

Моделирование возбуждения плазмонных частиц электронным пучком (EELS) с помощью метода дискретных источников

И. В. Лопушенко*

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра математики
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2
(Статья поступила 22.06.2018; Подписана в печать 10.09.2018)

Рассматривается математическая модель возбуждения наночастицы из благородного металла размером < 10 нм равномерно и прямолинейно движущимся точечным зарядом в однородном пространстве. Решение задачи (спектр EELS) строится с учетом эффекта нелокальности в рамках полуаналитического метода дискретных источников.

PACS: 02.60.Cb : 02.60.Lj : 42.25.Fx УДК: 519.63:535.42.

Ключевые слова: метод дискретных источников, электронная спектроскопия, наноплазмоника, эффект нелокальности.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время наблюдается растущий интерес к прикладным задачам наноплазмоники, предметом которой являются уникальные оптические свойства частиц и наноструктур из благородных металлов, обусловленные колебаниями электронов проводимости относительно кристаллической решетки. Присутствие таких структур в среде дает возможность преодолеть дифракционный предел Аббе и получать интенсивные локализованные электромагнитные поля, напрямую зависящие от геометрии наноструктуры или формы наночастицы. С учетом современных возможностей синтеза наночастиц это приводит к практически полному контролю над их спектрами, что в свою очередь позволяет разрабатывать инновационные устройства на основе взаимодействия плазмонных структур с электромагнитными волнами и между собой. Среди таких устройств — сверхразрешающие микроскопы, биосенсоры, нанолазер и гиперлинза [1]. Отметим, что особый интерес в последнее время вызывают свойства таких наноструктур, характерные размеры которых не превышают 10 нм — как в силу устойчивой тенденции к миниатюризации электронных устройств, так и в силу уникальных свойств частиц данных размеров [2–4]. В связи с этим настоящая работа посвящена реализации эффективного вычислительного подхода для строгого исследования спектров плазмонных наночастиц с размерами порядка десяти нанометров.

1. СПЕКТРОСКОПИЯ ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИХ ПОТЕРЬ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНАМИ

Для практического использования синтезированных плазмонных частиц требуется тщательное изучение их оптических свойств. Поскольку размер частиц в большинстве случаев значительно меньше величины ди-

фракционного предела, для этой цели удобным и эффективным инструментом являются методы электронной микроскопии, в частности — спектроскопия характеристических потерь энергии электронами (Electron Energy Loss Spectroscopy, EELS) [5, 6]. В рамках одного из вариантов реализации EELS быстрые электроны (> 50 кэВ) пролетают мимо исследуемой наночастицы, возбуждая в ней плазмонные моды и теряя при этом некоторую часть своей кинетической энергии. Изменяя спектральные характеристики прошедших электронов, можно изучать спектр возбуждения плазмонной частицы. К основным преимуществам данного подхода относятся: возможность анализа сразу всего спектра рассеяния с учетом неизлучающих волн, возможность возбуждения и анализа резонансов, невидимых в оптическом диапазоне, и высокое пространственное разрешение, позволяющее исследовать уникальные свойства структур с характерным размером порядка 1 – 10 нм, в том числе вызванные эффектом нелокальности.

Математическое моделирование EELS играет ключевую роль при интерпретации полученных результатов измерений. Для его качественного проведения необходимы строгие и при этом эффективные вычислительные подходы, позволяющие получать требуемые результаты с высокой скоростью и оценкой точности расчетов [6, 7]. Одним из известных подходов, удовлетворяющих данным критериям, является полуаналитический метод дискретных источников (МДИ) [2, 7, 8]. Однако прежде, чем перейти к решению задачи вычисления EELS-спектров плазмонных наноструктур, рассмотрим один из важнейших факторов, влияющих на их свойства — эффект нелокальности.

