\eta_0 z_0\},$$

$$A_{31}(\lambda, z_0) = \frac{2(\varepsilon_1 - \varepsilon_0) \exp\{-\eta_0 z_0\}}{(\eta_0 + \eta_1)(\varepsilon_1 \eta_0 + \varepsilon_0 \eta_1)}.$$

Отметим, что первое слагаемое в первой строке спектральной функции соответствует фундаментальному решению уравнения Гельмгольца $4\pi\Psi(M,M_0)$. Таким образом, поле электрического диполя, удовлетворяющее условиям сопряжения для полей на границе раздела полупространств, принимает вид

$$\mathbf{E}_0^d(M) = -\frac{j}{4\pi k_0}\nabla\times\nabla\times\int\limits_{D_0/D_i}\mathbf{G}^e(M,P)\cdot\mathbf{J}(P)\,d\tau_P.$$

Рассмотрим компоненты вектора поляризации возбуждающего диполя в декартовой системе координат. Начнём с вертикального диполя, т.е. компоненты с $\boldsymbol{e}_z$. Имеем

$$\mathbf{E}_0^{d(z)}(M) = -\frac{j}{4\pi k_0}\nabla\times\nabla\times\{\Psi(M,M_0)\boldsymbol{e}_z\} - \frac{j}{4\pi k_0}\nabla\times\nabla\times\{\overline{G}_{33}(M,M_0)\boldsymbol{e}_z\},$$

здесь первое слагаемое представляет собой поле диполя в свободном пространстве с волновым числом k_0. Для удобства дальнейшего рассмотрения преобразуем выражение

$$\operatorname{Re}\left(-\frac{\mathrm{j}}{k_0}\Psi(M,M_0)\right) = \operatorname{Im}\left(\frac{e^{-jk_0R_{MM_0}}}{k_0R_{MM_0}}\right) = -j_0(k_0R_{MM_0}),$$

где $j_0(k_0R_{MM_0})$ – сферическая функция Бесселя [18, с. 785]. Тогда справедливы равенства

$$\mathbf{e}_z\cdot\nabla\times\nabla\times[j_0(M)\mathbf{e}_z] = -|\mathbf{e}_z|^2\triangle j_0(M) + \mathbf{e}_z\nabla\nabla\cdot(j_0(M)\mathbf{e}_z) = |\mathbf{e}_z|^2\left(k_0^2j_0(M) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}j_0(M)\right).$$

В результате получим для сингулярной части выражение

$$-\frac{j}{4\pi k_0}\nabla\times\nabla\times\{j_0(M)\mathbf{e}_z\}_{M=M_0} = \frac{|\mathbf{e}_z|^2}{4\pi}\left(k_0^2j_0(M) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}j_0(M)\right)_{M=M_0} = \frac{k_0^2}{6\pi}|\mathbf{e}_z|^2. \tag{11}$$

Рассмотрим подробнее второе слагаемое, в котором $\overline{G}_{33}$ – соответствующий элемент тензора Грина (10) без сингулярности. Поскольку компоненты тензора (10) удовлетворяют уравнению Гельмгольца в полупространстве D_0, то аналогично имеем

$$\mathbf{e}_z\cdot\nabla\times\nabla\times[\overline{G}_{33}(M,M_0)\mathbf{e}_z]\Big|_{M=M_0} = |\mathbf{e}_z|^2\left[k_0^2\overline{G}_{33}(M,M_0) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\overline{G}_{33}(M,M_0)\Big|_{M=M_0}\right] =$$

$$= |\mathbf{e}_z|^2\int\limits_0^\infty(k_0^2+\eta_0^2)\frac{\varepsilon_1\eta_0-\varepsilon_0\eta_1}{\varepsilon_1\eta_0+\varepsilon_0\eta_1}\,\frac{\exp\{-2\eta_0z_0\}}{\eta_0}\lambda\,d\lambda = |\mathbf{e}_z|^2\int\limits_0^\infty\frac{\varepsilon_1\eta_0-\varepsilon_0\eta_1}{\varepsilon_1\eta_0+\varepsilon_0\eta_1}\,\frac{\exp\{-2\eta_0z_0\}}{\eta_0}\lambda^3\,d\lambda.$$

