

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССОВ ФЛЮОРЕСЦЕНЦИИ С УЧЕТОМ КВАНТОВОГО ЭФФЕКТА НЕЛОКАЛЬНОГО ЭКРАНИРОВАНИЯ

© 2019 г. Ю.А. Еремин¹, А.Г. Сवेशников²

МГУ им. М.В. Ломоносова

¹Факультет вычислительной математики и кибернетики

²Физический факультет

eremin@cs.msu.ru, sveshnikov@phys.msu.ru

DOI: 10.1134/S023408791905006X

На основе метода дискретных источников разработана математическая модель, позволяющая проводить анализ процесса флюоресценции в присутствии плазмонной структуры с учетом эффекта нелокального экранирования. Показано, что квантовый выход плазмонной структуры может быть представлен в аналитическом виде, минуя процедуры интегрирования. Исследовано влияние эффекта на квантовый выход и коэффициент усиления флюоресценции в зависимости от геометрии плазмонной структуры. Показано, что учет эффекта нелокального экранирования приводит к сдвигу положения максимума в длинноволновую область и снижению амплитуды коэффициента усиления флюоресценции.

Ключевые слова: метод дискретных источников, рассеяние света, флюоресценция, плазмонный резонанс, эффект нелокального экранирования, квантовый выход, коэффициент усиления флюоресценции.

MATHEMATICAL MODEL OF FLUORESCENCE PROCESSES ACCOUNTING FOR THE QUANTUM EFFECT OF NON-LOCAL SCREENING

Yu.A. Eremin¹, A.G. Svshnikov²

Lomonosov Moscow State University

¹Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics

²Faculty of Physics

On the basis of the Discrete Sources Method, a mathematical model has been developed that enables to consider the fluorescence process in the presence of a plasmonic structure accounting for the nonlocal screening effect. It has been shown that the fluorescence quantum yield can be represented analytically. The influence of the effect on the quantum yield and the enhancement factor of fluorescence were investigated depending on the

geometry of the plasmonic structure. It has been demonstrated that accounting for the non-local screening effect leads to a blue shift in the position of the maximum and a decrease in the amplitude of a fluorescence enhancement factor.

Key words: discrete sources method, light scattering, fluorescence, plasmon resonance, non-local screening effect, quantum yield, fluorescence enhancement factor.

1. Введение

Один из наиболее интересных и актуальных разделов нанопотоники посвящен изучению физических явлений, связанных с возможностью управления световым излучением и получения сильных сфокусированных электромагнитных полей в масштабах нескольких атомов [1-3]. Такая фокусировка достигается посредством использования эффекта плазмонного резонанса (ПР). Важнейшим свойством плазмонов является их способность манипулировать светом, а именно – фокусировать его в отверстиях, зазорах между частицами или вблизи участков поверхностей с резким изменением профиля. В этом случае концентрация поля происходит в объемах, имеющих размеры в сотни раз меньше длины волны излучения, однако интенсивность электрического поля может достигать нескольких порядков величин [4,5]. Практика моделирования поведения ПР основана на классической электромагнитной теории Максвелла, в которой коллективное поведение электронов описывается в рамках эмпирических диэлектрических проницаемостей, а распределение электромагнитного поля описывается решением системы уравнений Максвелла. Подобный подход предсказывает монотонное возрастание электрического поля по мере уменьшения зазора между плазмонными частицами, что побуждает исследователей к разработке нанотехнологий для практической реализации плазмонных структур (ПС) с наноразмерными зазорами [6].

Кластеры плазмонных частиц с субнанометровыми зазорами оказываются весьма привлекательными составляющими ПС, поскольку они позволяют манипулировать как положением ПР, так и его амплитудой в широком диапазоне длин волн. В ряде работ было показано, что квантовомеханические эффекты, такие как нелокальное экранирование и туннелирование электронов, приобретают существенное значение по мере того, как размеры зазора в кластере существенно уменьшаются, приближаясь к шкале субнанометра. Учет возникающих при этом квантовых эффектов в значительной степени разрушает классическое описание поведения полей в подобных системах [7-9]. По мере того как размер зазора попадает в нанометровую и субнанометровую шкалу, квантовая природа электронов и нелокальное экранирование могут значительно изменять плазмонный отклик рассматри-

ваемой структуры [10,11]. В этом квантовом режиме оказывается, что классическое описание процессов не учитывает фактическую локализацию поверхностных зарядов, вызванных внешним электромагнитным полем. Сдвиг наведенных поверхностных зарядов внутрь относительно геометрических границ металла тесно связан с явлением нелокальности и приводит к экранированию зарядов внутри структуры [12,13]. Этот эффект может быть описан с использованием концепции нелокальных диэлектрических функций с различными уровнями сложности в имеющихся теоретических построениях [13,14].

Можно схематически проиллюстрировать влияние квантовых эффектов на электромагнитные свойства линейного кластера с различными величинами зазора. Размеры зазора до 2-5 нм соответствуют классическому режиму, для которого система уравнений Максвелла правильно описывает смещение ПР в длинноволновую область и величину его амплитуды при уменьшении зазора. Как только размер зазора становится меньше 2 нм, система переходит в квантовый режим, что требует более детального исследования. В данном диапазоне описанный выше эффект нелокального экранирования (ЭНЭ) выступает как доминирующий квантовый эффект. В этом случае поведение ПР качественно сходно с предсказаниями локальной классической модели, но возникают существенные количественные различия как в амплитуде ПР, так и его положении. Таким образом, для правильного количественного описания происходящих процессов и связанных с ними изменений в плазмонном отклике в диапазоне размеров менее 2 нм необходимо существенно учитывать ЭНЭ [6,14].

Проблема усиления флюоресценции за счет присутствия ПС вызывает значительный интерес у исследователей. Подобные эффекты находят применение в многочисленных практических приложениях, включая микроскопы сверхразрешения, биосенсоры высокой селективности и наноматрицы [15,16]. Особый интерес вызывает проблема усиления флюоресценции отдельных молекул, расположенных в непосредственной близости от ПС, в качестве которой рассматриваются как отдельные частицы сложной структуры, так и линейные кластеры плазмонных частиц с нанометровым зазором [17,18]. Сочетание флюоресценции молекул с плазмонным резонансом в присутствующей ПС является перспективным направлением исследований, направленных на обеспечение максимального усиления эффектов флюоресценции и рамановской спектроскопии [18,19]. Вместе с тем, поскольку ЭНЭ оказывает существенное влияние на амплитуду поля в зазоре, то анализ его влияния на процесс флюоресценции также может оказаться весьма заметным и требует детального исследования.

