

Исследование эффекта пространственной дисперсии в металлической оболочке несферической магнетоплазменной наночастицы

© Ю.А. Еремин, В.В. Лопушенко[✉]

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
119991 Москва, Россия

[✉] e-mail: lopushnk@cs.msu.ru

Поступила в редакцию 22.06.2022 г.

В окончательной редакции 08.08.2022 г.

Принята к публикации 08.08.2022 г.

На основе метода дискретных источников исследуется влияние пространственной дисперсии в металлической оболочке магнетоплазменной наночастицы на поглощение электромагнитной энергии. Гибридная частица составлена из магнитного ядра Fe_3O_4 или Fe_2O_3 и золотой оболочки. Рассматривается влияние вытянутости сфероидальных частиц на уровень поглощения энергии. Показано, что учет пространственной дисперсии в оболочке приводит к снижению сечения поглощения до 30% и сопровождается сдвигом плазмонного резонанса в коротковолновую область до 25 nm. Установлено, что осреднение сечения поглощения по направлениям распространения внешнего возбуждения и поляризациям влечет за собой снижение уровня поглощенной энергии в три раза.

Ключевые слова: метод дискретных источников, плазмонный резонанс, пространственная дисперсия, теория обобщенного нелокального отклика.

DOI: 10.21883/OS.2022.10.53632.3849-22

Введение

Наноплазмоника — развивающаяся область нанофотоники, в рамках которой исследуются процессы взаимодействия излучения на коллективные колебания электронов внутри наноструктур. Свойства наноплазмонных структур в значительной степени определяются возникающими в них резонансными явлениями. В зависимости от материала, размеров и формы структур резонансы могут располагаться в широком диапазоне длин волн от ультрафиолетового до дальнего инфракрасного. Наноплазмонные структуры позволяют преодолевать релеевский предел дифракции света за счёт концентрации оптического поля вблизи поверхности структуры — на расстояниях порядка нескольких нанометров от неё. Данное явление находит множество применений как в области фундаментальных исследований, так и современных промышленных технологиях [1,2].

Плазмонные наночастицы различной структуры с уникальными оптическими свойствами используются при разработке новых технологий во многих отраслях науки и промышленности. Наночастицы ядро-оболочка представляют собой особый класс наночастиц, состоящих из внутреннего ядра, окружённого внешней оболочкой. В результате слоистые наночастицы обладают свойствами, присущими их отдельным компонентам. Как следствие, частицы ядро-оболочка приобретают повышенную функциональность и высокий потенциал их применения в широком спектре приложений, включая биомедицин-

ские, фармацевтические, катализ, электронику и оптику [3,4].

Магнетоплазмонные слоистые наночастицы, состоящие из магнитного ядра (Fe_3O_4 или Fe_2O_3) и золотой оболочки, оказались весьма эффективным инструментом адресной доставки лекарств и терапии [3,5]. Отметим основные преимущества магнетоплазмонных частиц.

1. Магнитное ядро позволяет манипулировать частицами (за счёт магнитного поля), направляя их в заданном направлении и контролируя их концентрацию, уменьшая тем самым потенциальный риск повреждения здоровых тканей.

2. Высокий индекс рефракции дает возможность синтезировать устойчивые конфигурации ядра и оболочки в широком диапазоне размеров. Золотая оболочка защищает ядро от коррозии, обеспечивая биосовместимость с тканями живого организма, а наличие плазмонного резонанса (ПР) в золотом слое дает дополнительные возможности для визуализации и лечения опухолей.

3. Изменяя размер ядра, его материал, толщину оболочки, а также форму (вытянутость) частиц, можно добиться попадания максимума энергии поглощения в окно прозрачности биологических тканей (диапазон 700–900 nm электромагнитного спектра), где поглощение окружающей биологической тканью минимально.

В настоящее время проектируются и изготавливаются экзотические наночастицы с контролируруемыми размерами, морфологией и составом для различных приложений [6,7]. При наличии металлической оболочки возникает необходимость учёта резонансных коллективных

колебаний свободных электронов, вызывающих локализованный поверхностный ПР. Резонансы приводят к резкому и сильному усилению поглощения и рассеяния оптического излучения. Часть электромагнитной энергии, поглощаемая плазмонной оболочкой, преобразуется в тепло за счет эффекта Джоуля. Таким образом освещенная наночастица уподобляется точечному источнику тепла. Введенная в ткань человека, она, освещенная на частоте ПР, вызывает выгорание и разрушение пораженной клетки. Например, слоистые наночастицы Fe_3O_4 Au могут существенно усилить поглощение в ближнем окне прозрачности биологических тканей [8], что позволяет их использовать при фототермической терапии раковых клеток [9,10].