Выделив вещественную часть последнего интеграла, с учётом отсутствия мнимой части у волнового числа k_1 получим

$$\operatorname{Re}\int\limits_{D_0}(\mathbf{E}_0^{d(z)}\cdot\mathbf{J}^*)\,d\tau = \frac{|\mathbf{e}_z|^2}{4\pi k_0}\operatorname{Im}\int\limits_0^\infty\frac{\varepsilon_1\eta_0-\varepsilon_0\eta_1}{\varepsilon_1\eta_0+\varepsilon_0\eta_1}\,\frac{\exp\{-2\eta_0z_0\}}{\eta_0}\lambda^3\,d\lambda =$$
$$= \frac{|\mathbf{e}_z|^2}{4\pi k_0}\operatorname{Im}\int\limits_0^{k_1}\frac{\varepsilon_1\eta_0-\varepsilon_0\eta_1}{\varepsilon_1\eta_0+\varepsilon_0\eta_1}\,\frac{\exp\{-2\eta_0z_0\}}{\eta_0}\lambda^3\,d\lambda.$$

Рассмотрим теперь случай горизонтального диполя, соответствующего компоненте $\boldsymbol{e}_\mathrm{x}$. Как и в предыдущем случае, достаточно рассмотреть лишь соответствующий элемент тензора без сингулярности, поскольку для сингулярной части будет иметь место соотношение, полностью аналогичное (11). Таким образом, для $\overline{G}_{11}(M,M_0) + \dfrac{\partial}{\partial x}g(M,M_0)$ имеем

$$\mathbf{e}_\mathrm{x}\cdot\nabla\times\nabla\times\left[\overline{G}_{11}(M,M_0) + \frac{\partial}{\partial x}g(M,M_0)\right]\mathbf{e}_\mathrm{x}\Big|_{M=M_0} =$$

$$= k_0^2|\mathbf{e}_\mathrm{x}|^2\left[\overline{G}_{11}(M,M_0)+\frac{\partial}{\partial x}g(M,M_0)\bigg|_{M=M_0}\right]+\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}\overline{G}_{11}(M,M_0)+\frac{\partial^3}{\partial x^3}g(M,M_0)\right]_{M=M_0}.$$

Сразу отметим то обстоятельство, что наличие любых производных нечётного порядка по x или y от интеграла, содержащего $J_0(\lambda r)$, приводит к обнулению результата при $M=M_0$ $(r=0)$. В этом легко убедиться, записав ряд для функции Бесселя $J_0(x)$, который содержит лишь чётные степени аргумента [18, с. 777]. Учитывая данное обстоятельство, получаем

$$|\mathbf{e}_\mathrm{x}|^2\left[k_0^2\overline{G}_{11}(M,M_0)+\frac{\partial^2}{\partial x^2}\overline{G}_{11}(M,M_0)\bigg|_{M=M_0}\right]=|\mathbf{e}_\mathrm{x}|^2\int\limits_0^\infty\left(k_0^2-\frac{\lambda^2}{2}\right)\frac{\eta_0-\eta_1}{\eta_0+\eta_1}\,\frac{\exp\{-2\eta_0z_0\}}{\eta_0}\lambda\,d\lambda$$

или

$$\mathrm{Re}\int\limits_{D_0}(\mathbf{E}_0^{d(x)}\cdot\mathbf{J}^*)\,d\tau=\frac{|\mathbf{e}_\mathrm{x}|^2}{8\pi k_0}\,\mathrm{Im}\int\limits_0^{k_1}(2k_0^2-\lambda^2)\frac{\eta_0-\eta_1}{\eta_0+\eta_1}\,\frac{\exp\{-2\eta_0z_0\}}{\eta_0}\lambda\,d\lambda.$$