Большинство численных методов, используемых в плазмонике, можно разделить на две большие группы. Первая включает в себя методы, которые применимы непосредственно к системе уравнений Максвелла. Это метод конечных разностей во временной области (FDTD) [20], используемый непосредственно во временной области, и метод конечных элементов (FEM) [21], применяемый в частотной области. Метод FDTD является одним из самых популярных методов из-за его способности рассматривать широкий круг задач и легкости использования на большинстве типов компьютеров. В рамках FDTD как пространственные, так и временные производные в уравнениях Максвелла заменяются конечно-разностными аналогами и затем используются итерационные методы решения. Сравнительно недавно был предложен разрывный метод Галеркина (DGTD), который привлек внимание из-за простой адаптации к сложным геометриям, а также как обеспечивающий точности высокого порядка [22]. FEM – еще один популярный метод в нанофотонике, который позволяет вычислять электромагнитное поле в частотной области. В последние годы появился гибридный разрывный метод Галеркина (HDG), который представляется в качестве многообещающего численного метода для решения задач в частотной области, поскольку он вбирает в себя преимущества DGTD, а сложность вычислений сравнима с FEM [23]. Вместе с тем общим недостатком прямых методов является необходимость дискретизации окружающего пространства, а также формулировки условий, заменяющих собой условия излучения, которые не могут гарантировать одинаковую точность результатов во всем рассматриваемом частотном диапазоне.

Вторая группа методов – это численно-аналитические методы, использующие теорему Грина и сводящие решение внешней граничной задачи к функциональным соотношениям в области неоднородности. Они делятся на объемные методы, которые преобразуют уравнения Максвелла в интегральную форму для вычисления электромагнитного поля в объеме неоднородности. Наиболее популярные среди этих методов являются объемные интегральные уравнения (VIE) [24] и дискретная дипольная аппроксимация (DDA) [25]. Другим большим семейством численно-аналитических подходов являются поверхностные методы, которые лучше всего подходят для случая кусочно-однородных сред. Это поверхностные интегральные уравнения (SIE) [26], метод граничных элементов (BEM) [27], Т-матриц [28], метод множественных мультиполей (MMP) [29] и метод дискретных источников [30].

Для нанофотонных структур, состоящих из однородных плазмонных частиц, поверхностные методы представляются наиболее перспективными

[28-30]. Это связано с тем, что учет ЭНЭ требует решения векторного уравнения Гельмгольца с очень большим волновым числом, что существенно осложняет исследование оптических свойств ПС с учетом ЭНЭ [31,32]. Несмотря на имеющиеся работы, в которых подробно описывается численная схема анализа ПС с учетом ЭНЭ, большинство численных результатов получены лишь для случая 2D [33-35].

Метод дискретных источников (DSM) является численно-аналитическим поверхностно ориентированным методом, в котором электромагнитные поля строятся на основе линейных комбинаций полей дискретных источников (DS), расположенных внутри рассеивателя, амплитуды которых определяются из граничных условий, поставленных на поверхностях ПС. По сравнению с другими поверхностными подходами численная схема DSM имеет целый ряд преимуществ: (I) не требует генерации сеток или процедуры интегрирования по поверхности ПС, (II) обеспечивает получение как ближнего, так и дальнего полей в явной аналитической форме, (III) решает задачу рассеяния для всего набора внешних возбуждений и поляризаций одновременно, (IV) дает возможность рассматривать частицы с высокими показателями преломления, обеспечивая различное число DS для представлений внешних и внутренних полей, (V) обладает уникальной возможностью оценивать погрешность вычислений посредством вычисления невязки полей на поверхности неоднородности [36]. Компьютерные модули на базе DSM отличаются низкой потребностью в ресурсах, гибкостью и простотой в использовании. Эти преимущества уже продемонстрировали, что DSM возможно использовать для анализа плазмонных частиц с учетом эффекта нелокальности [31,32].

2. Математическая модель задачи рассеяния с учетом эффекта нелокального экранирования

Будем рассматривать рассеяние поля электромагнитной плоской волны $\{\mathbf{E}_0, \mathbf{H}_0\}$ линейным кластером, состоящим из двух проницаемых осесимметричных частиц с внутренними областями $D_{1,2}$, расположенных в R^3 . Пусть частицы имеют гладкие поверхности $\partial D_{1,2} \in C^{(2,\alpha)}$, а плоская волна распространяется под углом $\pi - \theta_0$ по отношению к оси симметрии кластера OZ. Тогда математическая постановка задачи рассеяния с учетом ЭНЭ может быть записана в следующем виде:

$$\operatorname{rot} \mathbf{H}_e = jk\varepsilon_e \mathbf{E}_e; \quad \operatorname{rot} \mathbf{E}_e = -jk\mu_e \mathbf{H}_e \quad \text{в } D_e := R^3 / \overline{D_1 \cup D_2};$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{H}_i = jk(\varepsilon_i + \eta^2 \operatorname{graddiv})\mathbf{E}_i(M); \quad \operatorname{rot} \mathbf{E}_i = -jk\mu_i \mathbf{H}_i \quad \text{в } D_i, \quad i=1,2;$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{n}_{1,2} \times (\mathbf{E}_{1,2}(P) - \mathbf{E}_e(P)) &= \mathbf{n}_{1,2} \times \mathbf{E}_0(P), \\
\mathbf{n}_{1,2} \times (\mathbf{H}_{1,2}(P) - \mathbf{H}_e(P)) &= \mathbf{n}_{1,2} \times \mathbf{H}_0(P), \quad P \in \partial D_{1,2}, \\
\varepsilon_L \mathbf{n}_{1,2} \cdot \mathbf{E}_{1,2}(P) &= \varepsilon_e \mathbf{n}_{1,2} \cdot (\mathbf{E}_0(P) + \mathbf{E}_e(P));
\end{aligned} \tag{1}$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r \cdot \left(\sqrt{\varepsilon_e} \mathbf{E}_e \times \frac{\mathbf{r}}{r} - \sqrt{\mu_e} \mathbf{H}_e \right) = 0, \quad r = |M| \rightarrow \infty,$$

где $\{\mathbf{E}_e, \mathbf{H}_e\}$ – рассеянное поле в D_e , $\{\mathbf{E}_i, \mathbf{H}_i\}$, $i = 1, 2$ – полные поля внутри каждой частицы, $\mathbf{n}_{1,2}$ – единичные нормали к поверхностям $\partial D_{1,2}$, кроме того, внутренние электрические поля включают в себя поперечные и продольные поля, а именно $\mathbf{E}_i = \mathbf{E}_i^T + \mathbf{E}_i^L$, $\operatorname{div} \mathbf{E}_i^T = 0$, $\operatorname{rot} \mathbf{E}_i^L = 0$, $k = \omega/c$, а характеристики среды выбраны таким образом, что $\operatorname{Im} \varepsilon_e, \mu_e = 0$, $\operatorname{Im} \varepsilon_i, \mu_i \leq 0$, $\operatorname{Im} \varepsilon_L \leq 0$. При этом предполагается, что временная зависимость выбрана в виде $\exp\{j\omega t\}$.

