

УДК 535.131

РАЗВИТИЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАНОЧАСТИЦ С ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ

Кичигин А.А. (Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского)

Научный руководитель – к.ф.-м.н., с.н.с. Юркин М.А. (Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского)

Существующая теория для взаимодействия наночастиц с электронным пучком покрывает только случай взаимодействия в вакууме. В реальном эксперименте частица находится на поддерживающей пластине (или внутри пластины). В данной работе была решена объемно-интегральная формулировка уравнений Максвелла в частотной области и получена обобщенная теория для произвольной (в том числе поглощающей) среды, что позволяет проводить моделирование для частиц, находящихся глубоко внутри пластины.

Введение. При изучении оптических свойств плазмонных наночастиц, ученые используют электронно-лучевую микроскопию. Основной плюс электронного пучка состоит в том, что, в отличие от оптических методов (ограниченных дифракционным пределом), он позволяет локализовать плазмонные резонансы на сечении частицы с точностью до 1 нм. При облучении наночастицы, быстрые электроны будут терять энергию (electron-energy-loss spectroscopy – EELS), а частица при взаимодействии с ними будет излучать свет (cathodoluminescence – CL). Для правильной интерпретации результатов эксперимента необходимо провести его численное моделирование на компьютере. Однако, современное состояние теории позволяет проводить такое моделирование только в вакууме – где кроме частицы и электрона ничего нет. В реальности же частица находится на поддерживающей пластине (или внутри нее).

Основная часть. В рамках данной работы была решена объемно-интегральная формулировка уравнений Максвелла в частотной области при помощи тензора Грина в однородной среде. В результате разработана обобщенная теория взаимодействия наночастиц произвольной формы и внутренней структуры с релятивистскими электронами. Выражения, полученные в рамках новой теории, верны для произвольной (даже поглощающей) внешней среды, включая случай черенковского излучения. Частный случай этих выражений для вакуума совпадает с ранее известными результатами.

Моделирование EELS и CL согласно новой теории реализовано в ПО с открытым исходным кодом ADDA (<https://github.com/alkichigin/adda>). Для наносфер в вакууме получено отличное совпадение результатов моделирования с эталонным решением (теория Лоренца-Ми). Для демонстрации новых возможностей, был промоделирован реальный эксперимент, где серебряный шар находился внутри пластины SiNx (скорость света в такой среде $0.55c$, где c – скорость света в вакууме). Электроны обладали энергией 120 кэВ (скорость $0.59c$), то есть случай черенковского излучения, возможный для моделирования только в новой теории. Рассчитанный спектр показал отличное совпадение с экспериментальным, что подтверждает применимость новой теории на практике.

Выводы. Предложенное обобщенное теоретическое описание, совместно с его реализацией в открытом ПО, дает возможность моделировать взаимодействие с электронным пучком наночастиц произвольной формы и внутренней структуры, помещенных внутрь толстой пластины.

Кичигин А.А. (автор)

Подпись

Юркин М.А. (научный руководитель)

Подпись