Аналогичное соотношение можно получить и для случая горизонтального диполя, соответствующего компоненте $\mathbf{e}_y$. Собрав слагаемые, имеем

$$-\,\mathrm{Re}\,(\mathbf{e}\cdot\mathbf{E}_0^s)=\frac{k_0^2}{6\pi}|\mathbf{e}|^2-\frac{|\mathbf{e}_z|^2}{4\pi k_0}\,\mathrm{Im}\int\limits_0^{k_1}\frac{\varepsilon_1\eta_0-\varepsilon_0\eta_1}{\varepsilon_1\eta_0+\varepsilon_0\eta_1}\,\frac{\exp\{-2\eta_0z_0\}}{\eta_0}\lambda^3\,d\lambda-$$
$$-\,\frac{(|\mathbf{e}_\mathrm{x}|^2+|\mathbf{e}_y|^2)}{8\pi k_0}\,\mathrm{Im}\int\limits_0^{k_1}(2k_0^2-\lambda^2)\frac{\eta_0-\eta_1}{\eta_0+\eta_1}\,\frac{\exp\{-2\eta_0z_0\}}{\eta_0}\lambda\,d\lambda.$$

Теорема 1. *Оптическая теорема (или, как её иногда называют, теорема экстинкции) для граничной задачи (1)–(4) принимает следующий вид:*

$$C_\mathrm{ext}=-\mathrm{Re}\,(\mathbf{e}\cdot\mathbf{E}_0^s)+\frac{k_0^2}{6\pi}|\mathbf{e}|^2-\frac{|\mathbf{e}_z|^2}{4\pi k_0}\,\mathrm{Im}\int\limits_0^{k_1}\frac{\varepsilon_1\eta_0-\varepsilon_0\eta_1}{\varepsilon_1\eta_0+\varepsilon_0\eta_1}\,\frac{\exp\{-2\eta_0z_0\}}{\eta_0}\lambda^3\,d\lambda-$$
$$-\,\frac{(|\mathbf{e}_\mathrm{x}|^2+|\mathbf{e}_y|^2)}{8\pi k_0}\,\mathrm{Im}\int\limits_0^{k_1}(2k_0^2-\lambda^2)\frac{\eta_0-\eta_1}{\eta_0+\eta_1}\,\frac{\exp\{-2\eta_0z_0\}}{\eta_0}\lambda\,d\lambda. \qquad (12)$$

Проведём анализ полученного соотношения (12). Напомним, что сечение экстинкции состоит из $C_\mathrm{ext}=C_\mathrm{abc}+C_\mathrm{scs}^{+}+C_\mathrm{scs}^{-}$. Здесь два последних слагаемых представляют собой сечения рассеяния полного поля, включая поле диполя, в верхнем и нижнем полупространствах. Уберём теперь рассеиватель, т.е. положим $\mathbf{E}_0^s=0$, тогда и $C_\mathrm{abc}=0$. Последнее легко установить, если, аналогично предыдущему, использовать теорему дивергенции внутри области, занятой рассеивателем, для поля диполя $\mathbf{E}_0^d$. Таким образом, в левой части соотношения (12) останется лишь сумма $C_\mathrm{scs}^{d+}+C_\mathrm{scs}^{d-}$, а в правой части исчезнет слагаемое, соответствующее рассеянному полю. Обозначим оставшуюся сумму как $C_i^d=C_\mathrm{scs}^{d+}+C_\mathrm{scs}^{d-}$. Она представляет собой полное сечение излучения диполя как в верхнее, так и в нижнее полупространство. Тогда формулу (12) для сечения экстинкции можно записать как

$$C_\mathrm{ext}=-\mathrm{Re}\,(\mathbf{e}\cdot\mathbf{E}_0^s)+C_i^d. \qquad (13)$$

Полученную формулу (13) будем называть *универсальной формулой для сечения экстинкции*, соответствующей локальному источнику первичного излучения в присутствии прозрачного полупространства.

Итак, установлено, что вместо того чтобы вычислять сечение поглощения, интегрируя по поверхности рассеивателя (6), достаточно вычислить проекцию рассеянного поля на вектор поляризации электрического диполя в одной единственной точке – точке расположения диполя и добавить к нему сечение излучения диполя.

