

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА, ИМЕЮЩИХ ФОРМУ ДИСКА С ДВУМЯ ОТВЕРСТИЯМИ

А. С. Аференок, В. Е. Боченков.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет.



На сегодняшний день биосенсорика является важной и независимой областью современной аналитической химии. Одним из перспективных направлений развития биосенсоров являются оптические сенсоры, основанные на поверхностно-плазмонном резонансе. Для улучшения чувствительности и уменьшения предела обнаружения необходимо понимание взаимосвязи между формой наночастицы и ее оптическими свойствами.

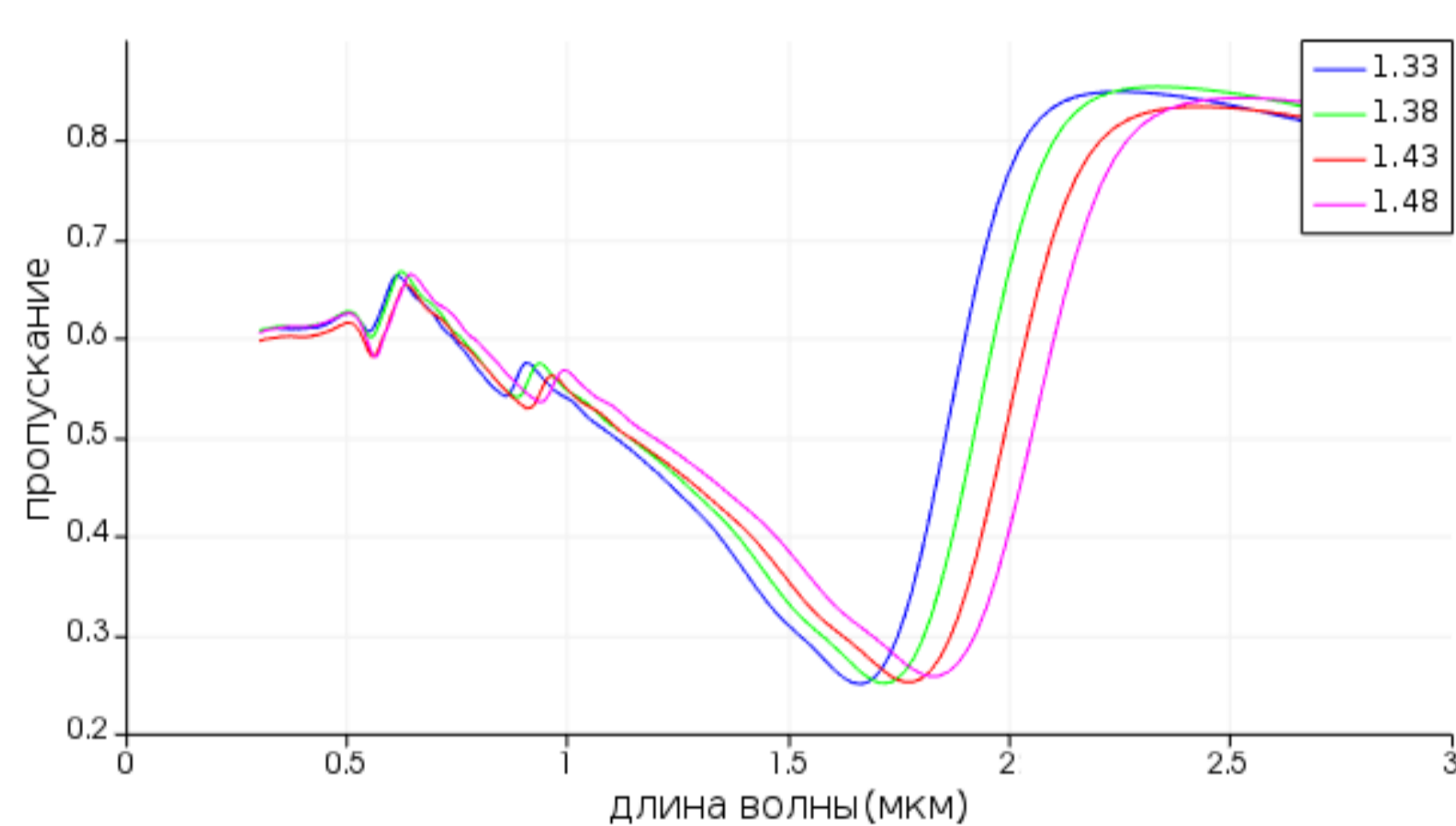
При переходе к частицам более сложной формы, чем сферическая или цилиндрическая, аналитическое решение уравнений Максвелла затрудняется, поэтому для расчета спектральных характеристик таких частиц используют различные приближения и численные методы.