2. ЭФФЕКТ НЕЛОКАЛЬНОСТИ

При численном моделировании свойств плазмонных наночастиц с характерным размером менее 10 нм возникает ряд трудностей. Это связано с тем, что в данном случае классическая электродинамическая теория становится не применимой для описания возникающих физических эффектов и для проведения коррект-

*E-mail: lopushenko.ivan@physics.msu.ru

ных расчетов необходим учет так называемого эффекта нелокальности (ЭНЛ). Несмотря на то, что физические основы данного эффекта лежат в области квантовой теории, было показано, что его учет возможен и в классической электродинамике в рамках теории обобщенного нелокального оптического отклика (ОНО) [2, 3]. Это обстоятельство позволяет избежать использования трудоемких вычислительных алгоритмов, основанных на квантовой теории, и строить математические модели на основе классической электродинамики.

В рамках ОНО основы ЭНЛ можно описать следующим образом: по мере того, как размер рассеивателя из благородного металла становится меньше длины свободного пробега электронов в материале, свободные заряды накапливаются у поверхности рассеивателя, после чего внутри него формируются пространственный заряд и ток. В этом случае электрическое поле \mathbf{E} внутри рассеивателя перестает быть чисто поперечным ($\text{div}\mathbf{E} = 0$), и для адекватного описания происходящих процессов требуется привлечение продольных полей ($\text{rot}\mathbf{E} = 0$) [3]. Данное обстоятельство необходимо учитывать при записи математической постановки задачи рассеяния, поскольку в этом случае для ее однозначной разрешимости требуется привлечение дополнительного граничного условия [2, 3]. Особо отметим, что учет ЭНЛ затрудняет численное решение задачи в силу быстро осциллирующих цилиндрических функций, присутствие которых обусловлено значительным отличием величины волнового числа k_L продольной волны от величины k_T поперечной волны.

В связи с этим для численного решения задач рассеяния с учетом ЭНЛ целесообразным представляется использование высокопроизводительных полуаналитических подходов, в число которых входит МДИ. На основе данного подхода уже реализован и верифицирован вычислительный алгоритм, позволяющий строго учитывать ЭНЛ в задачах дифракции плоской электромагнитной волны на плазмонной наноструктуре требуемых размеров [2]. В настоящей работе предлагается реализация численной схемы для решения задачи неупругого рассеяния электрона на плазмонной наночастице и вычисления соответствующего спектра EELS.

3. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В настоящей работе рассматривается математическая модель взаимодействия прямолинейно и равномерно движущегося электрона с плазмонной наночастицей D_i в однородном пространстве D_0 . Будем предполагать, что электрон представляет из себя точечный единичный заряд e , движущийся вдоль оси z со скоростью v , который при этом не проходит сквозь наночастицу ($|\mathbf{b}| > r$, см. геометрию задачи на рис. 1). Таким образом, при математической формулировке задачи рассеяния можно воспользоваться известными выражениями для электромагнитного поля движущегося

точечного заряда, записанными в спектральном диапазоне [4]:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_x^{\text{inc}} &= -\frac{x - b_x}{\rho} \frac{2e\omega}{v^2\gamma\epsilon} e^{i\omega\frac{z}{v}} K_1\left(\frac{\omega\rho}{v\gamma}\right), \\ \mathbf{E}_y^{\text{inc}} &= -\frac{y - b_y}{\rho} \frac{2e\omega}{v^2\gamma\epsilon} e^{i\omega\frac{z}{v}} K_1\left(\frac{\omega\rho}{v\gamma}\right), \\ \mathbf{E}_z^{\text{inc}} &= \frac{i}{\gamma} \frac{2e\omega}{v^2\gamma\epsilon} e^{i\omega\frac{z}{v}} K_0\left(\frac{\omega\rho}{v\gamma}\right), \\ \mathbf{H}_x^{\text{inc}} &= \frac{y - b_y}{\rho} \frac{2e\omega}{v\gamma} e^{i\omega\frac{z}{v}} K_1\left(\frac{\omega\rho}{v\gamma}\right), \\ \mathbf{H}_y^{\text{inc}} &= -\frac{x - b_x}{\rho} \frac{2e\omega}{v\gamma} e^{i\omega\frac{z}{v}} K_1\left(\frac{\omega\rho}{v\gamma}\right), \\ \mathbf{H}_z^{\text{inc}} &= 0. \end{aligned}$$

Здесь $\rho^2 = (x - b_x)^2 + (y - b_y)^2$, $K_n(\cdot)$ — функция Макдональда порядка n , $\gamma = \left(\sqrt{1 - v^2/c^2}\right)^{-1}$ — Лоренц-фактор, e — единичный заряд.

