Научная статья
Research Article

ОПТИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ. 2024. Том 91. № 11. С. 3–11
OPTICHESKII ZHURNAL. 2024. V. 91. № 11. P. 3–11

3

Оптический журнал

Физическая оптика
Physical optics

DOI: 10.17586/1023-5086-2024-91-11-3-11
УДК 535.137

Расчет плазмонов с переносом заряда в одномерных и двумерных периодических системах

Александр Семенович Фёдоров[1], Егор Валерьевич Еремкин[2]✉, Валерий Сергеевич Герасимов[3]

[1, 2]Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук, Красноярск, Россия
[1, 2, 3]Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия
[3]Институт вычислительного моделирования Сибирского отделения Российской академии наук, Красноярск, Россия

[1]qchem99@yandex.ru https://orcid.org/0000-0002-7911-3301
[2]eremkin.e.v@yandex.ru https://orcid.org/0000-0003-2118-3435
[3]gerasimov@icm.krasn.ru https://orcid.org/0000-0002-4540-7408

Аннотация

Предмет исследования. Одномерные и двумерные периодические структуры наночастиц, соединенные проводящими мостами (линкерами). **Цель работы.** Создание модели для расчета свойств плазмонов с переносом заряда в одномерных и двумерных периодических системах металлических наночастиц. **Метод.** Модифицированный для периодических систем гибридный квантово-классический подход. **Основные результаты.** Модифицированная модель применена к двум системам периодических металлических наночастиц, связанных проводящими мостами. Продемонстрировано, что эти плазмонные частоты лежат в инфракрасном диапазоне спектра. **Практическая значимость.** Предложенная гибридная модель позволяет рассчитывать плазмонные свойства сложных периодических систем связанных металлических наночастиц для применения в различных детекторах.

Ключевые слова: плазмоны, плазмоны с переносом заряда, наночастицы, периодическая система, проводящие линкеры

Благодарность: исследование поддержано Российским научным фондом, Соглашение № 23-12-20007, а также Правительством Красноярского края и Красноярским краевым фондом поддержки научной и научно-технической деятельности, Соглашение № 256.

Ссылка для цитирования: Фёдоров А.С., Еремкин Е.В., Герасимов В.С. Расчет плазмонов с переносом заряда в одномерных и двумерных периодических системах // Оптический журнал. 2024. Т. 91. № 11. С. 3–11. http://doi.org/10.17586/1023-5086-2024-91-11-3-11

Коды OCIS: 250.5403, 160.4236

Calculation of charge transfer plasmons in one-dimensional and two-dimensional periodic systems

Alexander S. Fedorov[1], Egor V. Eremkin[2]✉, Valery S. Gerasimov[3]

[1, 2]Kirensky Institute of Physics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Krasnoyarsk, Russia
[1, 2, 3]Siberian Federal University, Krasnoyarsk, Russia
[3]Institute of Computational Modeling, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Krasnoyarsk, Russia

[1]qchem99@yandex.ru https://orcid.org/0000-0002-7911-3301
[2]eremkin.e.v@yandex.ru https://orcid.org/0000-0003-2118-3435
[3]gerasimov@icm.krasn.ru https://orcid.org/0000-0002-4540-7408

Abstract

The subject of the study. One-dimensional and two-dimensional periodic structures of nanoparticles connected by conducting bridges (linkers). **Aim of study.** Creation of a model for calculating the properties of charge-transfer plasmons in one-dimensional and two-dimensional periodic systems of metal nanoparticles. **Method.** A hybrid quantum-classical approach modified for periodic systems. **Main results.** The modified model is applied to two systems of periodic metal nanoparticles connected by conducting bridges. It has been demonstrated that these plasmon frequencies lie in the infrared range. **Practical significance.** The proposed hybrid model makes it possible to calculate the plasmon properties of complex periodic systems of bound metal nanoparticles for use in various detectors.

Keywords: plasmons, charge-transfer plasmons, nanoparticles, periodic system, conducting linkers

Acknowledgment: this study was supported by the Russian Science Foundation, Agreement № 23-12-20007, and the Government of the Krasnoyarsk Territory and the Krasnoyarsk Territorial Foundation for Support of Scientific and R&D Activities, Agreement № 256.

For citation: Fedorov A.S., Eremkin E.V., Gerasimov V.S. Calculation of charge transfer plasmons in one-dimensional and two-dimensional periodic systems [in Russian] // Opticheskii Zhurnal. 2024. V. 91. № 11. P. 3–11. http://doi.org/10.17586/1023-5086-2024-91-11-3-11

OCIS codes: 250.5403, 160.4236

ВВЕДЕНИЕ

В последнее время большое внимание исследователей уделяется процессам поглощения, рассеяния и фотолюминесценции (ФЛ) в планарных системах, состоящих из близко расположенных металлических наночастиц (МНЧ), что объясняется генерацией плазмонов в таких системах. Данные системы достаточно легко синтезируются и при этом спектр плазмонов можно контролировать, регулируя связь (расстояние) между отдельными МНЧ [1]. Также поверхностные плазмоны усиливаются в присутствии металлического зонда рядом с объектом, проявляющим свойства гигантского рамановского рассеяния [2].