## Порядок расчета FDTD

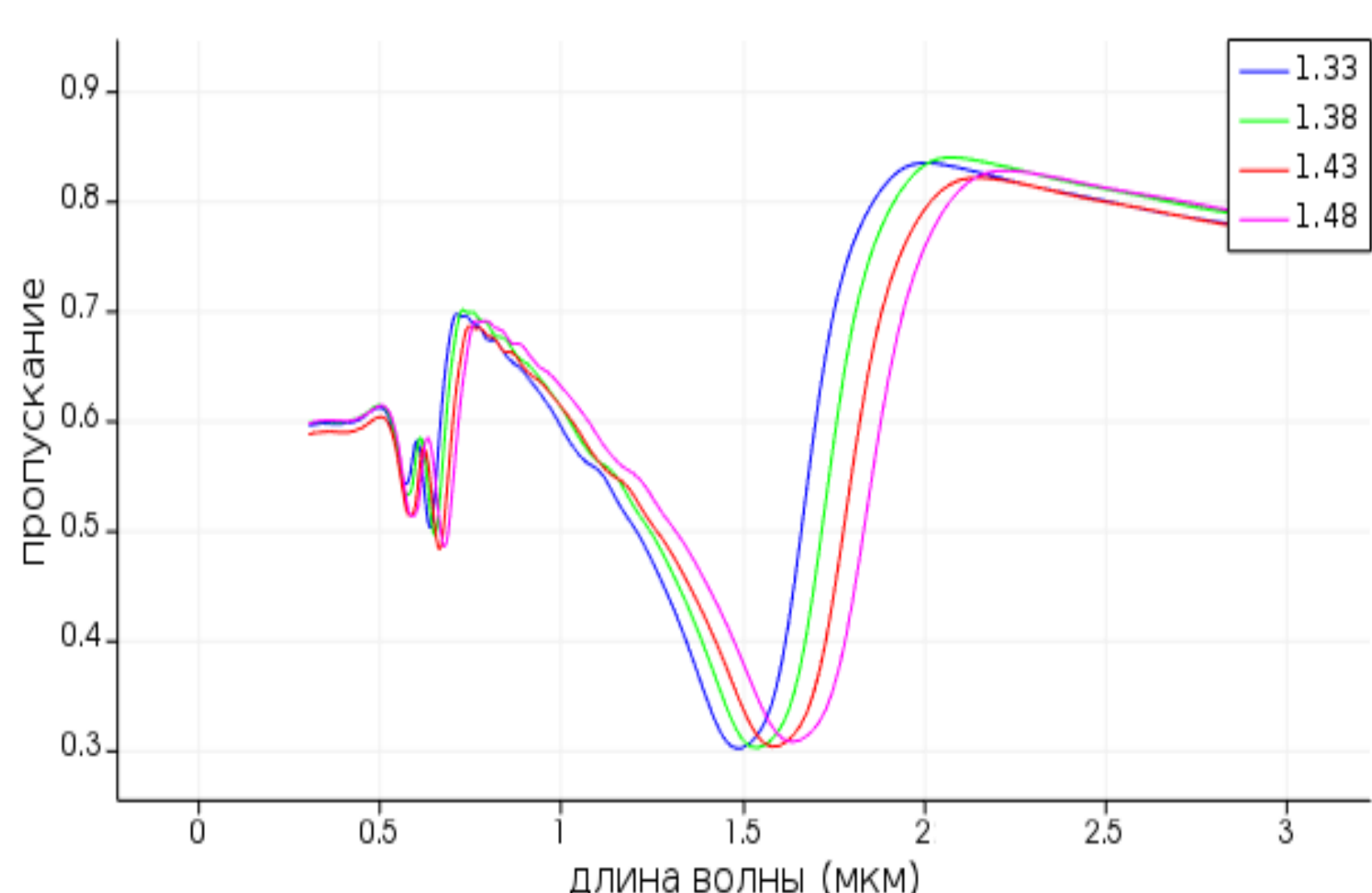
- I. Задается счетная область, разрешение сетки и граничные условия
- II. Внутри счетной области помещается тело с заданными оптическими и геометрическими параметрами
- III. Задается источник излучения.
- IV. Источник генерирует конечную во времени электромагнитную волну
- V. В уравнениях Максвелла изменение электрического поля  $E$  (частная производная) зависит от распределения в пространстве магнитного поля  $H$  (ротор). Аналогично, изменение поля  $H$  зависит от распределения в пространстве поля  $E$ . Записанные значения полей переводятся в частотное представление, затем получаются оптические характеристики рассматриваемой структуры тел.