Описание явлений ПР в наноструктурах базируется на применении фундаментальных законов физики, а именно на использовании теории Максвелла. Тем не менее, способ описания свойств наноструктур в рамках классической электродинамики и с использованием макроскопических функций плазмонного металла имеет свои ограничения. Проблемы возникают, когда соответствующие масштабы длины приближаются к субнанометровому диапазону, в котором преобладают характерные длины свободного пробега электрона или волны Ферми. В этом случае нарушаются локальные связи смещения с электрическим полем и возникает пространственная дисперсия металла [11,12]. Для изучения подобных эффектов можно использовать чисто квантовый подход, основанный на решении уравнения Шредингера для облака электронов в металле [13]. Однако такой подход становится обременительным в вычислительном отношении для частиц размером более десятка нанометров, а также в случае металлов с высокой плотностью свободных носителей заряда, таких как благородные металлы [14]. В последнем случае наиболее приемлемым является использование квазиклассических моделей, позволяющих исследовать плазмонные эффекты, оставаясь в рамках системы Максвелла. Одним из таких подходов, позволяющим учитывать пространственную дисперсию (ПД) плазмонного металла, является теория обобщенного нелокального отклика (ОНО) [15,16]. Эта теория, в частности, позволяет исследовать оптические характеристики плазмонных наночастиц несферической геометрии с учётом ПД [17].

Существует целый ряд методов, которые позволяют исследовать оптические характеристики гибридных частиц с учетом пространственной дисперсии материалов. Основную часть составляют подходы, связанные с исследованием частиц, обладающих сферической симметрией [18,19]. В случае нарушения сферической симметрии или отклонения формы поверхностей от сферической используются численно-аналитические подходы, такие как метод Т-матриц, позволяющий анализировать слоистые несферические частицы с учетом ПД в слое [20,21]. Что касается неоднородных рассеивателей произвольной формы, то имеющиеся численные результаты в большинстве случаев получены либо с использованием метода

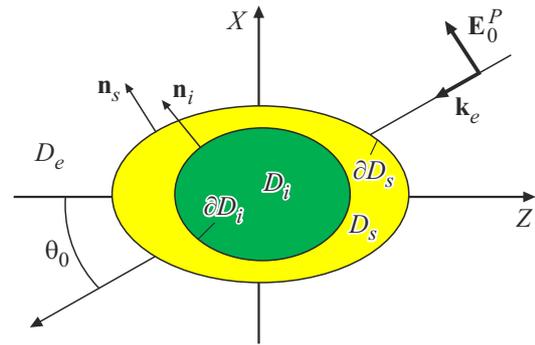


Рис. 1. Дифракция плоской волны на сферической слоистой частице.

конечных разностей во временной области (FDTD) [22], либо метода конечных элементов (FEM), входящего в пакет COMSOL Multiphysics [23]. Следует отметить, что численные методы обладают определенными ограничениями, связанными с минимальной дискретизацией неоднородности, которая составляет величину порядка 0.2 nm. Однако подобной дискретизации может оказаться недостаточно для тщательного исследования характеристик ближнего поля.

Вопросы, связанные с необходимыми условиями для учета ПД слоистых сферических частиц, были подробно изучены в диссертации [19]. Там, в частности, установлено, что при увеличении толщины золотой оболочки свыше 4 nm влияние ПД на смещение ПР в частотной области становится незаметным в широком диапазоне изменения диаметров диэлектрического ядра. Это согласуется с экспериментальными результатами, приведенными в той же работе, которые демонстрируют общую тенденцию, заключающуюся в том, что чем меньше размер плазмонного металла, тем больше отклонение результатов от классического локального случая.

В настоящей работе на основе метода дискретных источников (МДИ) исследуется влияние ПД, возникающей в тонкой золотой оболочке магнитолазмонных частиц. Определяются условия, при которых максимум сечения поглощения попадает в окно прозрачности биологических тканей. В результате моделирования установлено, что учет ПД в оболочке приводит снижению амплитуды сечения поглощения до 30% и сдвигу максимума в коротковолновую область до 25 nm.

1. Постановка граничной задачи

Запишем теперь постановку граничной задачи дифракции плоской электромагнитной (ЭМ) линейно поляризованной волны $\{\mathbf{E}_0, \mathbf{H}_0\}$, распространяющейся под углом $\pi - \theta_0$ относительно оси симметрии OZ , на слоистой осесимметричной частице (рис. 1).

Граничная задача дифракции с применением теории ОНО может быть записана в следующем виде.

1. Уравнения Гельмгольца для полного поля \mathbf{E}_i в D_i и рассеянного поля \mathbf{E}_e в D_e

$$\Delta \mathbf{E}_{i,e}(M) + k_{i,e}^2 \mathbf{E}_{i,e}(M) = 0, \quad M \in D_{i,e}. \quad (1)$$

2. Уравнения Гельмгольца для полного поля $\mathbf{E}_s = \mathbf{E}_{sT} + \mathbf{E}_{sL}$ внутри плазменной пленки D_s , которое состоит из классического поперечного безвихревого \mathbf{E}_{sT} ($\text{div} \mathbf{E}_{sT} = 0$) и продольного \mathbf{E}_{sL} ($\text{rot} \mathbf{E}_{sL} = 0$) полей

$$\Delta \mathbf{E}_{sT}(M) + k_s^2 \mathbf{E}_{sT}(M) = 0,$$

$$\Delta \mathbf{E}_{sL}(M) + k_L^2 \mathbf{E}_{sL}(M) = 0, \quad M \in D_s. \quad (2)$$