Из постановки задачи (1) непосредственно следует, что продольная компонента поля локализована строго внутри частицы и не вносит вклад в магнитное поле \mathbf{H}_i , так как $\operatorname{rot}(\operatorname{grad} \Psi) = 0$. Наличие продольного поля \mathbf{E}_i^L , подлежащего определению, требует дополнительного граничного условия. Оно формулируется как обращение в нуль нормальной компоненты тока проводимости $(\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}) = 0$ на поверхностях $\partial D_{1,2}$. Это условие затем легко трансформируется в скачок нормальной компоненты поля \mathbf{E} , на $\partial D_{1,2}$. Параметры η и ε_L , входящие в (1) и описывающие продольную составляющую поля \mathbf{E}_i^L , будут определены ниже.

3. Вычислительная схема метода дискретных источников

Для решения задачи дифракции (1) будем использовать МДИ [31,32]. Следуя [31], будем строить приближенное решение отдельно для каждой поляризации. В нашем случае поле P/S поляризованной волны может быть записано как

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}_0^P &= (\mathbf{e}_x \cos \theta_0 + \mathbf{e}_z \sin \theta_0) \cdot \gamma, \quad \mathbf{H}_0^P = -\mathbf{e}_y n_e \cdot \gamma; \\
\gamma &= \exp\{-jk_e(x \sin \theta_0 - z \cos \theta_0)\}, \\
\mathbf{H}_0^S &= (\mathbf{e}_x \cos \theta_0 + \mathbf{e}_z \sin \theta_0) \cdot \gamma, \quad \mathbf{E}_0^S = \mathbf{e}_y n_e \cdot \gamma; \quad n_e = \sqrt{\varepsilon_e \mu_e}, \quad k_e = k \cdot n_e.
\end{aligned} \tag{2}$$

В основу представления для внешнего рассеянного $\{\mathbf{E}_e, \mathbf{H}_e\}$ и внутреннего

$\{\mathbf{E}_i^T, \mathbf{H}_i\} : \text{div} \mathbf{E}_i^T = 0; i=1,2$ полей положим следующие векторные потенциалы:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{mn}^{1,e,i} &= \{Y_m^{e,i}(\xi, z_n^{e,i}) \cos(m+1)\varphi; -Y_m^{e,i}(\xi, z_n^{e,i}) \sin(m+1)\varphi; 0\}, \\ \mathbf{A}_{mn}^{2,e,i} &= \{Y_m^{e,i}(\xi, z_n^{e,i}) \sin(m+1)\varphi; Y_m^{e,i}(\xi, z_n^{e,i}) \cos(m+1)\varphi; 0\}, \\ \mathbf{A}_n^{3,e,i} &= \{0; 0; Y_0^{e,i}(\xi, z_n^{e,i})\}. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $Y_m^e(\xi, z_n^e) = h_m^{(2)}(k_e R_{\xi z_n^e})(\rho / R_{\xi z_n^e})^m$, $Y_m^i(\xi, z_n^i) = j_m(k_i R_{\xi z_n^i})(\rho / R_{\xi z_n^i})^m$, $\xi = (\rho, z)$ – точка в полуплоскости $\varphi = \text{const}$, $R_{\xi z_n^{e,i}}^2 = \rho^2 + (z - z_n^{e,i})^2$, $h_m^{(2)}$ – сферическая функция Ханкеля, j_m – сферическая функция Бесселя, $k_{e,i} = k \sqrt{\varepsilon_{e,i} \mu_{e,i}}$, $\{z_n^{e,i}\}_{n=1}^{N_{e,i}}$ – координаты дискретных источников, расположенных на оси OZ строго внутри частиц $D_{1,2}$.

Для построения приближенного решения необходимо определить значения диэлектрической проницаемости ε_L и продольного волнового числа k_L . С учетом ЭНЭ ε_L определяются как $\varepsilon_L = \varepsilon_i(\omega) - \omega_p^2 / (j\gamma\omega - \omega^2)$, где $\varepsilon_i(\omega)$ – эмпирическая диэлектрическая проницаемость металла с учетом частотной дисперсии, ω_p – плазменная частота металла, γ – коэффициент затухания [14]. Скалярный потенциал для продольного поля удовлетворяет следующему уравнению Гельмгольца: $(\nabla^2 + k_L^2)\Psi(M) = 0$, а величина продольного волнового числа определяется как $k_L^2 = \varepsilon_i(\omega) / \eta^2$. При этом в рамках обобщенного нелокального отклика η представляется в следующем виде: $\eta^2 = \varepsilon_L(\beta^2 + D(\gamma + j\omega)) / (\omega^2 - j\gamma\omega)$. Здесь β – гидродинамическая скорость в плазме, связанная со скоростью Ферми v_F соотношением $\beta^2 = 3 / 5v_F^2$, D – коэффициент диффузии электронов [14]. Отметим, что при $\beta \rightarrow 0, D \rightarrow 0$ поле внутри частицы становится чисто поперечным, так как $k_L \rightarrow \infty \Rightarrow \Psi \rightarrow 0$.

Для случая Р-поляризации продольное поле строится на основе следующих скалярных потенциалов, представляющих собой частные решения уравнения Гельмгольца с нелокальным волновым числом $(\nabla^2 + k_L^2)\Psi_{mn}(M) = 0$:

$$\begin{aligned}\Psi_{mn}^P(M) &= j_{m+1}(k_L R_{\xi z_n})(\rho / R_{\xi z_n})^{m+1} \cos(m+1)\varphi, \quad m = 0, 1, \dots, M, \\ \Psi_n(M) &= j_0(k_L R_{\xi z_n}), \quad n = 1, 2, \dots, N_L.\end{aligned}\quad (4)$$

Таким образом, приближенное решение в рамках МДИ для Р-поляризованной плоской волны (2) может быть представлено в следующем виде:

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_{e,i}^N &= \sum_{m=0}^M \sum_{n=1}^{N_{e,i}^m} \left\{ p_{mn}^{e,i} \frac{j}{k \varepsilon_{e,i} \mu_{e,i}} \text{rotrot} \mathbf{A}_{mn}^{1,e,i} + q_{mn}^{e,i} \frac{1}{\varepsilon_{e,i}} \text{rot} \mathbf{A}_{mn}^{2,e,i} \right\} + \\ &+ \sum_{n=1}^{N_{e,i}^0} r_n^{e,i} \frac{j}{k \varepsilon_{e,i} \mu_{e,i}} \text{rotrot} \mathbf{A}_n^{3,e,i}; \\ \mathbf{E}_i^{LN} &= \sum_{m=0}^M \sum_{n=1}^{N_L^m} p_{mn}^{L,i} \nabla \Psi_{mn}^P(M) + \sum_{n=1}^{N_L^0} r_n^{L,i} \nabla \Psi_n(M); \quad i = 1, 2; \\ \mathbf{H}_{e,i}^N &= \frac{j}{k \mu_e} \text{rot} \mathbf{E}_{e,i}^N.\end{aligned}\quad (5)$$

В случае S-поляризации скалярный потенциал для продольного поля выбирается в виде

$$\Psi_{mn}^S(M) = j_{m+1}(k_L R_{\xi z_n})(\rho / R_{\xi z_n})^{m+1} \sin(m+1)\varphi. \quad (6)$$