## Сдвиг полос поглощения в зависимости от коэффициента преломления

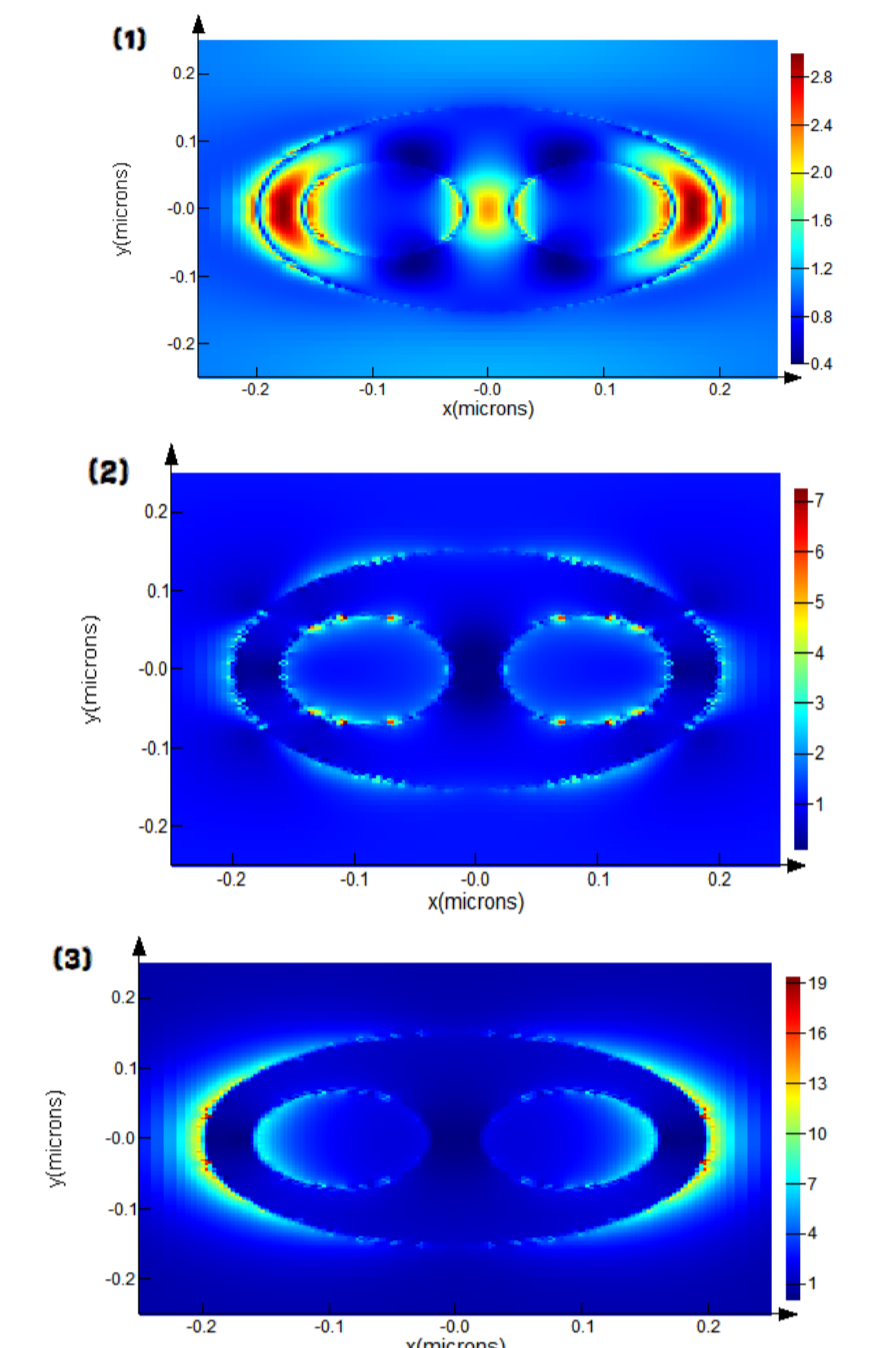