Плазмоны с переносом заряда (ППЗ) возникают в системах, состоящих из двух или более МНЧ, соединенных проводящим мостом (линкером). В таких системах свободные заряды перетекают от одной МНЧ к другой, что приводит к появлению ППЗ, частота которых обычно находится в видимом или инфракрасном (ИК) диапазоне спектра [3–5]. Плазмоны с переносом заряда сопровождаются колебаниями электрического тока, проходящего через проводящие линкеры, в результате чего МНЧ приобретают противоположные заряды. Процесс передачи электронов в зависимости от типа наноструктуры можно анализировать, используя расчет квантовой проводимости, а также классические расчеты проводящего линкера [6–8]. Свойства ППЗ могут быть использованы для создания многообразных устройств нанофотоники даже в терагерцовых частотах [9], особенно — для создания сверхбыстрых нанопереключателей [10].

Интенсивность, спектральная ширина и резонансная частота ППЗ напрямую зависят от проводимости линкеров [4, 11, 12]. В частности было показано, что в случае тонких нанолинкеров узкий пик плазмона с резонансом

в ближнем ИК диапазоне спектра генерируется и сдвигается в средний ИК диапазон без значительного уширения при уменьшении ширины наномостика [3]. В работе [13] было показано, что с уменьшением расстояния между МНЧ, соединенными молекулой дезоксирибонуклеиновой кислоты, происходит значительное увеличение интенсивности пика рамановского рассеяния, индуцированного плазмонами, в ИК диапазоне. Та же ситуация наблюдается в случае соединенных металлических цилиндров: увеличение их радиуса сопровождается сужением спектральной линии ППЗ со сдвигом в ультрафиолетовую область [4]. Уменьшение радиуса и, следовательно, уменьшение проводимости сопровождается сдвигом пика ППЗ в ИК область [11]. Аналогичный эффект был описан для случая растяжения металлического наностержня [14]. Эти свойства могут применятся в биомедицинских разработках, так как биологические ткани прозрачны для ИК излучения.

Использование органических молекул и, в частности, проводящих полимеров, таких как полиацетилен, политиофен, полианилин и полипиррол, кажется перспективным для связывания МНЧ при создании молекулярных датчиков и других активных материалов, работающих в среднем ИК диапазоне [3]. Следует отметить, что многие работы были посвящены их синтезу и свойствам [15–20].

Наиболее распространенный метод получения МНЧ, связанных проводящими органическими молекулами, заключается в смешивании предварительно синтезированных отдельных компонентов с желаемым размером и морфологией. Под воздействием химических и электростатических взаимодействий эти компоненты обычно адсорбируются на поверхности проводящих полимеров, образуя соответствующие гибридные структуры [17]. Золотые, серебряные и медные наночастицы (НЧ) особенно интересны для плазмонных приложений, поскольку они поглощают свет в видимом диапазоне спектра. Однако использование серебряных и медных НЧ ограничено их нестабильностью [21–23]. Контакт органической молекулы с золотыми НЧ часто осуществляется через атом серы тиольной группы [15–19]. Тем не менее, связи также могут формироваться с другими атомами, например, с азотом в 1,2-бис(4-пиридил) этилене [20].

В экспериментальных работах, посвященных изучению ППЗ, часто встречаются исследования плазмонов в периодических структурах [24, 25]. Рассматривая этот аспект, в данной статье предлагается модификация ранее описанного [26–28] гибридного квантово-классического подхода для изучения ППЗ в периодических системах НЧ, соединенных проводящим линкером.

Целью работы, результаты которой изложены в настоящей статье, является создание модели для расчета свойств ППЗ заряда в одномерных и двумерных периодических системах МНЧ.

МОДИФИКАЦИЯ ГИБРИДНОЙ КВАНТОВО-КЛАССИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ ПЕРИОДИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Изложенная ранее гибридная квантово-классическая модель для расчета ППЗ показала хорошее согласие с расчетами методом конечных разностей во временно́й области [26], которые *de facto* стали стандартом для таких исследований. В этой модели полная энергия системы разделяется на два вклада — электростатическую потенциальную энергию НЧ E_{pot} и кинетическую энергию носителей заряда внутри линкеров E_{kin}

$$E_{\text{kin}} = -\frac{e}{L}\sum_{jk}\frac{\alpha_{jk} I_{jk}(t)^2}{2},\ \alpha_{jk} = \frac{L^2 m^*}{2 n_f e^2}, \quad (1)$$

где параметр α_{jk} описывает проводящие свойства линкера между j-й и k-й частицами, далее в тексте обозначается как α, так как использовались одинаковые линкеры, n_f — число носителей на уровне Ферми линкера с учетом спинового вырождения и возможности возбуждения дырок, L — длина линкера, m^* — эффективная масса электронов в линкере.

$$E_{\text{pot}} = \sum_{j\neq k}\frac{Q_k Q_j}{R_{jk}} + \sum_j \{a_j Q_j^2 + b_j Q_j + c_j\}, \quad (2)$$

где Q_j — амплитуда заряда j-й НЧ, R_{jk} — расстояние между центрами частиц, а коэффициенты a_j, b_j, c_j представляют зависимость энергии от заряда Q для j-й частицы. Также здесь и далее подразумевается, что ток I_{jk} равен нулю, если $j = k$ или j-я и k-я частицы не связаны.