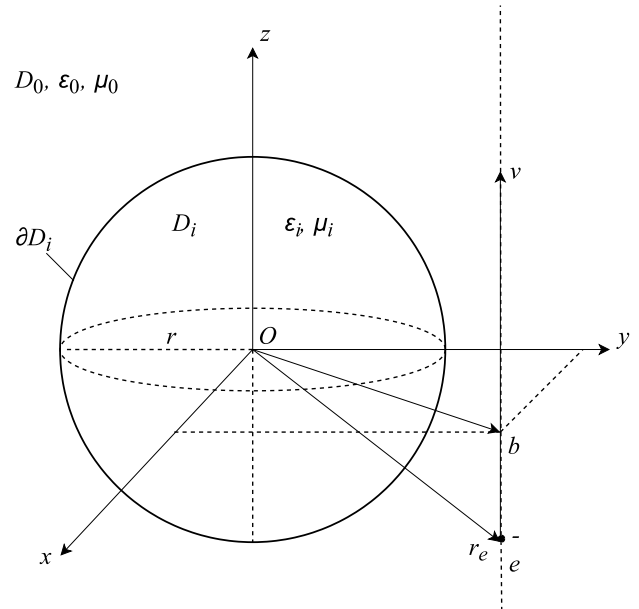


Рис. 1: Геометрия задачи

Помимо внешнего поля для записи полной математической постановки рассматриваемой задачи нам потребуются уравнения Максвелла в каждой из областей $D_{0,i}$, условия излучения на бесконечности и граничные

условия на поверхности частицы [2]:

$$\begin{aligned}
 \operatorname{rot} \mathbf{H}_i(M) &= jk (\varepsilon_T \mathbf{E}_i(M) + \xi^2 \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{E}_L(M)), \\
 \operatorname{rot} \mathbf{E}_i(M) &= -jk\mu_i \mathbf{H}_i(M), \\
 \mathbf{E}_i(M) &= \mathbf{E}_T(M) + \mathbf{E}_L(M), \quad M \in D_i, \\
 \operatorname{rot} \mathbf{H}_0(M) &= jk\varepsilon_0 \mathbf{E}_0(M), \\
 \operatorname{rot} \mathbf{E}_0(M) &= -jk\mu_0 \mathbf{H}_0(M), \\
 \mathbf{E}_0(M) &= \mathbf{E}^S(M) + \mathbf{E}^{\text{inc}}(M), \quad M \in D_0, \\
 \mathbf{n}_P \times [\mathbf{E}_i(P) - \mathbf{E}^S(P)] &= \mathbf{n}_P \times \mathbf{E}^{\text{inc}}(P), \\
 \mathbf{n}_P \times [\mathbf{H}_i(P) - \mathbf{H}^S(P)] &= \mathbf{n}_P \times \mathbf{H}^{\text{inc}}(P), \\
 \mathbf{n}_P \cdot \varepsilon_L \mathbf{E}_i(P) &= \mathbf{n}_P \cdot \varepsilon_0 \mathbf{E}_0(P), \quad P \in \partial D_i, \\
 \lim_{r \rightarrow \infty} r \left(\sqrt{\varepsilon_0} \mathbf{E}^S(M) \times \frac{\mathbf{r}}{r} - \sqrt{\mu_0} \mathbf{H}^S(M) \right) &= 0, \\
 r &= |M| \rightarrow \infty.
 \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь введены величины следующие основные обозначения: $\{\mathbf{E}^S, \mathbf{H}^S\}$ — рассеянное поле в D_0 , $\{\mathbf{E}_{0,i}, \mathbf{H}_{0,i}\}$ — полное поле в каждой из областей $D_{0,i}$, ε_0, μ_0 — материальные характеристики среды D_0 , $k = \omega/c$ — волновое число в вакууме, ω — частота внешнего возбуждения, c — скорость света, $k_0^2 = k^2 \varepsilon_0 \mu_0$ — волновое число в среде D_0 . Временная зависимость предполагается равной $e^{j\omega t}$.