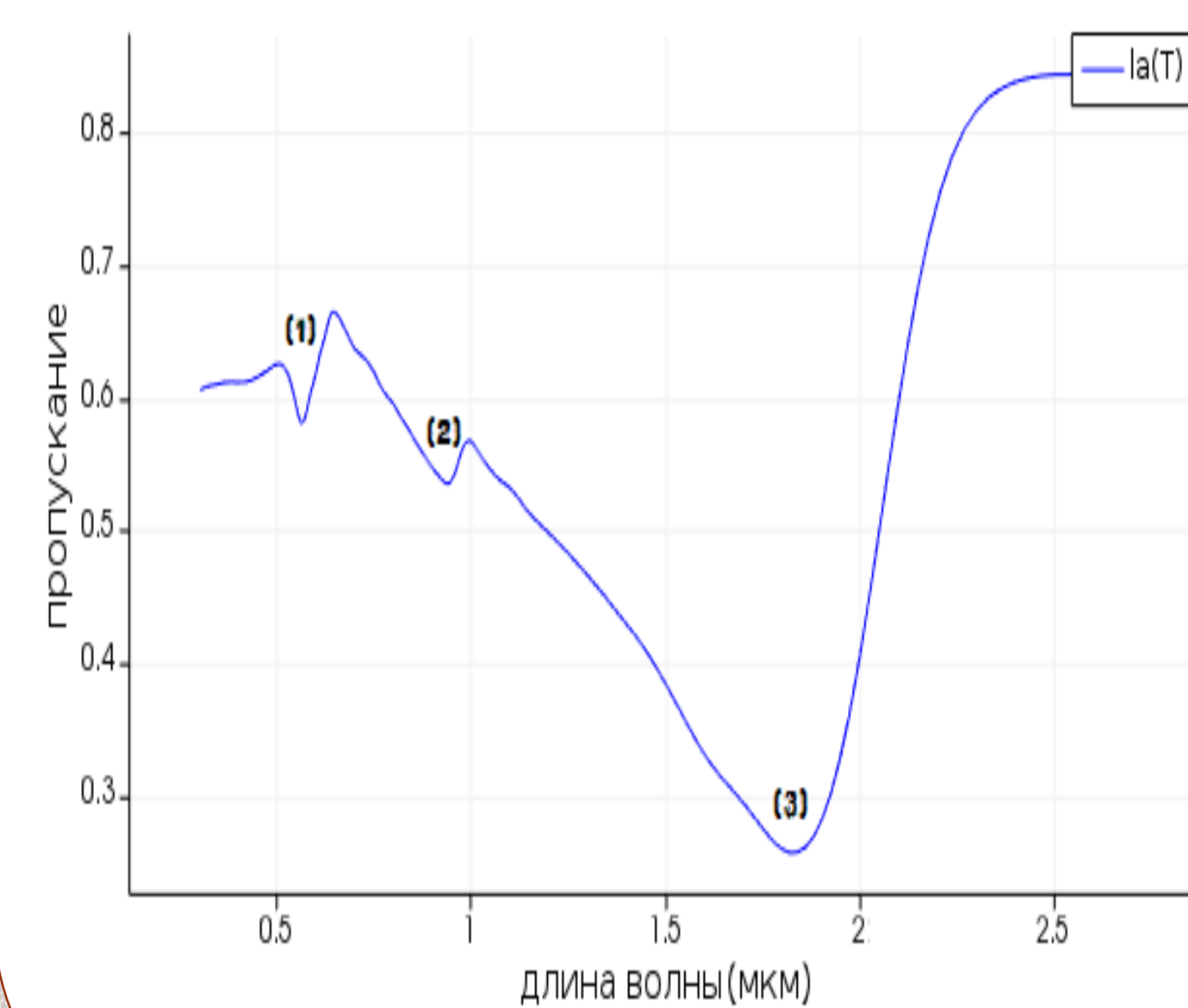
Для продольной поляризации