Таким образом, квантовый выход флюоресценции может быть записан как

$$\eta = \frac{C^{+}_{\mathrm{scs}} + C^{-}_{\mathrm{scs}}}{C_{\mathrm{ext}}},$$

где C_{ext} имеет вид (13).

Замечание 1. С вычислительной точки зрения формула (13) представляется более экономичной. Так как при вычислении сечений рассеяния $C^{\pm}_{\mathrm{scs}}$ приходится интегрировать диаграмму рассеянного поля плюс диаграмму источника, вычисление отдельно интеграла от источника излучения не ведет к дополнительным затратам ресурсов.

В работе [12] было получено выражение для экстинкции для случая возбуждения локального проницаемого рассеивателя, расположенного в свободном пространстве, произвольным мультиполем. В этом случае в качестве функции тока вместо диполя $\mathbf{J}(M, M_0) = \boldsymbol{e}\delta(M - M_0)$ использовалось представление для мультипольного источника следующего вида:

$$\mathbf{J}(M, M_0) = \boldsymbol{e} D^m_n \delta(M - M_0),$$

где дифференциальный оператор

$$D^m_n = (-1)^m j^n \left[\frac{j}{k}\left(\frac{\partial}{\partial x} - j\frac{\partial}{\partial y}\right)\right]^m P^{(m)}_n\left(\frac{j}{k}\frac{\partial}{\partial z}\right),$$

здесь $P^{(m)}_n(\cos\theta) = \dfrac{\partial^m P_n(\cos\theta)}{\partial(\cos\theta)^m}$, $P_n(\cos\theta)$ – полином Лежандра, а (n, m) – порядки мультиполя [12]. Отметим [19], что оператор D^m_n возникает из представления поля мультипольного источника, записанного следующим образом: $h^{(2)}_n(kr)P^m_n(\cos\theta)\exp(-jm\varphi) = D^m_n h^{(2)}_0(kR_{MM_0})$, где $h^{(2)}_0$ – сферическая функция Ханкеля. Тогда, как было установлено, главная часть сечения экстинкции может быть представлена в виде

$$\sigma_{\mathrm{ext}} = -\mathrm{Re}\,[D^{m+}_n(\mathbf{E}^s_0(M)\cdot\boldsymbol{e})]_{M=M_0},$$

где D^{m+}_n – эрмитово-сопряжённый оператор по отношению к D^m_n. При этом рассеянное поле $\mathbf{E}^s_0$ является аналитической функцией всюду вне рассеивателя, поэтому взятие производных не представляет проблемы [16, с. 132]. В данном случае, основываясь на универсальной формуле для сечения экстинкции (13), можно обобщить полученный выше результат на случай возбуждения локального рассеивателя в присутствии прозрачной подложки произвольным мультиполем. В этом случае имеет место

Теорема 2. *В случае возбуждения локального рассеивателя, расположенного вблизи прозрачной подложки, мультиполем порядка* (n, m) *сечение экстинкции принимает вид*

$$C_{\mathrm{ext}} = -\mathrm{Re}\,[D^{m+}_n(\mathbf{E}^s_0(M)\cdot\boldsymbol{e})]_{M=M_0} + C^{\mathrm{mult}}_i, \tag{14}$$

где C^{mult}_i *– сечение излучения мультиполя в присутствии полупространства.*

Отметим, что именно это обстоятельство имелось ввиду под универсальностью формулы (13).

Замечание 2. В обоих случаях в формулировках (13), (14) точка M_0 в равной степени может находиться как в верхнем D_0, так и в нижнем D_1 полупространстве.

Заключение. Сформулируем основные результаты работы.

1. Для системы уравнений Максвелла с учётом эффекта нелокальности получено базовое соотношение для сечения экстинкции при возбуждении рассеивателя электрическим диполем в присутствии прозрачной подложки.

2. Получена универсальная формула, позволяющая определять сечение экстинкции, вычисляя рассеянное поле в одной единственной точке.

3. Проведено обобщение универсальной формулы на случай возбуждения мультиполем произвольного порядка, при этом мультиполь может располагаться как вблизи рассеивателя, так и внутри подложки.