Ток I_{jk} определяется как ток, передающий заряд от j-й частицы к k-й, что приводит

к изменению заряда частиц и потенциальной энергии системы. При этом, хотя полная энергия системы сохраняется, уменьшение потенциальной энергии компенсируется увеличением кинетической части, что наблюдается как увеличение I_{jk}

$$\left(\frac{\partial E_{\text{pot}}}{\partial Q_j}-\frac{\partial E_{\text{pot}}}{\partial Q_k}\right)I_{jk}=\frac{\partial E_{\text{kin}}}{\partial I_{jk}}\frac{dI_{jk}}{dt}. \qquad (3)$$

Эти уравнения баланса энергии следует дополнить соотношениями непрерывности, показывающими, что заряд частицы Q_j может быть изменен только током через линкеры, которые контактируют с ней

$$\dot{Q}_j=-\sum_k I_{jk}. \qquad (4)$$

Уравнения (3) и (4) образуют линейную систему уравнений, достаточную для решения динамики заряда в НЧ и нахождения частот колебаний заряда, определяющих спектр плазмонных колебаний.

Для простоты в дальнейшем будем рассматривать все частицы и линкеры как идентичные и a_j (квадратичный член в формуле (2), определяющий удвоенную емкость частицы), установленный равным $2R$, где R — радиус НЧ. Кроме того, в выражении (2) линейные члены b_j обращаются в ноль в силу электронейтральности системы, а члены c_j можно обратить в ноль путем корректировки энергетической шкалы. После подстановки частных производных и деления обеих частей на I_{jk} окончательно получается уравнение

$$\sum_{s\neq j,k}Q_s\left(\frac{1}{R_{sj}}-\frac{1}{R_{sk}}\right)+ \\ +\left(Q_j-Q_k\right)\left(\frac{1}{R}-\frac{1}{R_{sk}}\right)=\alpha I_{jk}. \qquad (5)$$

Взяв производную по времени от уравнения (5) и подставив в нее выражение (4), получается система дифференциальных уравнений второго порядка для зарядов частиц

$$\ddot{Q}_j=-\frac{1}{\alpha}\sum_k\left[\sum_{s\neq j,k}Q_s\left(\frac{1}{R_{sj}}-\frac{1}{R_{sk}}\right)+ \\ +\left(Q_j-Q_k\right)\left(\frac{1}{R}-\frac{1}{R_{jk}}\right)\right], \qquad (6)$$

где первое (по индексу k) суммирование проводится только по частицам, которые связаны с j-й частицей через линкер.

По аналогии с фононами в кристаллах предполагается, что осциллирующие заряды $Q_j(t)=Q_j\exp(i\omega t)$ (далее — заряды) в исследуемых ППЗ характеризуются волновым вектором $\mathbf{q}$ и номером ячейки j. Поскольку система является периодической, предполагается по аналогии с теоремой Блоха, что амплитуда заряда МНЧ, лежащего в другой элементарной ячейке с вектором перемещения $\mathbf{R}_n$, также изменяется гармонически

$$Q_n(\mathbf{R}_j+\mathbf{R}_n)=Q_j\exp(iq\mathbf{R}_n), \qquad (7)$$

где Q_n — амплитуда заряда МНЧ с индексом n.

Применяя это к формуле расчета частоты ППЗ (6), и с учетом гармонического изменения всех зарядов во времени получается система линейных уравнений

$$-\omega_m^2(\mathbf{q})Q_j=-\frac{1}{\alpha}\sum_n\sum_k\left[\sum_{s\neq j,k}Q_s\exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}_n)\times \right. \\ \times\left(\frac{1}{R_{sj}+R_n}-\frac{1}{R_{sk}+R_n}\right)+ \\ \left.+\left(Q_j-Q_k\exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}_n)\right)\left(\frac{1}{R}-\frac{1}{R_{jk}+R_n}\right)\right]. \qquad (8)$$

ПРИМЕНЕНИЕ МОДЕЛИ К ДВУМ СИСТЕМАМ

Данная модифицированная модель была применена к двум периодическим системам, содержащим связанные МНЧ. Первая система в элементарной ячейке с размерами $a=18$ нм и $b=9$ нм содержала две связанные МНЧ одного радиуса $R=3$ нм и числом носителей на уровне Ферми линкера $n_f=4$. Вторая система в элементарной ячейке с размерами $a=33$ нм и $b=15$ нм содержала три связанные частицы с разными радиусами $R_1=2$ нм, $R_2=4$ нм и $R_3=6$ нм и степенью заполнения электронами $n_f=36$.

