



**Введение.** В настоящее время множество вычислительных методов определения оптических характеристик металлических наночастиц являются приближениями, обладающими той или иной точностью, для определённых, заданных условий. При изменении условий будет меняться и точность приближения, соответственно. Так, например, точность различных методов будет зависеть от размера и форм-фактора частицы.

При выборе метода вычисления оптических свойств металлической наночастицы, встают вопросы о сложности и объёме вычислений, необходимых для его реализации. Метод приближения Релея (РА) требует меньшего объёма вычислений по сравнению с методом дипольной дискретной аппроксимации (DDA) и методом расширенных граничных условий (EBCM). Однако DDA и EBCM являются более точными.

Границы применимости метода РА для вычислений поглощающих и рассеивающих свойств золотых наночастиц слабо описаны в литературе, несмотря на широкую популярность метода. Однако, их наличие позволит использовать метод РА с наименьшей погрешностью, используя его в удовлетворяющих этим границам условиях.

Этим обусловлена **актуальность** настоящей работы, которая посвящена вычислению зависимости интегральной невязки для сечений рассеяния и поглощения золотых наностержней.

**Целью** данной работы является установление границ применимости приближения Рейлея для расчета спектральных характеристик золотых наностержней в спектральном диапазоне от 400 до 1200 нм.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие **основные задачи**:

- 1) проанализировать основные положения теоретической части моделирования оптических характеристик металлических наночастиц.
- 2) реализовать компьютерное моделирование оптических характеристик

золотых наночастиц.

3) рассчитать интегральную невязку с помощью результатов методов EBCM и RA.

4) построить зависимость интегральной невязки от геометрических характеристик частицы.

5) сделать вывод по полученным результатам.

**Новизна** настоящей работы состоит в том, что в современной научной литературе уделено мало внимания границам применимости популярного в вычислении оптических характеристик золотых частиц несферической формы метода Релея.

**Структура работы.** Работа состоит из введения, двух частей, заключения и списка использованной литературы.

**Основное содержание работы.** В главе 1 рассматриваются понятия «сечения экстинкции, рассеяния и поглощения», «электростатическое приближение в случае сферической и эллипсоидной частицы» и «метод расширенных граничных условий».

Рассмотрение экстинкции, сечения и поглощения является необходимым в работе, так как даёт представление о оптических характеристиках металлических наночастиц и их вычислении. Сечение экстинкции можно представить как сумму сечений поглощения и рассеяния.

В электростатическом приближении в случае сферической частицы рассмотрено представление сферической частицы малого по сравнению с длиной волны как идеальный диполь. В случае частиц эллипсоидной формы было рассмотрено получение совершенно общего выражения для поляризуемости эллипсоидальной частицы.

При рассмотрении метода граничных условий, было рассмотрено определение внутреннего и рассеянного поля, при условии что среда, в которой

погружен рассеиватель, однородна и изотропна и среда, из которой состоит рассеиватель, однородна и изотропна. Также было рассмотрено разложение электромагнитных полей и поиск коэффициентов разложения для Т-матричного метода.