Кроме того, в приведенной постановке задачи так же введены дополнительное граничное условие на нормальную компоненту вектора \mathbf{E} и величины, необходимые для корректного учета ЭНЛ в рамках ОНО [2]: \mathbf{E}_T — электрическое поле поперечных волн с соответствующим волновым числом k_T , \mathbf{E}_L — поле продольных волн с волновым числом k_L , ε_T — экспериментально измеренная диэлектрическая проницаемость материала частицы, $\varepsilon_L = \varepsilon_T - \omega_p^2 / (j\gamma\omega - \omega^2)$ — вклад в диэлектрическую проницаемость от связанных электронов и ионов с учетом межзонных переходов, γ — частота столкновений электронов, ω_p — плазменная частота металла. Отдельно следует обратить внимание на величину ξ , которая характеризует пространственный масштаб ЭНЛ и в рамках ОНО определяется как $\xi = \varepsilon_L (\beta^2 + D(\gamma + j\omega)) / (\omega^2 - j\gamma\omega)$, где D — коэффициент диффузии электронов, $\beta^2 = 3/5 v_F^2$, v_F — скорость Ферми. Отметим, что при $\beta = 0$ и $D = 0$ величина ξ обращается в нуль, что соответствует локальному случаю.

Для того, чтобы построить спектр EELS на основе решения граничной задачи (1) будем считать, что потери энергии электрона при взаимодействии с наночастицей много меньше, чем его исходная кинетическая энергия (0.5 – 50эВ против 50 – 300кэВ). В таком случае искомая величина — вероятность потери энергии электроном $P(\omega)$ — может быть выражена через рассеянное поле \mathbf{E}^S [7]:

$$P(\omega) = \frac{e}{\pi \hbar \omega} \int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{Re} \left\{ \mathbf{E}^S(\mathbf{r}_e, \omega) e^{-i\omega z/v} \right\} d\mathbf{r}_e. \tag{2}$$

4. МЕТОД ДИСКРЕТНЫХ ИСТОЧНИКОВ

Для решения поставленной задачи вычисления поля, рассеянного плазмонной частицей при ее облучении электронным пучком, предлагается гибридная схема МДИ. В данном подходе возможен эффективный учет ЭНЛ с сохранением всех ключевых преимуществ исходного вычислительного алгоритма, среди которых — апостериорная оценка погрешности вычислений, гибкость и высокая производительность [2, 7, 8].

В рамках МДИ рассеянное поле записывается в виде линейной комбинации полей дискретных источников (ДИ), которые располагаются внутри частицы. «Внутренними» ДИ будем называть источники, моделирующие полное поле внутри частицы, а «внешними» — источники, моделирующие рассеянное поле вне частицы. Внутренние и внешние источники выбирают таким образом, чтобы аналитически обеспечивать выполнение уравнений Максвелла в областях D_i и D_0 соответственно. Рассмотрим подробнее процедуру построения систем ДИ.