Используя систему уравнений (8), была вычислена зонная структура $\omega_j(\mathbf{k})$ обеих соединенных НЧ (рис. 1) одномерных и двумерных периодических систем. Подобно фононам в периодических структурах данные моды можно классифицировать как акустические

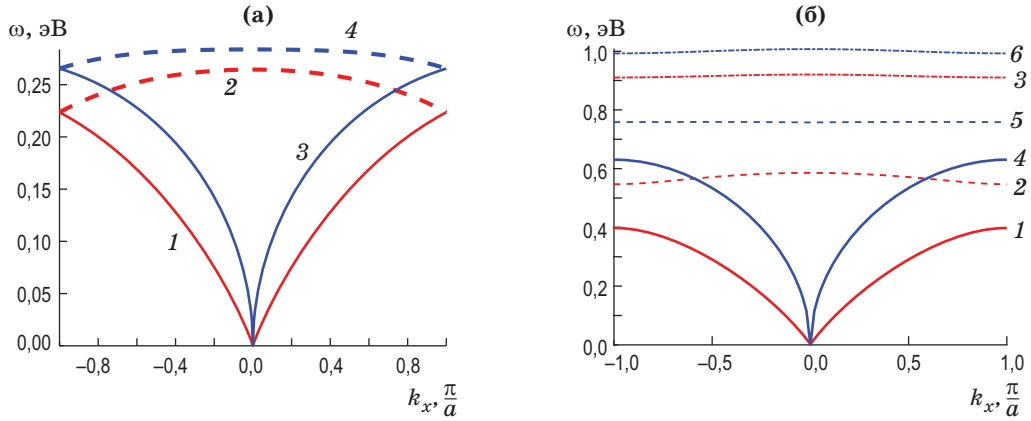


Рис. 1. Зонные структуры $\omega_j(\mathbf{k})$ периодической цепочки из двух связанных МНЧ с одинаковыми радиусами (кривые *1*, *2* — одномерная структура, *3*, *4* — двумерная структура) — (а) и периодической структуры из трех МНЧ с разными радиусами (кривые *1*, *2*, *3* — одномерная структура, *4*, *5*, *6* — двумерная структура) — (б)

Fig. 1. Band structures $\omega_j(\mathbf{k})$ of (a) a periodic chain of two connected metal nanoparticles with the same radii (curves *1*, *2* correspond to the one-dimensional structure, *3*, *4* correspond to the two-dimensional structure) and (б) a periodic structure of three metal nanoparticles with different radii (curves *1*, *2*, *3* correspond to the one-dimensional structure, *4*, *5*, *6* correspond to the two-dimensional structure)

и оптические. В обеих структурах частоты ППЗ для акустических мод стремятся к нулю по мере приближения $\mathbf{k}$ к нулю и достигают максимума на границах первой зоны Бриллюэна. Оптические моды ППЗ обладают слабой дисперсией $\omega_j(\mathbf{k})$, при этом их энергии выше, чем у акустических мод.

Зонная структура первой системы, включающей одинаковые МНЧ в элементарной ячейке, не содержит запрещенной зоны между акустической и оптической модами ППЗ (рис. 1а). Это объясняется тем, что данная структура при сворачивании зоны Бриллюэна может быть сведена к другой структуре, содержащей только одну МНЧ в элементарной ячейке, в которой существует единственная плазмонная мода.

При сворачивании эта мода отображается на акустическую и оптическую моды в уменьшенной элементарной ячейке, где моды на границах первой зоны Бриллюэна переходят друг в друга без образования запрещенной зоны аналогично ситуации с фононами в кристалле, в элементарной ячейке которого находятся два одинаковых атома. Зонная структура второй структуры, содержащей разные МНЧ в элементарной ячейке, имеет запрещенную зону между акустическими и оптическими модами ППЗ.

Также были исследованы групповые скорости плазмонов исследуемых структур, определяемые как $V_{\text{group}}(\mathbf{k}) = d\nu(\mathbf{k})/dk$ (рис. 2).

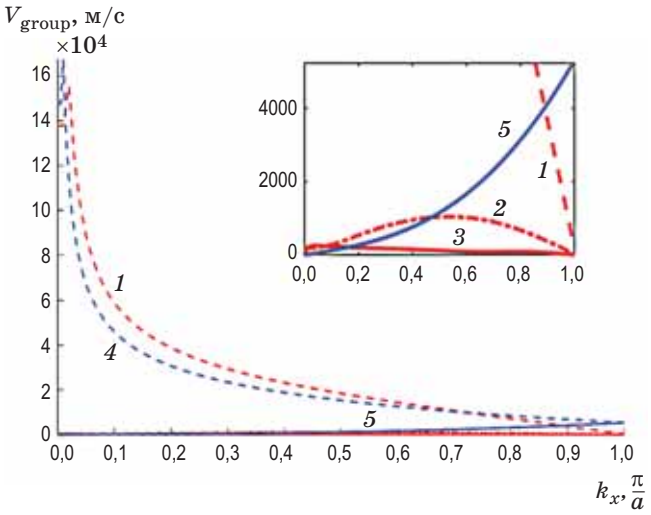


Рис. 2. Зависимости отношения групповой скорости плазмонов V_{group} от волнового вектора $\mathbf{k}$ двумерных систем МНЧ. Кривые *1*, *2*, *3* — структура из трех связанных МНЧ с разными радиусами, две акустические и оптическая соответственно. Кривые *4*, *5* — структура из двух МНЧ с одинаковыми радиусами, акустическая и оптическая соответственно

Fig. 2. Dependences of the plasmon group velocity ratio V_{group} on the wave vector $\mathbf{k}$ for two-dimensional metal nanoparticle systems. Curves *1*, *2*, *3* correspond to the structure of three linked metal nanoparticles with different radii, two acoustic and one optical, respectively. Curves *4*, *5* correspond to the structure of two nanoparticles with the same radius, acoustic and optical, respectively