Тогда приближенное решение для S-поляризации может быть записано как

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_{e,i}^N &= \sum_{m=0}^M \sum_{n=1}^{N_{e,i}^m} \left\{ p_{mn}^{e,i} \frac{j}{k \varepsilon_{e,i} \mu_{e,i}} \text{rotrot} \mathbf{A}_{mn}^{2,e,i} + q_{mn}^{e,i} \frac{1}{\varepsilon_{e,i}} \text{rot} \mathbf{A}_{mn}^{1,e,i} \right\} + \\ &+ \sum_{n=1}^{N_{e,i}^0} r_n^{e,i} \frac{1}{\varepsilon_{e,i}} \text{rot} \mathbf{A}_n^{3,e,i}; \\ \mathbf{E}_i^{LN} &= \sum_{m=0}^M \sum_{n=1}^{N_L^m} p_{mn}^{L,i} \nabla \Psi_{mn}^S(M); \quad \mathbf{H}_{e,i}^N = \frac{j}{k \mu_e} \text{rot} \mathbf{E}_{e,i}^N.\end{aligned}\quad (7)$$

Сравнивая представления (5) и (7), замечаем отсутствие вклада продольного поля \mathbf{E}_i^{LN} в не зависящую от φ гармонику. Это является следствием того обстоятельства, что в этом случае присутствует лишь азимутальная компонента электрического поля $\mathbf{E} - E_\varphi$.

Подставляя представления для полей (5), (7) в (1), легко убедиться, что они аналитически удовлетворяют всем условиям граничной задачи (1), за

исключением условий сопряжения на поверхностях частиц $\partial D_{1,2}$. Используя условия сопряжения для полей, получаем для определения неизвестных амплитуд ДИ следующие соотношения:

$$\begin{aligned}
 & \mathbf{n}_{1,2} \times \int_0^{2\pi} \left(\mathbf{E}_{1,2}^{N\perp}(\xi_l, \varphi) + \mathbf{E}_{1,2}^{NL}(\xi_l, \varphi) - \mathbf{E}_e^N(\xi_l, \varphi) \right) e^{-jm\varphi} d\varphi = \\
 & = \mathbf{n}_{1,2} \times \int_0^{2\pi} \mathbf{E}_0(\xi_l, \varphi) e^{-jm\varphi} d\varphi, \\
 & \mathbf{n}_{1,2} \times \int_0^{2\pi} \left(\mathbf{H}_{1,2}^N(\xi_l, \varphi) - \mathbf{H}_e^N(\xi_l, \varphi) \right) e^{-jm\varphi} d\varphi = \\
 & = \mathbf{n}_{1,2} \times \int_0^{2\pi} \mathbf{H}_0(\xi_l, \varphi) e^{-jm\varphi} d\varphi, \quad l=1, \dots, K; \quad m=1, \dots, M, \\
 & \mathbf{n}_{1,2} \cdot \int_0^{2\pi} \left(\varepsilon_L \mathbf{E}_{1,2}^{N\perp}(\xi_l, \varphi) + \varepsilon_L \mathbf{E}_{1,2}^{NL}(\xi_l, \varphi) - \varepsilon_e \mathbf{E}_e^N(\xi_l, \varphi) \right) e^{-jm\varphi} d\varphi = \\
 & = \varepsilon_e \mathbf{n}_{1,2} \cdot \int_0^{2\pi} \mathbf{E}_0(\xi_l, \varphi) e^{-jm\varphi} d\varphi.
 \end{aligned} \tag{8}$$

Схема вычислительного алгоритма определения неизвестных амплитуд ДИ $\{p_{mn}^{e,i}, p_{mn}^{L,i}, q_{mn}^{e,i}, r_n^{e,i}, r_n^{L,i}\}$ заключается в использовании обобщенного метода коллокаций [38]. Точки коллокаций $\{\xi_l\}_{l=1}^K$ равномерно покрывают образующие поверхностей вращения $\partial D_{1,2}$, а число источников выбирается так, чтобы линейная система для каждой фурье-гармоники оказывалась переопределенной $10K > 4(N_e + N_i) + 2N_L$. Далее проводится QR факторизация матриц и последовательное псевдорешение систем для каждой гармоники для всего набора углов падения волны θ_0 [39]. При необходимости вычисляется невязка граничных условий в промежуточных точках по отношению к точкам коллокаций.

Определив амплитуды ДИ, легко вычислить θ, φ компоненты диаграммы направленности рассеянного поля $\mathbf{F}(\theta, \varphi)$ на единичной сфере $\Omega = \{0 \leq \theta \leq \pi; 0 \leq \varphi \leq 2\pi\}$

$$\mathbf{E}_e(M) / |\mathbf{E}_0(M)| = \frac{\exp\{-jk_e r\}}{r} \mathbf{F}(\theta, \varphi) + o(r^{-1}), \quad r = |M| \rightarrow \infty.$$

Для случая Р-поляризации они принимают следующий вид:

$$\begin{aligned}
F_{\theta}^P(\theta, \varphi) &= jk_e \sum_{m=0}^M (j \sin \theta)^m \cos \{(m+1)\varphi\} \sum_{n=1}^{N_e^m} \{p_{mn}^e \cos \theta + q_{nm}^e\} \exp \{-jk_e w_n^e \cos \theta\} - \\
&- jk_e \sin \theta \sum_{n=1}^{N_e^0} r_n^e \exp \{-jk_e w_n^e \cos \theta\}, \\
F_{\varphi}^P(\theta, \varphi) &= \\
&= -jk_e \sum_{m=0}^M (j \sin \theta)^m \sin \{(m+1)\varphi\} \sum_{n=1}^{N_e^m} \{p_{mn}^e + q_{nm}^e \cos \theta\} \exp \{-jk_e w_n^e \cos \theta\}.
\end{aligned} \tag{9}$$

Совершенно аналогично компоненты диаграммы для случая S-поляризации будут

$$\begin{aligned}
F_{\theta}^S(\theta, \varphi) &= jk_e \sum_{m=0}^M (j \sin \theta)^m \sin \{(m+1)\varphi\} \sum_{n=1}^{N_e^m} \{p_{mn}^e \cos \theta - q_{nm}^e\} \exp \{-jk_e w_n^e \cos \theta\}, \\
F_{\varphi}^S(\theta, \varphi) &= jk_e \sum_{m=0}^M (j \sin \theta)^m \cos \{(m+1)\varphi\} \sum_{n=1}^{N_e^m} \{p_{mn}^e \cos \theta - q_{nm}^e\} \exp \{-jk_e w_n^e \cos \theta\} + \\
&+ jk_e \sin \theta \sum_{n=1}^{N_e^0} r_n^e \exp \{-jk_e w_n^e \cos \theta\}.
\end{aligned} \tag{10}$$

Как следует из (9),(10), компоненты диаграммы направленности представляют собой комбинации элементарных функций, что весьма облегчает вычисления.