А. Система «внешних» источников

Система «внешних» ДИ строится на основе решения уравнения Гельмгольца в области D_0 и в настоящей работе представляет собой набор излучающих электрических и магнитных диполей. Будем рассматривать такую систему ДИ, в которой все диполи располагаются в некотором наборе точек $\{M_n\}$ внутри наночастицы, причем в каждой точке M_n находится по 3 взаимно ортогональных источника электрического типа и 3 взаимно ортогональных источника магнитного типа. Вид данных источников определяется следующими векторными потенциалами:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{A}_{x,n}^e &= h_0^{(2)}(k_0 R_{MM_n}) \mathbf{e}_x, \\
 \mathbf{A}_{y,n}^e &= h_0^{(2)}(k_0 R_{MM_n}) \mathbf{e}_y, \\
 \mathbf{A}_{z,n}^e &= h_0^{(2)}(k_0 R_{MM_n}) \mathbf{e}_z.
 \end{aligned}$$

Здесь M — точка наблюдения, M_n — точка, в которой располагается источник, $h_n^{(2)}(\cdot)$ — сферическая функция Ханкеля второго рода порядка n , \mathbf{e}_α — один из орт введенной декартовой системы координат, $R_{MM_n}^2 = (x - x_n)^2 + (y - y_n)^2 + (z - z_n)^2$.

Поле каждого из «внешних» источников можно получить из векторных потенциалов по формулам:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{E}_{\alpha,0}^e(M, M_n) &= \frac{j}{k\varepsilon_0\mu_0} \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{A}_{\alpha,n}^e, \\
 \mathbf{E}_{\alpha,0}^h(M, M_n) &= \frac{1}{\varepsilon_0} \operatorname{rot} \mathbf{A}_{\alpha,n}^e, \\
 \mathbf{H}_{\alpha,0}^{e,h}(M, M_n) &= \frac{j}{k\mu_0} \operatorname{rot} \mathbf{E}_{\alpha,0}^{e,h}(M, M_n),
 \end{aligned} \tag{3}$$

Приведенные ДИ размещаются в наборе точек $\{M_n\}$, выбранном согласно гибридной схеме метода

дискретных источников [8]. Поставив в соответствие каждому источнику некоторую неизвестную амплитуду p (для электрических источников) или q (для магнитных источников), можно записать составную часть

решения задачи (1) — полное рассеянное поле — в виде суперпозиции полей выбранных источников, которые представляют собой элементарные функции:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_N^S(M) &= \sum_{n=1}^N \sum_{\alpha=x,y,z} (p_{\alpha,n}^0 \mathbf{E}_{\alpha,0}^e(M, M_n) + q_{\alpha,n}^0 \mathbf{E}_{\alpha,0}^h(M, M_n)), \\ \mathbf{H}_N^S(M) &= \sum_{n=1}^N \sum_{\alpha=x,y,z} (p_{\alpha,n}^0 \mathbf{H}_{\alpha,0}^e(M, M_n) + q_{\alpha,n}^0 \mathbf{H}_{\alpha,0}^h(M, M_n)). \end{aligned} \quad (4)$$

Отметим, что выбранные таким образом «внешние» источники, помимо уравнений Максвелла, аналитически удовлетворяют условиям излучения на бесконечности.

В. Система «внутренних» источников

При построении решения для поля внутри частицы D_i необходим корректный учет ЭНЛ. В этом случае внутреннее электрическое поле представимо в виде суммы его поперечной и продольной компонент $\mathbf{E}_i = \mathbf{E}_T + \mathbf{E}_L$ с соответствующими волновыми числами k_T и k_L , каждая из которых удовлетворяет соответствующему уравнению Гельмгольца [3]:

$$\begin{aligned} (\nabla^2 + k_T^2) \text{rot} \mathbf{E}_T(M) &= 0, \\ (\nabla^2 + k_L^2) \text{div} \mathbf{E}_L(M) &= 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Следуя гибридной схеме МДИ, для описания поперечного поля мы воспользуемся системой регулярных источников, построенной аналогично системе «внешних» ДИ:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{x,n}^i &= j_0(k_T R_{MM_n}) \mathbf{e}_x, & \mathbf{A}_{y,n}^i &= j_0(k_T R_{MM_n}) \mathbf{e}_y, \\ \mathbf{A}_{z,n}^i &= j_0(k_T R_{MM_n}) \mathbf{e}_z, \end{aligned}$$

где введена сферическая функция Бесселя $j_n(\cdot)$ порядка n .