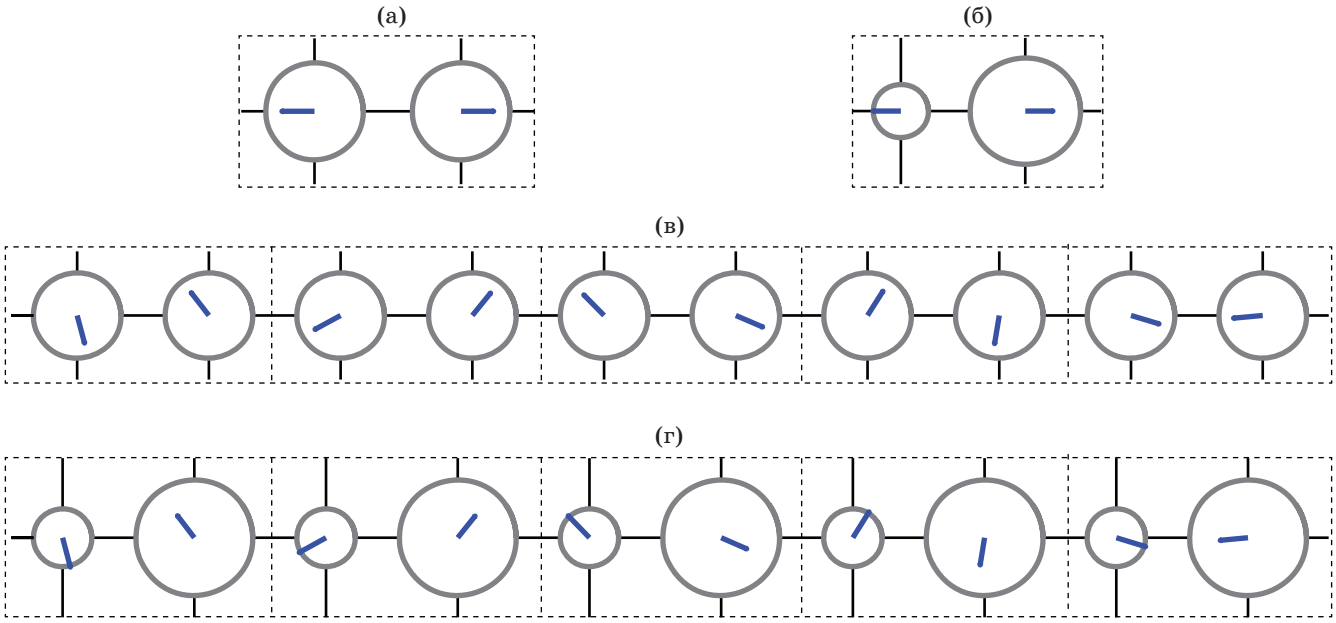


Рис. 3. Распределение эффективных осциллирующих зарядов МНЧ обеих структур при разных волновых векторах. Структура связанных МНЧ одного радиуса при $\mathbf{k} = 0$ (а) и при $\mathbf{k} = 0{,}5\ \pi/a$ (б), структура связанных МНЧ разного радиуса при $\mathbf{k} = 0$ (в) и при $\mathbf{k} = 0{,}5\ \pi/a$ (г). Положение и длина стрелок показывают значение комплексного заряда: по горизонтали — реальная часть, по вертикали — мнимая. Размеры кругов соответствуют соотношениям радиусов МНЧ и размеров элементарных ячеек

Fig. 3. Distributions of effective oscillating charges of metal nanoparticles of both structures at different wave vectors. (a) Structure of bound metal nanoparticles with the same radii (a) at $\mathbf{k} = 0$ and (б) $k = 0.5\ \pi/a$, structure of bound metal nanoparticles with different radii at (в) $k = 0$ and (г) $k = 0.5\ \pi/a$. The position and length of the arrows show the value of the complex charge: horizontally — the real part, vertically — the imaginary part. The sizes of the circles correspond to the ratios of the radii of the metal nanoparticles and the sizes of the unit cells

Сравнивая полученную скорость V_{group} со скоростью Ферми в золоте V_{FAu}, которая равна $1{,}4{\times}10^6$ м/с, видно, что отношение скоростей $V_{\text{FAu}}/V_{\text{group}}$ равно 10.

Кроме данных зависимостей при разных значениях волнового вектора были построены пространственные распределения осциллирующих зарядов МНЧ Q_j обеих структур (рис. 3). На рисунках на фоне окружностей с радиусами, пропорциональными радиусам МНЧ, с помощью векторов показаны значения осциллирующих зарядов. Длина векторов определяет амплитуду Q_j этих зарядов, а их направление определяется соотношением между реальной и мнимой частями амплитуды Q_j.