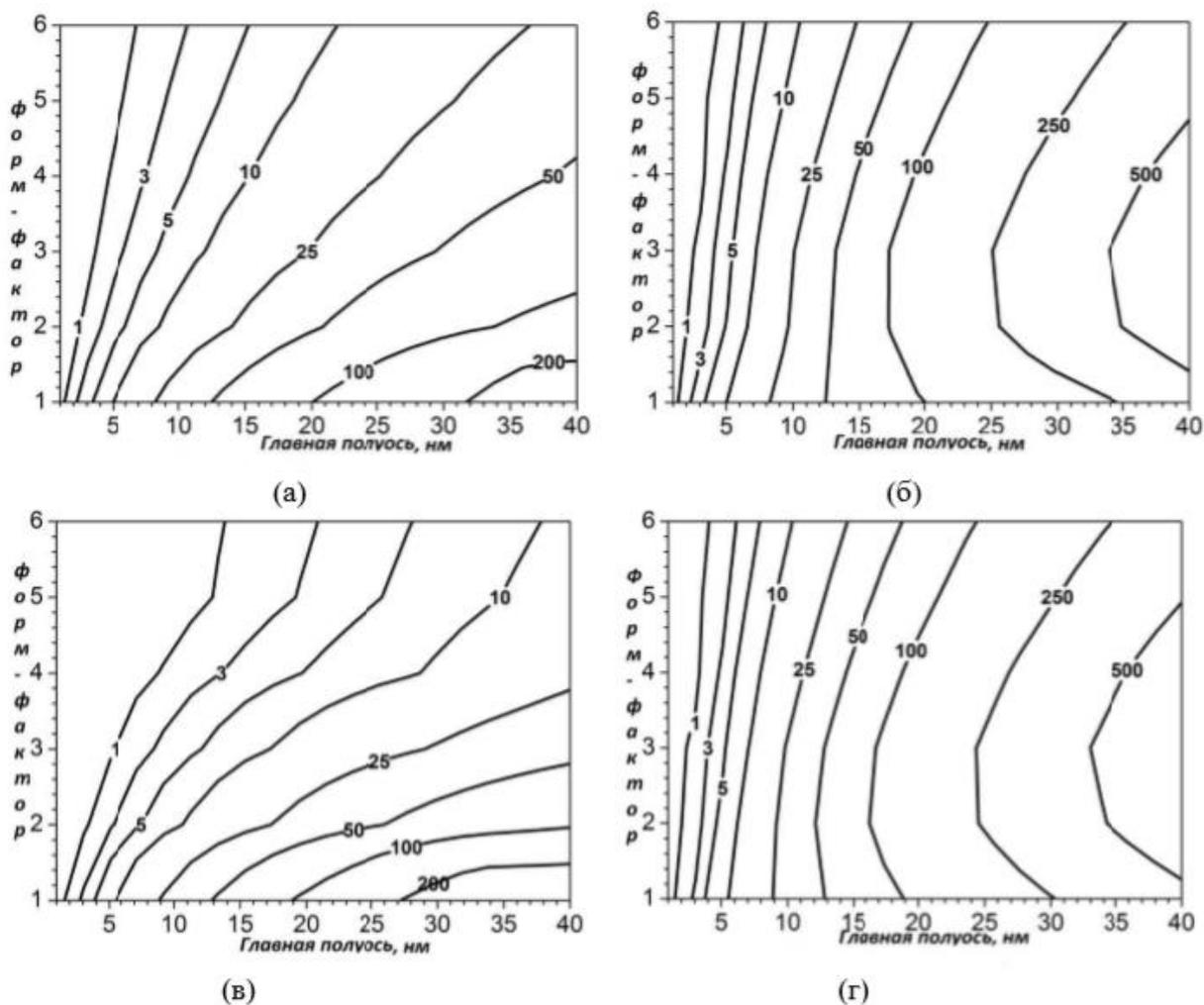
Основное внимание уделено особенностям реализации «моделирования оптических свойств», где была рассчитана зависимость интегральной невязки от размера и форм фактора золотой наночастицы. Невязка была вычислена с помощью результатов методов ЕВСМ и RA. Вычисление интегральной невязки проводилось по формуле:

$$\delta(f(x),g(x)) = 10^3 \frac{\int_{x_1}^{x_2} |f(x) - g(x)| dx}{\int_{x_1}^{x_2} |f(x)| dx},$$

где  $f(x)$  – результат вычисления методом ЕВСМ,  $g(x)$  – результат вычисления методом RA.

Метод расчёта оптических свойств наночастиц ЕВСМ считается точным, именно поэтому он был взят в качестве эталона и относительно него была рассчитана интегральная невязка.

Были проведены вычисления интегральной невязки для случаев разных размеров и форм факторов золотых наностержней, после чего была построена зависимость величины интегральной невязки от геометрических характеристик частицы.