Для описания продольного поля в настоящей работе мы выберем решение второго из уравнений (5) в виде $\text{grad}(j_1(k_L R_{MM_n}) \sin \Theta \cos \phi)$, где Θ и ϕ — сферические координаты точки M относительно точки M_n , и добавим полученный источник к системе «внутренних» ДИ. Тогда для полей всех «внутренних» источников справедливы следующие выражения:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_L(M, M_n) &= \text{grad}(j_1(k_L R_{MM_n}) \sin \Theta \cos \phi), \\ \mathbf{E}_{\alpha,T}^e(M, M_n) &= \frac{j}{k \varepsilon_T \mu_i} \text{rot} \text{rot} \mathbf{A}_{\alpha,n}^i, \\ \mathbf{E}_{\alpha,T}^h(M, M_n) &= \frac{1}{\varepsilon_T} \text{rot} \mathbf{A}_{\alpha,n}^i, \\ \mathbf{H}_{\alpha,i}^{e,h}(M, M_n) &= \frac{j}{k \mu_i} \text{rot} \mathbf{E}_{\alpha,T}^{e,h}(M, M_n). \end{aligned}$$

Таким образом, полное поле внутри частицы можно записать по аналогии с (3):

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_L^N(M) &= \sum_{n=1}^N p_n^L \mathbf{E}_L(M, M_n), \\ \mathbf{E}_T^N(M) &= \sum_{n=1}^N \sum_{\alpha=x,y,z} (p_{\alpha,n}^T \mathbf{E}_{\alpha,T}^e(M, M_n) + q_{\alpha,n}^T \mathbf{E}_{\alpha,T}^h(M, M_n)), \\ \mathbf{H}_i^N(M) &= \sum_{n=1}^N \sum_{\alpha=x,y,z} (p_{\alpha,n}^T \mathbf{H}_{\alpha,i}^e(M, M_n) + q_{\alpha,n}^T \mathbf{H}_{\alpha,i}^h(M, M_n)), \end{aligned} \quad (6)$$

Поля (4) и (6) аналитически удовлетворяют всем

условиям поставленной граничной задачи (1), за ис-

ключением условий сопряжения на поверхности частицы.

Следовательно, для решения задачи рассеяния необходимо обеспечить только выполнение граничных условий на поверхности частицы, что достигается с помощью обобщенного метода коллокаций и алгоритмов решения переопределенной системы линейных алгебраических уравнений относительно амплитуд ДИ методами минимизации невязки в норме l_2 [2]. Как только определены амплитуды ДИ, рассеянное поле вне частицы \mathbf{E}^S можно легко посчитать в любой точке D_0 по аналитической формуле (4). Явный вид данной формулы позволяет существенно упростить интегрирование при вычислении спектра EELS в (2), что обеспечивает высокую скорость работы вычислительного алгоритма.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Рассмотрим серебряную наносферу диаметром d в однородном пространстве с $\epsilon_0 = \mu_0 = \mu_i = 1$. Расчетные параметры выбираются в соответствии с работой [3]: плазменная частота серебра $\hbar\omega_p = 8.99$ эВ, коэффициент затухания Друде $\hbar\gamma = 0.025$ эВ, скорость Ферми $v_F = 1.39 \cdot 10^6 \text{ мс}^{-1}$ и постоянная диффузии $D = 3.61 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$. Кроме того, положим прицельный параметр равным $\mathbf{b} = (b_x, b_y)$, где $b_x = d + 0.5 \text{ нм}$, $b_y = 0$, а скорость внешнего электрона $v = 50$ кэВ.