РАСЧЕТ МЕТОДОМ КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Для подтверждения предложенной модели были проведены расчеты поглощения энергии электромагнитного поля методом конечных элементов[1] (МКЭ) с помощью пакета Comsol Multiphysics. Было рассчитано взаимодействие гармонической волны электромагнитного излучения (ЭМИ) с периодической системой, содержащей три частицы с радиусами $R_1 = 2$ нм, $R_2 = 4$ нм и $R_3 = 6$ нм в элементарной ячейке с размерами $a = 33$ нм и $b = 15$ нм, соединенных линкерами с одним радиусом $r = 0{,}6$ нм (рис. 4). При моделировании взаимодействия на данную структуру перпендикулярно падала волна ЭМИ, при этом проекция волнового вектора на плоскость $K_{x,y} = 0$, а вектор напряженности электрического поля $\mathbf{E}$ был направлен вдоль оси x. На рис. 4 приведено значение амплитуды вектора тока в некоторый момент времени внутри элементов структуры в случае колебания ЭМИ с длиной волны $\lambda_{\text{FEM}} = 3{,}155$ мкм, при

[1] *Finite Element Method* (FEM).

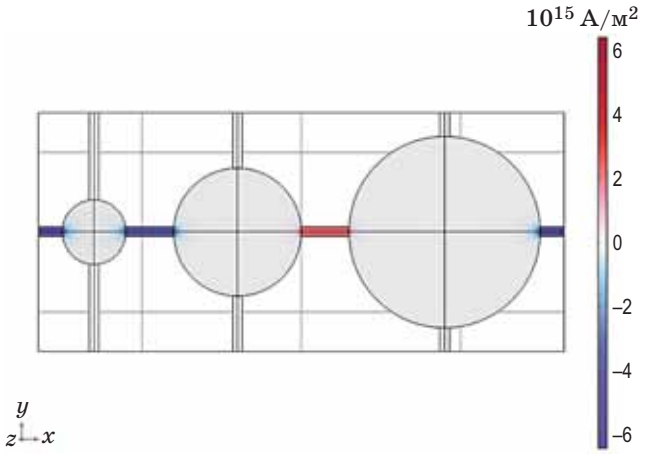


Рис. 4. Структура элементарной ячейки из трех МНЧ. Цветная шкала демонстрирует распределение токов в системе

Fig. 4. Structure of a unit cell of three metal nanoparticles. The color scale shows the distribution of currents in the system

которой наблюдается один из множества пиков поглощения ЭМИ. Можно видеть, что при данном колебании реализуется поглощение энергии, в результате которого происходит перетекание заряда между НЧ, т.е. возбуждается ППЗ.

Анализируя протекающий ток, видно, что при этом заряжаются в основном две частицы с большим радиусом.

Сравнивая значение частот ППЗ, рассчитанных в предложенной модели при $K_{x,y} = 0$, соответствующих оптическим плазмонам (0,55 и 0,91 эВ) с полученными в рамках МКЭ данными расчетов, можно видеть, что в предложенной модели значение длины волны $\lambda = 2{,}2543$ мкм, соответствующей $\omega_j = 0{,}55$ эВ, довольно близко к значению $\lambda_{\text{FEM}} = 3{,}155$ мкм, полученному в расчете методом МКЭ. При этом в модельном расчете для моды с частотой 0,55 эВ можно видеть, что основной заряд приобретает также частица с самым большим радиусом (рис. 3б) в соответствии с расчетом посредством МКЭ.

Несоответствие частот плазмона при расчетах двумя методами можно объяснить разным выбором материала НЧ. В расчете методом МКЭ для параметров диэлектрической проницаемости материала НЧ и соединяющих их линкеров выбирались табулированные параметры золота (частотно зависящие реальная и мнимая части диэлектрической проницаемости) из работы [29]. В то время как в нашей модели материалом НЧ выбирался идеально проводящий материал, а для материала линкеров — материал с чисто мнимой оптической проводимостью, при которой реализуется баллистический транспорт вдоль линкеров.

Решение этой задачи с использованием МКЭ и компьютера с процессором Intel Core I5-3340, 3,1 ГГц для одной точки в первой зоне Бриллюэна занимает около 24 час или более. Аналогичные расчеты, проводимые предлагаемым методом (8), занимают всего несколько секунд. Это свидетельствует о высокой вычислительной эффективности разработанной модели.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе расширена гибридная модель для расчета свойств ППЗ в периодических системах МНЧ, соединенных проводящими линкерами. Данная модель уже показала хорошее согласие с расчетами ППЗ методом конечных разностей во временной области для сложных непериодических систем.

Показано, что зонная структура ω_j колебаний ППЗ в этих системах характеризуется волновым вектором $\mathbf{k}$. При этом, подобно фононам в периодических средах, ветви колебаний ППЗ делятся на акустическую и оптическую моды.

Модифицированная модель применена к расчетам ППЗ для одно- и двумерных периодических систем МНЧ, связанных проводящими мостиками. В первом случае была использована цепочка из двух одинаковых МНЧ с радиусом 3 нм в прямоугольной элементарной ячейке. Благодаря равенству расстояний между обеими МНЧ с одинаковыми радиусами эта структура может быть сведена к элементарной ячейке, содержащей только одну МНЧ. Во втором случае была рассчитана система в элементарной ячейке с размерами $a = 33$ нм и $b = 15$ нм, содержащая три связанные частицы с радиусами $R_1 = 2$ нм, $R_2 = 4$ нм и $R_3 = 6$ нм и степенью заполнения электронами $n_f = 36$.