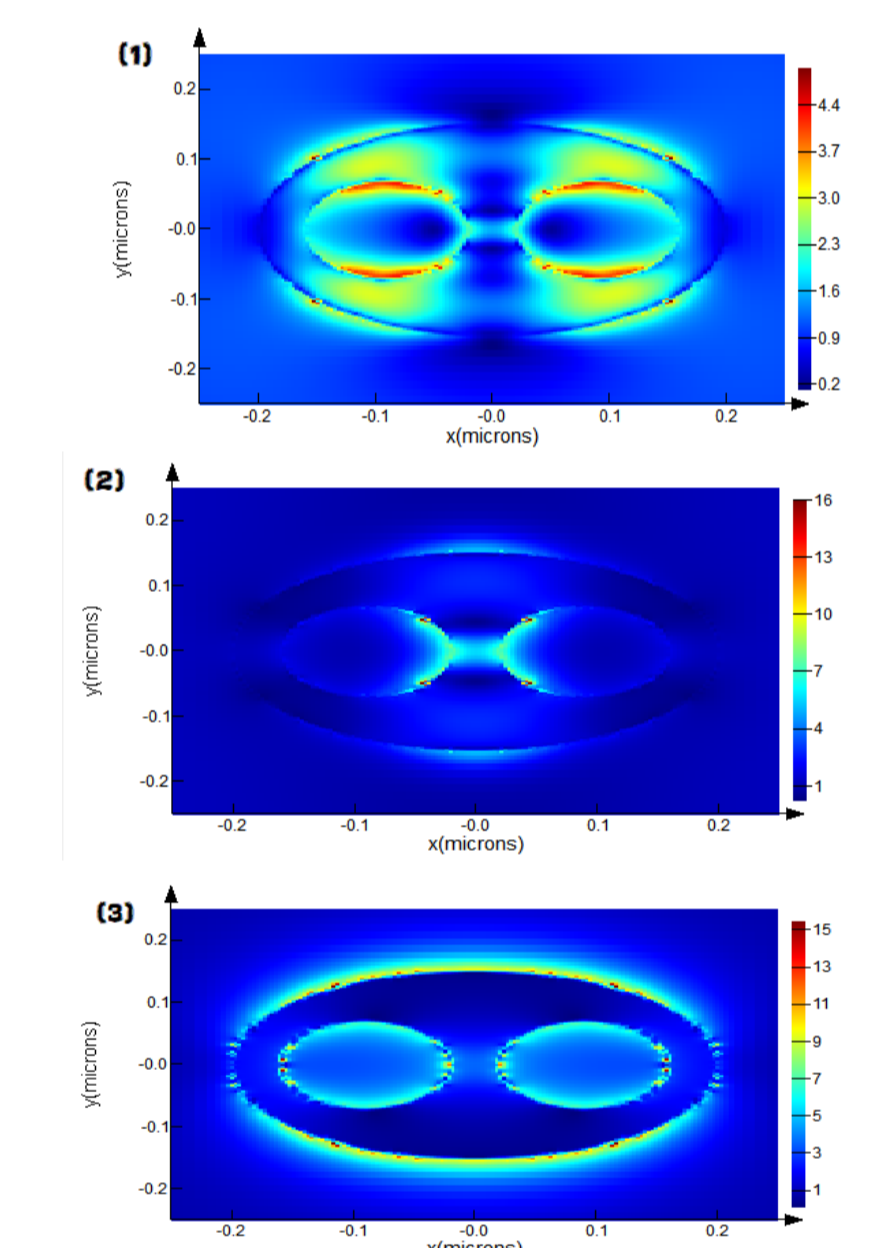
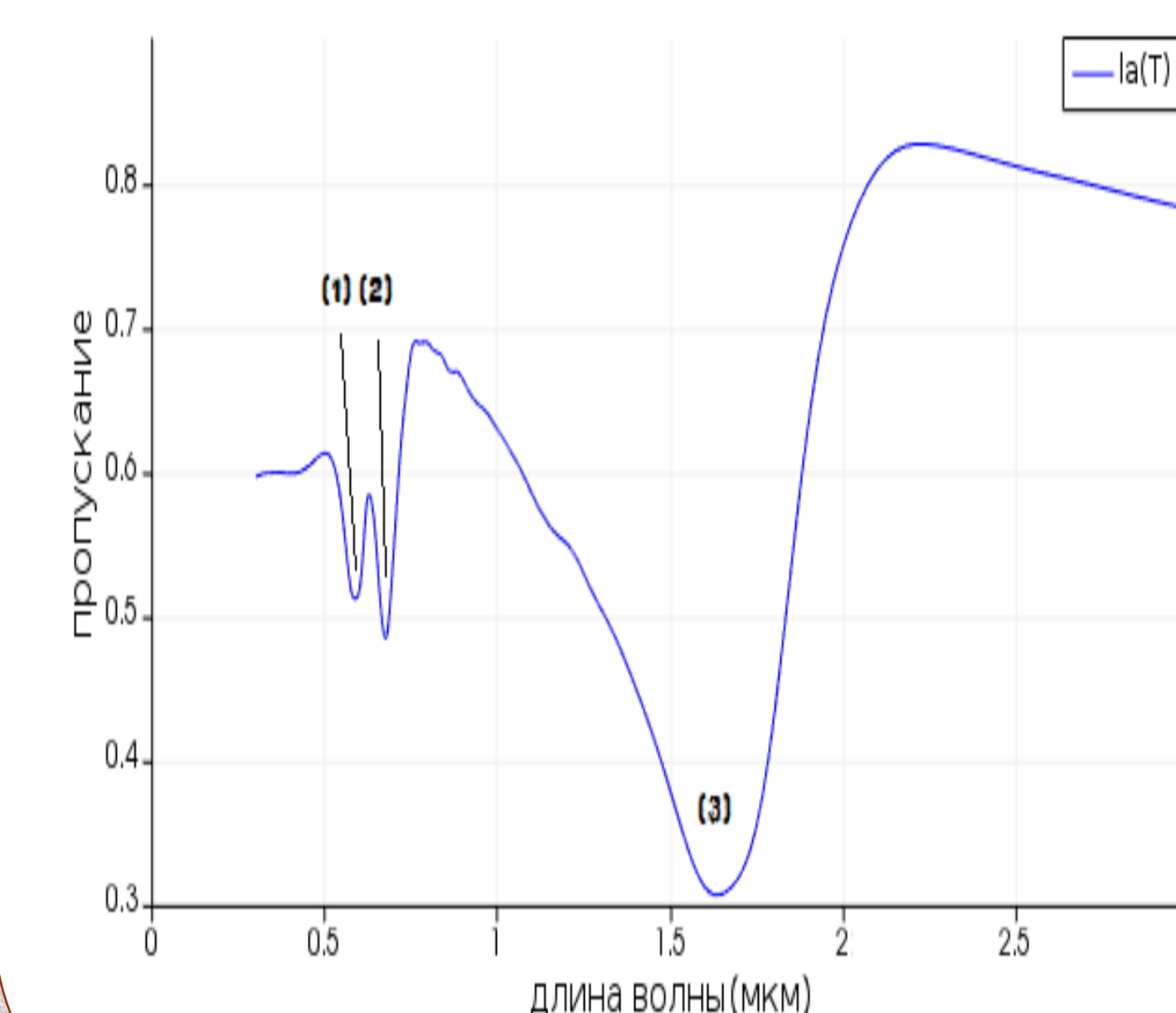
Для поперечной поляризации



## Спектр плазмонного резонанса для продольной поляризации с распределениями электрического поля для мод (1), (2), (3)



## Спектр плазмонного резонанса для поперечной поляризации с распределениями электрического поля для мод (1), (2), (3)



## Теоретические значения чувствительности в зависимости от сдвига волн при различных коэффициентах преломления

Для продольной поляризации:

$$1.33 - 1.38 : S = \frac{(1.78002 - 1.68962)}{(1.38 - 1.33)} \times 1000 = 1808.$$

Для поперечной поляризации:

$$1.33 - 1.38 : S = \frac{(1.53381 - 1.47925)}{(1.38 - 1.33)} \times 1000 = 1091.$$

## Выводы:

- Осуществлено моделирование оптических свойств наночастиц золота в форме диска с двумя отверстиями
- Результаты моделирования свидетельствуют о том, что при резонансном возбуждении в исследуемых структурах имеются области с высоким локальным полем
- Локализацией областей можно управлять путем изменения поляризации и длины волны.
- На основании теоретических расчетов чувствительности, плазмонные нанодиски с двумя отверстиями для биосенсорных приложений эффективнее по сравнению с наночастицами других геометрических форм.

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