4. Численные результаты

Нас будет интересовать сечение рассеяния, которое представляет собой суммарную интенсивность рассеянного поля

$$C_{scs}^{P,S}(\lambda) = \int_{\Omega} DSC^{P,S}(\lambda, \theta, \varphi) d\omega. \tag{11}$$

Здесь DSC на единичной сфере $\Omega = \{0 \leq \theta \leq \pi; 0 \leq \varphi \leq 2\pi\}$ определяется как

$$DSC^{P,S}(\lambda, \theta, \varphi) = |F_{\theta}^{P,S}(\lambda, \theta, \varphi)|^2 + |F_{\varphi}^{P,S}(\lambda, \theta, \varphi)|^2, \text{ размерность DSC} - \mu\text{м}^2.$$

В качестве вещества частиц, расположенных в воде ($\sqrt{\varepsilon_e} = 1.33$), будем рассматривать золото (Au), для которого соответствующие параметры, необходимые для определения величин k_L и ε_L , принимают значения $\hbar\omega_p = 9.02\text{eV}$, $\hbar\gamma = 0.071\text{eV}$, $v_F = 1.39\mu\text{м}/\text{sec}$, $D = 1.90 \times 10^8 \mu\text{м}^2/\text{sec}$ [14]. Задавая длину волны внешнего возбуждения λ , вычисляя соответствующее зна-

чение ω , легко определить значения нелокальных параметров k_L и ε_L по приведенным выше формулам. Величина диэлектрической проницаемости для золота $\varepsilon_i(\omega)$ определялась с учетом частотной дисперсии [40].

Как известно [18], анализ процесса флюоресценции состоит из двух этапов. На первом этапе решается задача рассеяния плоской волны (1) на заданной плазмонной структуре. При этом определяется интенсивность поля в заданной точке, например, в зазоре между частицами. На втором этапе решается задача взаимодействия эмиттера – электрического диполя (модель флюоресцирующей молекулы), помещенного в зазоре, с заданной плазмонной структурой.

Будем использовать изложенную выше схему МДИ для расчета интенсивности поля в точке $M_0 = (0, 0, 0)$ в промежутке между двумя вытянутыми сфероидальными частицами. Как уже отмечалось ранее, на первом этапе необходимо вычислять относительную интенсивность поля в этой точке. Будем обозначать полное поле как $\mathbf{E} = \mathbf{E}_e + \mathbf{E}_0$, тогда

$$I(M_0, \lambda) = |\mathbf{E}(M_0, \lambda)|^2 / |\mathbf{E}_0(M_0, \lambda)|^2. \quad (12)$$

Как только электрический диполь возбуждается, он начинает взаимодействовать с имеющейся ПС и возникает потребность перехода ко второй стадии – стадии эмиссии. На стадии эмиссии решается задача возбуждения заданной ПС электрическим диполем, располагающимся в точке M_0 . В данном случае в качестве источника внешнего возбуждения используется ток вида $\mathbf{J}_0 = \mathbf{e}_0 \delta(M - M_0)$. При этом в граничной задаче (1) изменяется уравнение Максвелла для внешнего поля, которое приобретает вид $\text{rot } \mathbf{H}_e^0 = jk\varepsilon_e \mathbf{E}_e^0 + \mathbf{J}_0$. В этом случае граничная задача формулируется для полного поля $\{\mathbf{E}_e^0, \mathbf{H}_e^0\}$, которое дополнительно удовлетворяет условию излучения. Основной характеристикой, которую предстоит вычислять на этой стадии, является квантовый выход [18]. Для его расчета нам потребуется определить сечение излучения электрического диполя в присутствии данной ПС, которое имеет вид

$$C_{scs}(M_0, \lambda_{em}) = \text{Re} \int_{S_0} \mathbf{E}_e^0 \times \mathbf{H}_e^{0*} \cdot d\mathbf{s}. \quad (13)$$

Здесь λ_{em} – длина волны эмиссии, S_0 – произвольная гладкая замкнутая поверхность, заключающая диполь и ПС целиком внутри себя. Соотноше-

ние (13) фактически представляет собой сечение излучения диполя с учетом ПС, в котором поверхность S_0 можно заменить единичной сферой. Кроме того, определяется сечение поглощения

$$C_{abs}(M_0, \lambda_{em}) = -\text{Re} \int_{\partial D_1 \cup \partial D_2} \mathbf{E}_e^0 \times \mathbf{H}_e^{0*} \cdot d\mathbf{s}. \quad (14)$$

Квантовый выход определяется теперь как

$$\zeta(M_0, \lambda_{em}) = C_{scs} / (C_{scs} + C_{abs}). \quad (15)$$

Как показано в [37], знаменатель формулы (15) представляет собой не что иное, как обобщенное сечение экстинкции $C_{ext} = C_{scs} + C_{abs}$. Сечение экстинкции в данном случае может быть вычислено в явном виде, на основе обобщения оптической теоремы для сингулярного источника, а именно

$$C_{ext} = -\text{Re}(\mathbf{E}_e^{0s}(M_0) \cdot \mathbf{e}_0) + \frac{8\pi}{3} k_e^2, \quad (16)$$

где $\mathbf{E}_e^{0s}(M_0)$ – рассеянное поле в точке расположения электрического диполя.

На первом этапе будем оценивать влияние ЭНЭ на интенсивность поля в средней точке зазора между частицами. В качестве формы частиц будем рассматривать вытянутые сфероиды, задавая в качестве исходных параметров их эквиобъемный диаметр $D = 15$ нм и соотношение осей $r = b/a$, $b > a$ и расстояние d между сфероидами. Как было установлено в [41], наибольшая интенсивность в промежутке между плазмонными частицами возникает при падении плоской волны перпендикулярно оси симметрии ($\theta_0 = 90^\circ$) и для Р-поляризации. Таким образом, на первом этапе мы будем рассматривать именно этот случай.

На рис.1 приведены результаты расчета интенсивности $I(\lambda)$ по формуле (12) в точке M_0 для сфероидов $r = 2$ в зависимости от расстояния d между ними. Видно, что при уменьшении зазора интенсивность возрастает и слегка сдвигается вправо (LRA). Кроме того, учет ЭНЭ (NLE) приводит к снижению величины максимума и небольшому сдвигу в сторону коротких волн. На рис.2 изображена интенсивность для сфероидов с зазором $d = 5$ нм при различных соотношениях осей. Видно, что при увеличении вытянутости интенсивность растет и сдвигается в сторону длинных волн. При этом учет ЭНЭ снова приводит к уменьшению максимума и сдвигу в сторону коротких волн. Отметим, что при возрастании r это уменьшение нарастает.