Показано, что зонная структура ППЗ имеет акустические и оптические моды ППЗ, причем между ними существует запрещенная щель.

На примере данных расчетов было установлено, что предложенная модель расчета ППЗ работает быстрее на 3–4 прядка по сравнению

со стандартными методами расчета плазмонов, таких как МКЭ или метод конечных разностей во временной области.

Предложенная гибридная модель позволяет рассчитывать плазмонные свойства очень сложных систем связанных МНЧ, которые могут применяться в различных детекторах за счет гибкой настройки параметров плазмонов путем изменения конфигурации комплекса МНЧ–линкер.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Cheng Y., Sun M. Unified treatment for photoluminescence and scattering of coupled metallic nanostructures: I. Two-body system // New J. Phys. 2022. V. 24. № 3. P. 033026. https://doi.org/10.1088/1367-2630/ac57e9
2. Cao Y., Sun M. Tip-enhanced Raman spectroscopy // Rev. in Phys. 2022. V. 8. P. 100067. https://doi.org/10.1016/j.revip.2022.100067
3. Wen F., Zhang Y., Gottheim S., et al. Charge transfer plasmons: Optical frequency conductances and tunable infrared resonances // ACS Nano. 2015. V. 9. № 6. P. 6428–6435. https://doi.org/10.1021/acsnano.5b02087
4. Koya A.N., Lin J. Charge transfer plasmons: Recent theoretical and experimental developments // Appl. Phys. Rev. 2017. V. 4. № 2. P. 021104. https://doi.org/10.1063/1.4982890
5. Zhu W., Esteban R., Borisov A.G., et al. Quantum mechanical effects in plasmonic structures with subnanometre gaps // Nature Commun. 2016. V. 7. № 1. P. 11495. https://doi.org/10.1038/ncomms11495
6. Savage K.J., Hawkeye M.M., Esteban R., et al. Revealing the quantum regime in tunnelling plasmonics // Nature. 2012. V. 491. № 7425. P. 574–577. https://doi.org/10.1038/nature11653
7. Scholl J.A., García-Etxarri A., Koh A.L., et al. Observation of quantum tunneling between two plasmonic nanoparticles // Nano Lett. 2013. V. 13. № 2. P. 564–569. https://doi.org/10.1021/nl304078v
8. Wiener A., Duan H., Bosman M., et al. Electron-energy loss study of nonlocal effects in connected plasmonic nanoprisms // ACS Nano. 2013. V. 7. № 7. P. 6287–6296. https://doi.org/10.1021/nn402323t
9. Gu J., Singh R., Liu X., et al. Active control of electromagnetically induced transparency analogue in terahertz metamaterials // Nature Commun. 2012. V. 3. № 1. P. 1151. https://doi.org/10.1038/ncomms2153
10. Large N., Abb M., Aizpurua J., et al. Photoconductively loaded plasmonic nanoantenna as building block for ultracompact optical switches // Nano Lett. 2010. V. 10. № 5. P. 1741–1746. https://doi.org/10.1021/nl1001636
11. Pérez-González O., Zabala N., Borisov A.G., et al. Optical spectroscopy of conductive junctions in plasmonic cavities // Nano Lett. 2010. V. 10. № 8. P. 3090–3095. https://doi.org/10.1021/nl1017173
12. Koya A.N., Lin J. Bonding and charge transfer plasmons of conductively bridged nanoparticles: The effects of junction conductance and nanoparticle morphology // J. Appl. Phys. 2016. V. 120. № 9. P. 093105. https://doi.org/10.1063/1.4962133
13. Li L., Wang Z., Lu Y., et al. DNA-assisted synthesis of ortho-nanodimer with sub-nanoscale controllable gap for SERS application // Biosensors and Bioelectronics. 2021. V. 172. P. 112769. https://doi.org/10.1016/j.bios.2020.112769
14. Rossi T.P., Zugarramurdi A., Puska M.J., et al. Quantized evution of the plasmonic response in a stretched nanorod // Phys. Rev. Lett. 2015. V. 115. № 23. P. 236804. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.236804
15. Han J., Wang M., Hu Y., et al. Conducting polymer-noble metal nanoparticle hybrids: Synthesis mechanism application // Progress in Polymer Sci. 2017. V. 70. P. 52–91. https://doi.org/10.1016/j.progpolymsci.2017.04.002
16. Liao J., Blok S., van der Molen S.J., et al. Ordered nanoparticle arrays interconnected by molecular linkers: Electronic and optoelectronic properties // Chem. Soc. Rev. 2015. V. 44. № 4. P. 999–1014. https://doi.org/10.1039/C4CS00225C
17. Reeler N.E.A., Lerstrup K.A., Somerville W., et al. Gold nanoparticles assembled with dithiocarbamate-anchored molecular wires // Sci. Rep. 2015. V. 5. № 1. P. 15273. https://doi.org/10.1038/srep15273
18. Fontana L., Bassetti M., Battocchio C., et al. Synthesis of gold and silver nanoparticles functionalized with organic dithiols // Colloids and Surfaces A: Physicochem. and Eng. Aspects. 2017. V. 532. P. 282–289. https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2017.05.005
19. Fratoddi I., Matassa R., Fontana L., et al. Electronic properties of a functionalized noble metal nanoparticles covalent network // J. Phys. Chem. C. 2017. V. 121. № 33. P. 18110–18119. https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b07176
20. Jiang N., Zhu T., Hu Y. Competitive aptasensor with gold nanoparticle dimers and magnetite nanoparticles for SERS-based determination of thrombin // Microchimica Acta. 2019. V. 186. № 12. P. 747. https://doi.org/10.1007/s00604-019-3787-9
21. Willets K.A., Wilson A.J., Sundaresan V., et al. Super-resolution imaging and plasmonics // Chem. Rev. 2017. V. 117. № 11. P. 7538–7582. https://doi.org/10.1021/acs. chemrev.6b00547
22. Linic S., Aslam U., Boerigter C., et al. Photochemical transformations on plasmonic metal nanoparticles // Nature Materials. 2015. V. 14. № 6. P. 567–576. https://doi.org/10.1038/nmat4281.
23. Parveen F., Sannakki B., Mandke M.V., et al. Copper nanoparticles: Synthesis methods and its light harvesting performance // Solar Energy Materials and Solar Cells. 2016. V. 144. P. 371–382. https://doi.org/10.1016/j.solmat.2015.08.033
24. Tantiwanichapan K., Wang X., Durmaz H. Graphene terahertz plasmons: A combined transmission spectroscopy and raman microscopy study // ACS Photonics. 2017. V. 4. № 8. P. 2011–2017. https://doi.org/10.1021/acsphotonics.7b00384
25. Ahmadivand A., Gerislioglu B., Sinha R., et al. Excitation of terahertz charge transfer plasmons in metallic fractal structures // J. Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves. 2017. V. 38. P. 992–1003. https://doi.org/10.1007/s10762-017-0400-3
26. Fedorov A.S., Visotin M.A., Eremkin E.V., et al. Charge-transfer plasmons of complex nanoparticle arrays connected by conductive molecular bridges //