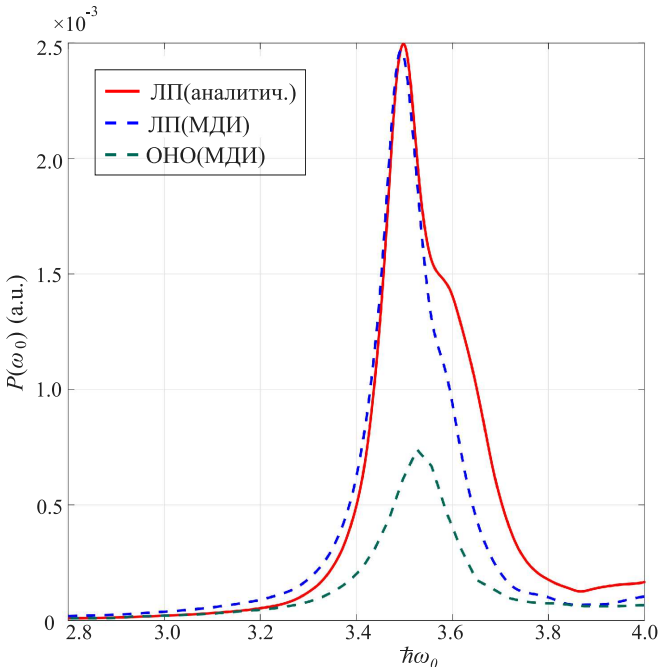


Рис. 2: Спектр EELS для Ag наносферы диаметром $d = 10$ нм в локальном приближении и в ОНО-приближении. Сплошная линия — аналитическое решение. Пунктир — численное решение по схеме МДИ

Для верификации предложенного подхода построим спектр EELS для указанной наносферы в локальном

приближении, и сравним его с аналитическим решением [9]. Результат сравнения представлен на рис. 2, из которого следует, что численный и аналитический спектры совпадают с достаточной степенью точности. Кроме того, на данном рисунке так же построен спектр указанной наносферы в ОНО-приближении, полученный по численной схеме МДИ. Видно, что учет ЭНЛ приводит к смещению частоты резонансного пика уже для частицы диаметром 10 нм.

Для того, чтобы наглядно продемонстрировать значительное влияние ЭНЛ на свойства спектров частиц с $d < 15$ нм, проанализируем зависимость резонансной частоты от диаметра сферы в локальном и ОНО-приближениях как для задачи построения спектра EELS, так и для задачи дифракции плоской волны. В качестве частицы будем использовать серебряную сферу, варьируя её диаметр d от 4 нм до 15 нм в вычислительных экспериментах. Результаты моделирования представлены на рис. 3.

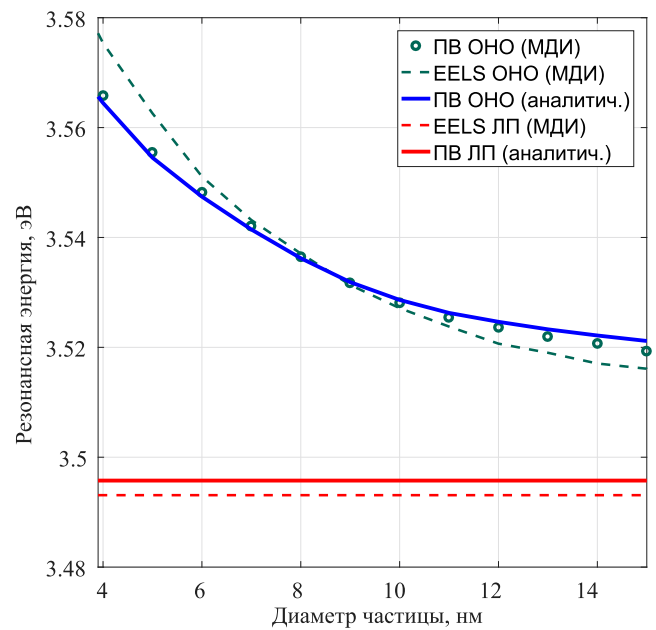


Рис. 3: Зависимость резонансной частоты $\hbar\omega_0$ от диаметра сферической серебряной частицы диаметра d для случаев её возбуждения плоской волной (ПВ) и электроном (EELS) в локальном- и ОНО-приближениях

Видно, что результатом учета эффекта нелокальности как в задаче EELS, так и в задаче дифракции плоской волны является сдвиг резонансной частоты в высокочастотную область спектра при уменьшении диаметра частицы d , причем данный эффект не имеет места в локальном приближении. Эти результаты согласуются с экспериментальными данными и аналитическим решением ОНО для дифракции плоской волны на сфере, в которых так же наблюдается сдвиг резонансной частоты [3]. Сравнение с аналитическим решением подтверждает, что предложенный подход на

основе МДИ позволяет изучать спектры плазмонных наноструктур с учетом ЭНЛ.