При этом очевидно, что увеличение вытянутости сфероидов оказывает даже большее влияние, чем уменьшение зазора и может служить своего рода альтернативой к уменьшению зазора. Более детальный анализ вклада различных фурье-гармоник в интенсивность показал, что доминирующим является вклад, не зависящей от ϕ -гармоники, интенсивность которой на несколько порядков превосходит остальные. В последнем случае диаграмма излучения диполя с учетом взаимодействия с ПС (9) может быть записана в виде

$$F_{\theta}^P(\theta) = -jk_e \sin \theta \sum_{n=0}^{N_e^0} r_n^e \exp\{-jk_e z_n^e \cos \theta\}, \quad M_0 = (0, 0, 0), \quad r_0^e = 1. \quad (17)$$

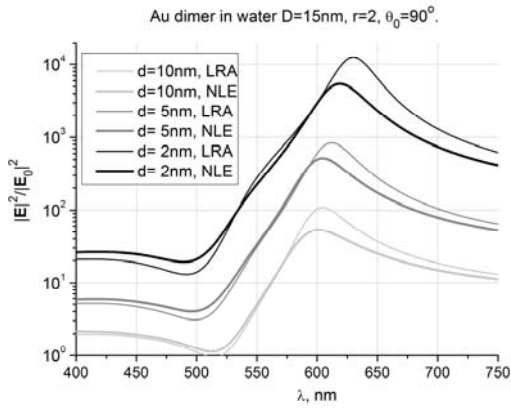


Рис.1. $I(\lambda)$ из (12) в зависимости от длины возбуждающей волны λ для пары Au сфероидов $D=15$ нм, с соотношением осей $r=2$, угол падения плоской волны $\theta_0 = 90^\circ$ при различных величинах d . Кривая 1 – $d = 10$ нм без учета ЭНЭ; 2 – с учетом ЭНЭ; 3 – $d = 5$ нм без ЭНЭ; 4 – с ЭНЭ; 5 – $d = 2$ нм без ЭНЭ; 6 – с ЭНЭ.

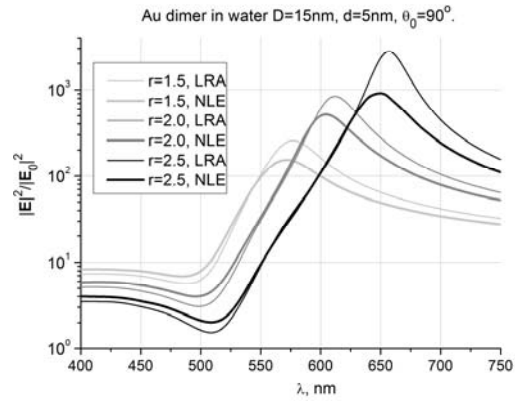


Рис.2. $I(\lambda)$ в зависимости от λ для Au сфероидов $D=15$ нм, угол падения $\theta_0=90^\circ$ и $d=5$ нм при различных соотношениях осей сфероидов r . Кривая 1 – $r=1.5$ без ЭНЭ; 2 – с ЭНЭ; 3 – $r=2.0$ без ЭНЭ; 4 – с ЭНЭ; 5 – $r=2.5$ без ЭНЭ; 6 – с ЭНЭ.

Тогда сечение излучения (13) принимает вид

$$C_{scs} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi |F_{\theta}^P|^2 \sin \theta d\theta = 2\pi \sum_{n=0, l=0}^{N_e^0} r_n r_l^* \int_{-1}^1 (1-x^2) \exp\{-jk_e(z_n - z_l)x\} dx =$$

$$= 2\pi k_e^2 \sum_{n=0, l=0}^{N_e^0} I_{nl} r_n r_l^*, \quad (18)$$

$$\text{где } I_{nl} := \begin{cases} 4 \cos(\gamma_{nl}) / \gamma_{nl}^2 - 4j \sin(\gamma_{nl}) / \gamma_{nl}^3, & n \neq l, \quad \gamma_{nl} = -jk_e(z_n - z_l); \\ 4/3, & n = l. \end{cases}$$

Таким образом, окончательно получаем квантовый выход (15) в аналитическом виде, то есть $\zeta(M_0, \mathbf{e}_0; \lambda_{em}) = C_{scs} / C_{ext}$, где C_{ext} из (15) и C_{scs} из (18), минуя процедуру интегрирования как по поверхности частиц, так и по единичной сфере.

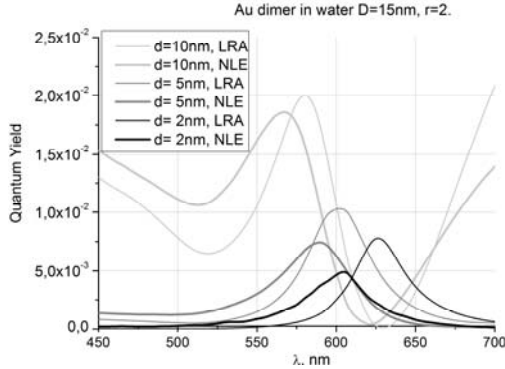


Рис.3. $\zeta(\lambda)$ (15), соотношение осей $r=2$,

$\theta_0 = 90^\circ$ при различных величинах зазора d . Кривая 1 – $d=10$ нм без учета ЭНЭ; 2 – с учетом ЭНЭ; 3 – $d=5$ нм без ЭНЭ; 4 – с ЭНЭ; 5 – $d=2$ нм без ЭНЭ; 6 – с ЭНЭ.

Перейдем к анализу результатов квантового выхода ПС. На рис.3 приведены расчеты квантового выхода $\zeta(\lambda)$ для сфероидов $r = 2$ в зависимости от длины волны и различных значений зазора d . Видно, что при уменьшении зазора максимум $\zeta(\lambda)$ уменьшается и заметно сдвигается вправо. Учет наличия ЭНЭ приводит к снижению величины максимума и сдвигу в сторону коротких волн, причем этот сдвиг оказывается весьма существенным и нарастает по мере уменьшения зазора. На рис.4 изображено поведение $\zeta(\lambda)$ для случая $d = 5$ нм при различных значениях r . При увеличении вытянутости максимум $\zeta(\lambda)$ растет и сдвигается вправо. При этом учет ЭНЭ снова приводит к уменьшению максимума и сдвигу в сторону коротких волн, а также при возрастании r разница между LRA и NLE нарастает.

Другим важным параметром, характеризующим собственно процесс флюоресценции, является коэффициент усиления флюоресценции за счет присутствия ПС, который определяется следующим образом:

$$\alpha(M_0, \lambda) = I(M_0, \lambda) \cdot \zeta(M_0, \lambda). \quad (19)$$

Рассмотрим результаты расчета коэффициента усиления процесса флюоресценции за счет ПС. На рис.5 приведены значения $\alpha(\lambda)$ из (19) для слу-

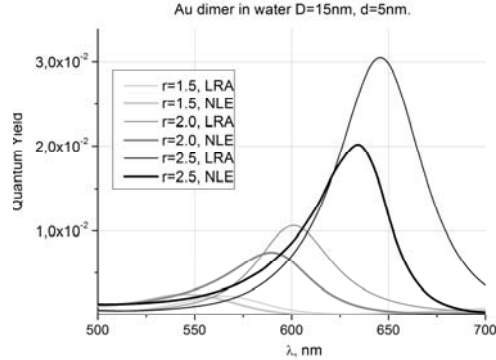


Рис.4. $\zeta(\lambda)$ $d=5$ нм при различных значениях r . Кривая 1 – $r=1.5$ без ЭНЭ; 2 – с ЭНЭ; 3 – $r=2.0$ без ЭНЭ; 4 – с ЭНЭ; 5 – $r=2.5$ без ЭНЭ; 6 – с ЭНЭ.