Phys. Chem. Chem. Phys. 2022. V. 24. № 32. P. 19531–19540. https://doi.org/10.1039/D2CP01811J
27. Fedorov A.S., Krasnov P.O., Visotin M.A., et al. Thermoelectric and plasmonic properties of metal nanoparticles linked by conductive molecular bridges // Physica Status Solidi (B) Basic Res. 2020. V. 257. № 12. P. 2000249. https://doi.org/10.1002/pssb.202000249
28. Fedorov A., Visotin M., Gerasimov V., et al. Charge transfer plasmons in the arrays of nanoparticles connected by conductive linkers // J. Chem. Phys. 2021. V. 154. № 8. P. 084123. https://doi.org/10.1063/5.0040128
29. Olmon R.L., Slovick B., Johnson T.W., et al. Optical dielectric function of gold // Phys. Rev. B. 2012. V. 86. № 23. P. 235147. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.235147

АВТОРЫ

Александр Семёнович Фёдоров — доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Института физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, 660036, Россия; ведущий научный сотрудник Сибирского федерального университета, Красноярск, 660041, Россия; Scopus ID: 14057983200; https://orcid.org/0000-0002-7911-3301; qchem99@yandex.ru

Егор Валерьевич Еремкин — младший научный сотрудник Сибирского федерального университета, Красноярск, 660041, Россия; инженер Института физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, 660036, Россия; Scopus ID: 57837125500; https://orcid.org/0000-0003-2118-3435; eremkin.e.v@yandex.ru

Валерий Сергеевич Герасимов — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института вычислительного моделирования СО РАН, Красноярск, 660036, Россия; старший научный сотрудник Сибирского федерального университета, Красноярск, 660041, Россия; Scopus ID: 7201614977; https://orcid.org/0000-0002-4540-7408; gerasimov@icm.krasn.ru

Статья поступила в редакцию 12.11.2023
Одобрена после рецензирования 29.02.2024
Принята к печати 30.09.2024

AUTHORS

Alexander S. Fedorov — Dr. Sci. (Physics and Mathematics), Senior Research Fellow, Kirensky Institute of Physics, Siberian Branch of the RAS, Krasnoyarsk, 660036, Russia; Leading Researcher, Siberian Federal University, Krasnoyarsk, 660041, Russia; Scopus ID: 14057983200; https://orcid.org/0000-0002-7911-3301; qchem99@yandex.ru

Egor V. Eremkin — Junior Researcher, Siberian Federal University, Krasnoyarsk, 660041, Russia; Engineer, Kirensky Institute of Physics, Siberian Branch of the RAS, Krasnoyarsk, 660036, Russia; Scopus ID: 57837125500; https://orcid.org/0000-0003-2118-3435; eremkin.e.v@yandex.ru

Valery S. Gerasimov — PhD (Physics and Mathematics), Senior Research Fellow, Institute of Computational Modeling, Siberian Branch of the RAS, Krasnoyarsk, 660036, Russia; Senior Researcher, Siberian Federal University, Krasnoyarsk, 660041, Russia; Scopus ID: 7201614977; https://orcid.org/0000-0002-4540-7408; gerasimov@icm.krasn.ru

The article was submitted to the editorial office 12.11.2023
Approved after review 29.02.2024
Accepted for publication 30.09.2024