4. Получена формула для расчёта квантового выхода флюоресценции, исключающая необходимость вычисления сечения поглощения для рассеивателя с эффектом нелокальности.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках реализации программы Московского центра фундаментальной и прикладной математики по соглашению № 075-15-2022-284.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Adhikari S., Orrit M.* Progress and perspectives in single-molecule optical spectroscopy // J. Chem. Phys. 2022. V. 156. P. 160903.
2. *Ugwuoke L.C., Mančal T., Krüger T.P.J.* Plasmonic quantum yield enhancement of a single molecule near a nanoegg // J. Appl. Phys. 2020. V. 127. P. 203103.
3. *Sui N., Wang L., Yan T., et al.* Selective and sensitive biosensors based on metal-enhanced fluorescence // Sensors and Actuators. B. 2014. V. 202. P. 1148–1153.
4. *Liaw J-W., Chen H-C., Kuo M-K.* Comparison of Au and Ag nanoshells' metal-enhanced fluorescence // J. Quantitat. Spectr. Radiat. Trans. 2014. V. 146. P. 321–330.
5. *Гришина Н.В., Еремин Ю.А., Свешников А.Г.* Метод дискретных источников для анализа усиления флюоресценции в присутствии плазмонных структур // Журн. вычислит. математики и мат. физики. 2016. Т. 5. № 1. С. 131–139.
6. *Tserkezis C., Stefanou N., Wubs M., Mortensen N.* Molecular fluorescence enhancement in plasmonic environments: exploring the role of nonlocal effects // Nanoscale. 2016. V. 8. P. 17532–17541.
7. *Еремин Ю.А., Свешников А.Г.* Математическая модель процессов флюоресценции с учетом квантового эффекта нелокального экранирования // Мат. моделирование. 2019. Т. 31. № 5. С. 85–102.
8. *Newton R.G.* Optical theorem and beyond // Am. J. Phys. 1976. V. 44. № 7. P. 639–642.
9. *Berg M.J., Sorensen C.M., Chakrabarti A.* Extinction and the optical theorem. Part I. Single particles // J. Opt. Soc. Am. A. 2008. V. 25. № 7. P. 1504–1513.
10. *Еремин Ю.А.* Обобщение оптической теоремы на основе интегро-функциональных соотношений // Дифференц. уравнения. 2007. Т. 43. № 9. С. 1168–1172.
11. *Small A., Fung J., Manoharan V.N.* Generalization of the optical theorem for light scattering from a particle at a planar interface // J. Opt. Soc. Am. A. 2013. V. 30. P. 2519–2525.
12. *Еремин Ю.А.* Обобщение оптической теоремы для мультиполя на основе интегральных преобразований // Дифференц. уравнения. 2017. Т. 53. № 9. С. 1156–1161.
13. *Jerez-Hanckes C., Nédélec J.C.* Asymptotics for Helmholtz and Maxwell solutions in 3-D open waveguides // Commun. Computat. Phys. 2012. V. 11. № 2. P. 629–646.
14. *Mortensen N.A., Raza S., Wubs M., Søndergaard T., Bozhevolnyi S.I.* A generalized non-local optical response theory for plasmonic nanostructures // Nat. Commun. 2014. V. 5. P. 3809.
15. *Ma C., Zhang Y., Zou J.* Mathematical and numerical analysis of a nonlocal Drude model in nanoplasmonics // arXiv:1906.04790v1 [math.NA]. 2019.
16. *Колтон Д., Кресс Р.* Методы интегральных уравнений в теории рассеяния. М., 1987.
17. *Дмитриев В.И., Захаров Е.В.* Метод интегральных уравнений в вычислительной электродинамике. М., 2008.
18. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике (для научных работников и инженеров). М., 1973.
19. *Devaney A.J., Wolf E.* Multipole expansions and plane wave representations of the electromagnetic field // J. Math. Phys. 1974. V. 15. P. 234–244.

Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова

Поступила в редакцию 25.08.2022 г.
После доработки 16.09.2022 г.
Принята к публикации 21.10.2022 г.