чая $r = 2$ и различных значений зазора d . Несмотря на весьма причудливое поведение квантового выхода для случая $d = 10$ нм (см. рис.3), результаты для $\alpha(\lambda)$ оказываются весьма логичными. Вместе с тем, различие в амплитудах LRA и NLE нарастает по мере уменьшения зазора. Для $d = 2$ нм оно составляет почти порядок величин. Отметим, что $d = 2$ нм уже соответствует квантовой области, в которой влияние ЭНЭ оказывается весьма существенным. На рис.6 изображено поведение $\alpha(\lambda)$ для случая $d = 5$ нм при различных вытянутостях r . При увеличении r максимум $\alpha(\lambda)$ растет и сдвигается вправо. При этом учет ЭНЭ снова приводит к снижению максимума и сдвигу в сторону коротких волн. Вместе с тем, снижение максимума не такое заметное, как при величине зазора $d = 2$ нм.

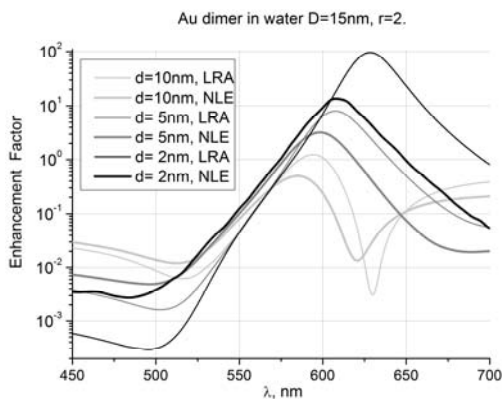


Рис.5. $\alpha(\lambda)$: (19) $r=2$, при различных величинах зазора d . Кривая 1 – $d = 10$ нм без учета ЭНЭ; 2 – с учетом ЭНЭ; 3 – $d = 5$ нм без ЭНЭ; 4 – с ЭНЭ; 5 – $d = 2$ нм без ЭНЭ; 6 – с ЭНЭ.

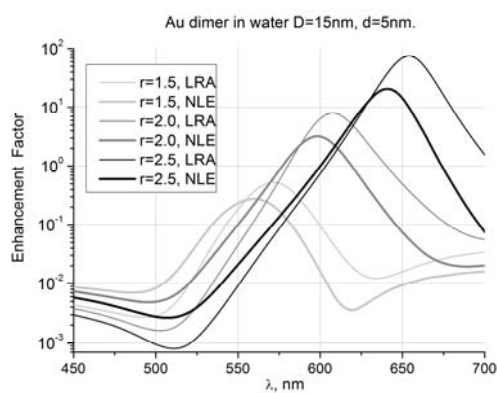


Рис.6. $\alpha(\lambda)$ $d = 5$ нм при различных значениях r . Кривая 1 – $r = 1.5$ без ЭНЭ; 2 – с ЭНЭ; 3 – $r = 2.0$ без ЭНЭ; 4 – с ЭНЭ; 5 – $r = 2.5$ без ЭНЭ; 6 – с ЭНЭ.

Заключение

На основе метода дискретных источников разработана и реализована математическая модель, позволяющая проводить анализ процесса флюоресценции в присутствии плазмонной структуры с учетом эффекта нелокального экранирования. Показано, что квантовый выход флюоресценции может быть представлен в аналитическом виде, минуя процедуру интегрирования как по поверхности структуры, так и по единичной сфере. Исследовано влияние эффекта на квантовый выход плазмонной структуры и коэффициент усиления флюоресценции в зависимости от геометрических составляющих структуры. Показано, что учет наличия эффекта нелокального

экранирования приводит к сдвигу положения максимума в длинноволновую область и снижению амплитуды как квантового выхода, так и коэффициента усиления флуоресценции. Установлено, что увеличение вытянутости элементов линейного кластера оказывает такое же влияние, как и уменьшение зазора, и может служить альтернативой стремлению к уменьшению зазора.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.

1. *Maier S.A.* Плазмоника. Теория и приложения. – М.– Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2011;
Maier S.A. Plasmonics: Fundamentals and Applications. – Springer Science +Business Media LLC, 2007.
2. *Климов В.В.* Наноплазмоника. – М.: Физматлит, 2009;
Klimov V.V. Nanoplasmonika. – М.: Fizmatlit, 2009.
3. *Новотный Л., Хехт Б.* Основы нанооптики. – М. Физматлит, 2009;
Novotny L., Hecht B. Principles of Nano-Optics. – Cambridge University Press, 2006.
4. *Duan H., Fernández-Domínguez A.I., Bosman M., Maier S.A., Yang J.K.W.* Nanoplasmonics: classical down to the nanometer scale // *Nano Lett.*, 2012, v.12, p.1683-1689.
5. *Kern J., Großmann S., Tarakina N.V., Häcke T. et al.* Atomic-scale confinement of resonant optical fields // *Nano Lett.*, 2012, v.12, p.5504-5509.
6. *Zhu W., Esteban R., Borisov A.G., Baumberg J.J. et al.* Quantum mechanical effects in plasmonic structures with subnanometre gaps // *Review. Nature Commun.*, 2016, v.7, N11495.
7. *García de Abajo F.J.J.* Nonlocal effects in the plasmons of strongly interacting nanoparticles, dimers, and waveguides // *Phys. Chem., C.* 2008, v.112, p.17983-17987.
8. *Toscano G., Raza S., Jauho A., Mortensen N.A., Wubs M.* Modified field enhancement and extinction by plasmonic nanowire dimers due to nonlocal response // *Opt. Express*, 2012, v.20, p.4176-4188.
9. *Stella L., Zhang P., García-Vidal F.J., Rubio A., García-González P.* Performance of nonlocal optics when applied to plasmonic nanostructures // *J. Phys. Chem., C.* 2013, v.117, p.8941-8949.
10. *Ciraci C., Hill R.T., Mock J.J., Urzhumov Y. et al.* Probing the ultimate limits of plasmonic enhancement // *Science*, 2012, v.337, p.1072-1074.
11. *Bochterle J., Neubrech F., Nagao T., Pucci A.* Angstrom-scale distance dependence of antenna-enhanced vibrational signals // *ACS Nano*, 2012, v.6, p.10917-10923.
12. *Teperik T.V., Nordlander P., Aizpurua J., Borisov A.G.* Robust subnanometric plasmon ruler by rescaling of the nonlocal optical response // *Phys. Rev. Lett.*, 2013, v.110, N263901.
13. *Toscano G., Straubel J., Kwiatkowski A., Rockstuhl C. et al.* Resonance shifts and spill-out effects in self-consistent hydrodynamic nanoplasmonics // *Nat. Commun.*, 2015, v.6, N7132.
14. *Raza S., Bozhevolnyi S.I., Wubs M., Mortensen A.N.* Nonlocal optical response in metallic nanostructures // *J. Phys. Condens. Matter.*, 2015, v.27, N183204.