Следует отметить, что в общем случае численная схема МДИ позволяет исследовать частицы и структуры несферической формы [7].

В связи с этим полученные результаты могут быть использованы в качестве основы для построения новых вычислительных схем для анализа таких актуальных в приложениях наноструктур, как одиночные плазмонные диски, димеры и тримеры.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрена задача возбуждения плазмонной частицы диаметром менее 10 нм равномерно и прямолинейно движущимся электроном с учетом эффекта нелокальности плазмонной среды. Решение данной задачи построено на основе гибридной схемы метода дискретных источников, учитывающей эффект ЭНЛ в рамках тео-

рии обобщенного нелокального оптического отклика. Реализован вычислительный алгоритм, позволяющий исследовать спектры потерь энергии электронов (спектры EELS) при возбуждении ими сферических плазмонных частиц в локальном и ОНО приближениях. В результате численного эксперимента с учетом ЭНЛ установлено, что предложенный алгоритм позволяет моделировать сдвиг резонансной частоты плазмонной сферы в область высоких частот при уменьшении её диаметра, отсутствующий в локальном приближении и наблюдаемый в эксперименте.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда German-Russian Interdisciplinary Science Center (GRISC, проект M-2017b-7).

-
- [1] Климов В. В. Наноплазмоника. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010.
[2] Еремин Ю. А., Лопушенко И. В. Вестн. Моск. ун-та. Сер. 15. Вычисл. матем. и киберн. 2017. № 4. С. 14.
[3] Raza S., Bozhevolnyi S. I., Wubs M., Mortensen N. A. J. Phys.: Condens. Matter. 2015. **27**. P. 183204.
[4] de Abajo F. J. G. Rev. Mod. Phys. 2010. **82**, N 1. P. 209.
[5] Lloyd J. A., Ng S. H., Liu A. C. Y., Zhu Y., Chao W., Coenen T., Etheridge J., Gomez D. E., Bach U. ACS Nano. 2017. **11**, N 2. P. 1604.
[6] Thomas S., Matyssek C., Hergert W., Arnold M., Kiewidt L., Karamehmedovic M., Wriedt T. Plasmonics. 2016. **11**. P. 865.
[7] Wriedt T., Eremin Yu. (Eds.) The Generalized Multipole Technique for Light Scattering. Springer International Publishing AG, 2018.
[8] Еремин Ю. А., Лопушенко И. В. Вестн. Моск. Ун-та. Сер. 15. Вычисл. матем. и киберн. 2016. № 1. С. 3.
[9] de Abajo F. J. G. Phys. Rev. B. 1999. **59**. P. 3095.

Simulation of plasmonic particle excitation by an electron beam (EELS) with the Discrete Sources Method

I. V. Lopushenko

Department of Mathematics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University
Moscow 119991, Russia

E-mail: lopushenko.ivan@physics.msu.ru

A mathematical model of noble metal nanoparticle excitation by point charge in uniform straight motion is considered in homogeneous medium. Nanoparticle size is assumed to be less than 10nm. The problem solution (EELS spectrum) is constructed with the semi-analytical Discrete Sources Method taking into account the nonlocal effect.

PACS: 02.60.Cb : 02.60.Lj : 42.25.Fx.

Keywords: discrete sources method, electron spectroscopy, nanoplasmonics, nonlocal effect.

Received 22 June 2018.

Сведения об авторе

Лопушенко Иван Владимирович — аспирант; тел.: (495) 939-10-33, e-mail: lopushenko.ivan@physics.msu.ru.