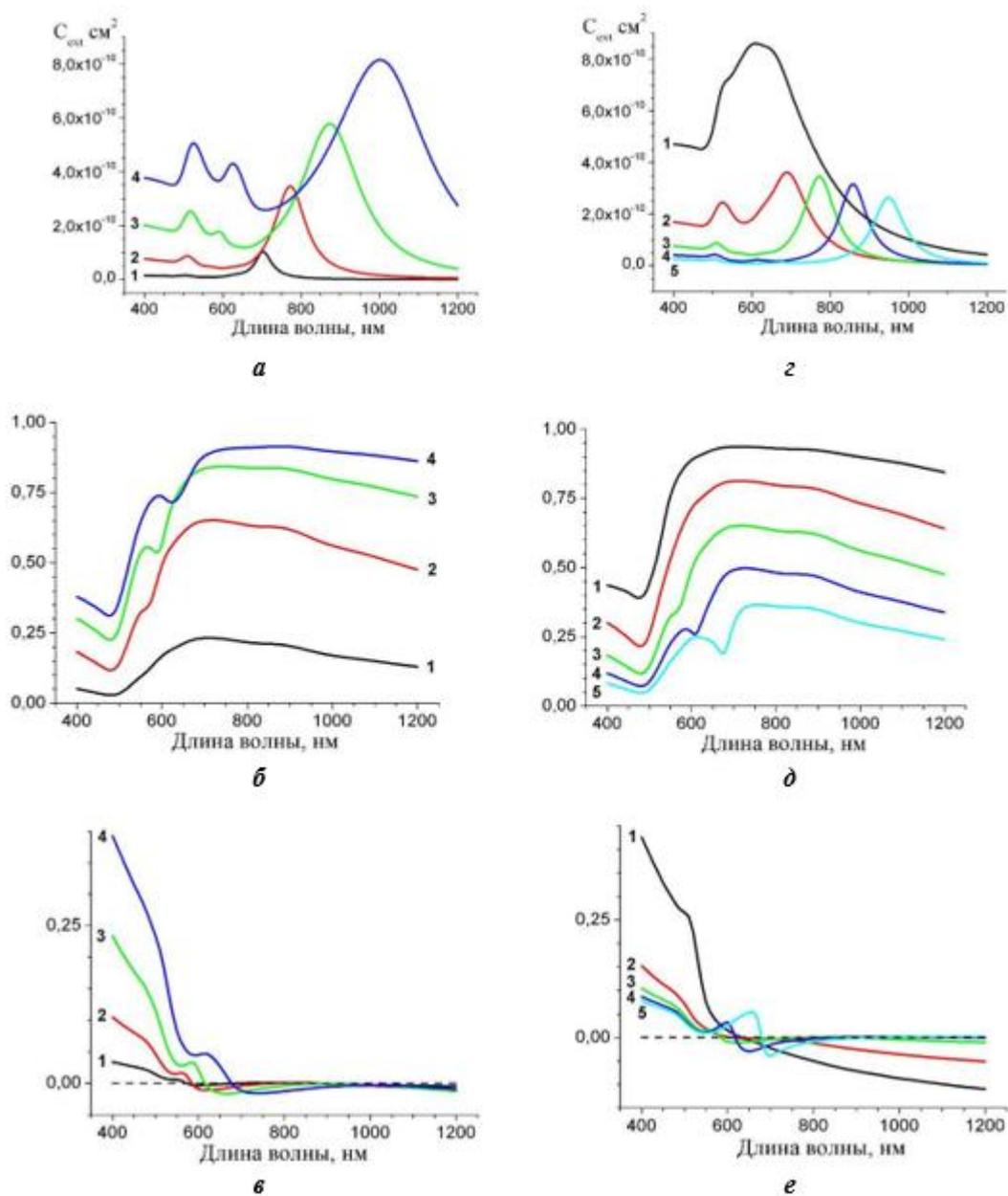
**Рис. 1.** Критерий ошибки сечения поглощения (а,б) и рассеяния (в,г) золотых наностержней для случаев ориентации главной полуоси сфероида вдоль направления оси  $x$  (а,в) и  $y$  (б,г). Плоская монохроматическая волна распространяется вдоль оси  $z$  с линейной поляризацией вдоль оси  $x$ .

По результатам вычислений, можно заметить, что величина интегральной невязки уменьшается при уменьшении главной полуоси наночастицы и увеличении форм фактора.

Если геометрические характеристики будут находиться в требуемом диапазоне, исследователь сможет сказать об возможной ошибке связанной с использованием приближения Релея. Или, оценив точность, при неудовлетворительном результате, выбрать другой метод.

Положение пика экстинкции зависит от величины форм-фактора и по мере его увеличения смещается в сторону больших длин волн. Как и для сферических частиц, для наностержней с увеличением размера частицы альbedo увеличивается, то есть стержни малого размера главным образом поглощают падающее лазерное излучение, а стержни большого размера в значительной степени рассеивают падающее излучение. С ростом форм-фактора при постоянной длине главной оси сечение поглощения наностержней увеличивается. Спектральные характеристики рассеяния в переднюю и заднюю полуплоскости сильно зависят от форм-фактора наностержня и существенно отличаются от спектров рассеяния сферических частиц эквивалентного объема. Это означает, что системы наностержней будут иметь различный цвет и для их диагностики в биотканях будут информативны методы спектроскопии диффузного светорассеяния.

В работе были приведены спектральные характеристики золотых наностержней.



**Рис. 2** Спектральные характеристики золотых наностержней: сечения экстинкции (*a*), альbedo (*б*) и фактор анизотропии (*в*) золотого наностержня с постоянным форм-фактором  $f$ , равным 3 для различных длин  $l$  главной полуоси: 1 –  $l=40$ нм, 2 –  $l=70$ нм, 3 –  $l=100$ нм, 4 –  $l=130$ нм; сечения экстинкции (*з*), альbedo (*д*) и усредненного по ориентациям фактора анизотропии (*е*) золотого наностержня с постоянной длиной главной полуоси  $l=70$ нм для различных значений форм-фактора  $f$ : 1 –  $f=1$ , 2 –  $f=2$ , 3 –  $f=3$ , 4 –  $f=4$ , 5 –  $f=5$ .

**Заклучение.** В работе были проведены вычисления сечений экстинкции и рассеяния сфероидальных наночастиц золота методом Т-матриц и

приближением Релея (RA). Для оценки границ применимости приближения Релея были вычислены зависимости интегральной невязки для сечений поглощения и рассеяния золотых наностержней с размером главной полуоси в диапазоне 1-40нм и с форм-фактором в диапазоне 1-6.

По полученным результатам можно сделать вывод о том, что ошибка расчетов методом RA быстрее нарастает при приближении частицы к сферической форме. Спектральные свойства наночастиц золота можно рассчитать методом RA с интегральной невязкой менее 1% для размеров главной полуоси менее 5 нм и 10% для полуоси менее 16нм.

Результатом работы является получение границ применения метода Релея при расчёте сечений рассеяния и поглощения.