15. 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.
16. Novotny L., van Hulst N. Antennas for light (Review article) // *Nature photonics*, 2011, v.5, p.83-90.
17. 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.
18. Liaw J-W., Chen H-C., Chen J-H. Enhancement or quenching effect of metallic nanodimer on spontaneous emission // *J. Quantitat. Spectr. Radiat. Trans.*, 2010, v.111, p.454-465.
19. Le Ru E.C., Etchegoin P.G. Single-molecule surface-enhanced Raman spectroscopy // *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 2012, v.63, p.65-87.
20. Taflove A., Hagness S.C. *Computational Electrodynamics – The Finite-Difference Time-Domain Method*, Third Edition, Artech House Publishers, 2005.
21. Jin J.M. *The Finite Element Method in Electromagnetics*, 3rd Edition. – Wiley-IEEE Press, 2014.
22. Busch K., König M., Niegemann J. Discontinuous Galerkin methods in nanophotonics // *Laser Photonics Rev.*, 2011, v.5, №6, p.773-809.
23. Li L., Lanteri S., Perrussel R. A hybridizable discontinuous Galerkin method combined to a Schwarz algorithm for the solution of 3d time-harmonic Maxwell's equation // *J. Comput. Phys.*, 2014, v.256, №1, p.563-581.
24. Kahnert M. Numerical solutions of the macroscopic Maxwell equations for scattering by non-spherical particles: A tutorial review // *J. Quantitat. Spectr. Radiat. Trans.*, 2016, v.178, p.22-37.
25. Yurkin M.A. *Computational Approaches for Plasmonics*. In: editors: Della Sala F, D'Agostino S. *Handbook of Molecular Plasmonics*, Chapter: 2, Publisher: Pan Stanford Publishing, 2013, p.83-135.
26. Forestiere C., Ladarola G., Rubinacci G., et al. Surface integral formulations for the design of plasmonic nanostructures // *J. Opt. Soc. Am. A.*, 2012, v.29, p.2314-2327.
27. Garcia de Abajo F.J., Howie A. Retarded field calculation of electron energy loss in inhomogeneous dielectrics // *Phys. Rev. B*, 2002, v.65, N115418.
28. Khlebtsov N.G. T-matrix method in plasmonics: An overview // *J. Quantit. Spectr. Radiat. Trans.*, 2013, v.123, p.184-217.
29. Hafner Ch., Smajic J., Agio M. *Numerical Methods for the Electrodynamical Analysis of Nanostructures*, in *Nanoclusters and Nanostructured Surfaces*, In: Ray AK. editor. American Scientific Publishers: – Valencia, California, USA: 2010, p.207-274.
30. Еремин Ю.А., Сवेशников А.Г. Математические модели задач нанооптики и биофотоники на основе метода дискретных источников // *Журн. вычисл. матем. и матем. физ.* 2007, т.47, №2. с.266-284;
Eremin Yu.A., Sveshnikov A.G. Mathematical models in nanooptics and biophotonics based on the discrete sources method // *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2007, v.47, №2, p.262-279.
31. Еремин Ю.А., Сवेशников А.Г. Математическая модель учета эффекта нелокальности плазмонных структур на основе метода дискретных источников // *Журн. вычислительной математики и математической физики*, 2018, т.58, №4, с.586-594;
Eremin Yu.A., Sveshnikov A.G. Mathematical Model Taking into Account Nonlocal Effects of Plasmonic Structures on the Basis of the Discrete Source Method // *Computational*

- Mathematics and Mathematical Physic, 2018, v.58, №4, p.572-580.
32. *Еремин Ю.А., Свешников А.Г.* Влияние эффекта нелокальности на рассеивающие свойства несферических плазмонных наночастиц на подложке // Матем. моделирование, 2018, т.30, №4, с.121-136;
Eremin Iu.A., Sveshnikov A.G. Influence of Non-Local Effect on the Scattering Properties of NonSpherical Plasmonic Nanoparticles on a Substrate // Mathematical Models and Computer Simulations, 2018, v.10, №6, p.730-740.
 33. *Huang Y.Q., Li J.C., Yang W.* Theoretical and numerical analysis of a non-local dispersion model for light interaction with metallic nanostructures // Comput. Math. Appl., 2016, v.72, p.921-932.
 34. *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. Comput. Phys., 2016, v.316, №1, p.396-415.
 35. *Li L., Lanteri S., Mortensen N.A., Wubs M.* A hybridizable discontinuous Galerkin method for solving nonlocal optical response models // Comput. Phys. Commun., 2017, v.219, p.99-107.
 36. *Гришина Н.В., Еремин Ю.А., Свешников А.Г.* Новая концепция метода дискретных источников в задачах электромагнитного рассеяния // Матем. моделирование, 2015, т.27, №8, с.3-12;
Grishina N.V., Eremin Iu.A., Sveshnikov A.G. New Concept of the Discrete Sources Method in Electromagnetic Scattering Problems // Mathematical Models and Computer Simulations, 2016, v.8 №2, p.175-182.
 37. *Гришина Н.В., Еремин Ю.А., Свешников А.Г.* Метод Дискретных источников для анализа усиления флюоресценции в присутствии плазмонных структур // Журн. вычислительной математики и математической физики, 2016, т.5, №1, с.131-139;
Grishina N.V., Eremin Iu.A., Sveshnikov A.G. Discrete source method for analysis of fluorescence enhancement in the presence of plasmonic structures // Computational Mathematics and Mathematical Physic, 2016, v.56, №1, p.140-147.
 38. *Бахвалов Н.С.* Численные методы. – М.: Наука, 1975;
Bakhvalov N.S. Chislennyye metody. – М.: Nauka, 1975.
 39. *Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А.* Матрицы и вычисления. – М.: Наука, 1984;
Voevodin V.V., Kuznetsov Iu.A. Matritsy i vychisleniia. – М.: Nauka, 1984.
 40. <http://www.refractiveindex.info>.
 41. *Гришина Н.В., Еремин Ю.А., Свешников А.Г.* Анализ плазмонных резонансов близко расположенных частиц методом дискретных источников // Оптика и спектроскопия, 2012, т.113, №4, с.484-489;
Grishina N.V., Eremin Iu.A., Sveshnikov A.G. Analysis of plasmon resonances of closely located particles by the discrete sources method // Optics and spectroscopy, 2012, v.113, №4, p.440-445.

Поступила в редакцию 10.09.18

После доработки 10.09.18

Принята к публикации 22.10.18