2. Граничные условия для полей на поверхностях раздела сред $\partial D_{i,s}$, включая дополнительные граничные условия для нормальных компонент полей,

$$\mathbf{n}_i \times \mathbf{E}_i(P) = \mathbf{n}_i \times \mathbf{E}_s(P),$$

$$\mathbf{n}_i \times \text{rot} \mathbf{E}_i(P) = \mathbf{n}_i \times \text{rot} \mathbf{E}_s(P), \quad P \in \partial D_i,$$

$$\varepsilon_i \mathbf{n}_i \mathbf{E}_i(P) = \varepsilon_L \mathbf{n}_i \mathbf{E}_s(P), \quad (3)$$

$$\mathbf{n}_s \times (\mathbf{E}_s(P) - \mathbf{E}_e(P)) = \mathbf{n}_s \times \mathbf{E}_0(P),$$

$$\mathbf{n}_s \times (\text{rot} \mathbf{E}_s(P) - \text{rot} \mathbf{E}_e(P)) = \mathbf{n}_s \times \mathbf{H}_0(P), \quad P \in \partial D_s,$$

$$\varepsilon_L \mathbf{n}_s \mathbf{E}_s(P) = \varepsilon_e \mathbf{n}_s (\mathbf{E}_e(P) + \mathbf{E}_0(P)). \quad (4)$$

3. Условия излучения Сильвера–Мюллера на бесконечности для рассеянного поля \mathbf{E}_e . Здесь $\{\mathbf{E}_{i,s}, \mathbf{H}_{i,s}\}$ — поля в $D_{i,s}$, $\mathbf{n}_{i,s}$ — единичные нормали к $\partial D_{s,i}$, $k_{i,s,e}^2 = k^2 \varepsilon_{i,s,e}$, $k_L^2 = \varepsilon_s / \xi^2 k^2 = \frac{2\pi}{\lambda}$, $\varepsilon_L = \varepsilon_s - \frac{\omega_p^2}{(j\gamma\omega - \omega)^2}$, $\xi^2 = \frac{\varepsilon(\beta^2 + D(\gamma + j\omega))}{(\omega^2 - j\gamma\omega)}$, ε_s — комплексная диэлектрическая проницаемость золота, ω — частота световых волн, ω_p — плазменная частота золота, γ — коэффициенты затухания, β — гидродинамическая скорость $\beta^2 = 0.6v_F^2$, v_F — скорость Ферми, D — коэффициент диффузии электронов [16]. При этом характеристики среды выбраны так, чтобы для временной зависимости $\exp\{j\omega t\}$ выполнялось $\text{Im} \varepsilon_e = 0$, $\text{Im} \varepsilon_{i,s} \leq 0$, $\text{Im} \varepsilon_L \leq 0$. Будем полагать, что поставленная граничная задача (1)–(4) с условиями излучения имеет единственное классическое решение.

Следует подчеркнуть, что ПД возникает только в металлах, обладающих высокой концентрацией свободных зарядов, таких как благородные металлы золота, серебро и платина. Поэтому как во внешней среде, так и в магнитном ядре продольное поле отсутствует.

2. Метод дискретных источников

Поскольку принципиальная схема МДИ для построения приближенного решения многократно излагалась [17,24,25], остановимся только на принципиальных этапах этого построения.

1. Рассматриваются P/S -поляризации плоской волны, распространяющейся под углом $\pi - \theta_0$ к оси симметрии геометрии задачи OZ . Приближенное решение строится

раздельно для P - и S - поляризаций. Дискретные источники (ДИ) для поперечных и продольных полей располагаются на оси симметрии OZ . В основу представления для полей полагаются распределенные мультиполи низшего порядка [25].

2. Поперечное ЭМ поле строится на основе векторных потенциалов, декартовы компоненты которых удовлетворяют уравнению Гельмгольца (1), а продольное поле — на основе скалярного потенциала, удовлетворяющего уравнению $\Delta \Psi_s(M) + k_L^2 \Psi_s(M) = 0$.

3. Построенные таким образом поля удовлетворяют всем условиям исходной граничной задачи, за исключением условий сопряжения на поверхностях раздела сред. Амплитуды ДИ определяются из удовлетворения этих условий на основе обобщенного метода коллокаций [25]. Поскольку приближенное решение представляет собой конечную сумму гармоник по азимутальной переменной φ , удовлетворение граничных условий на поверхностях $\partial D_{i,s}$ сводится к последовательному сшиванию фурье-гармоник на образующих этих поверхностей.

4. Как и раньше [24], контроль точности приближенного решения осуществляется посредством вычисления невязки граничных условий на поверхностях $\partial D_{i,s}$ с использованием поля плоской волны $\{\mathbf{E}_0, \mathbf{H}_0\}$.

5. После того как определены все амплитуды ДИ, легко вычисляются компоненты диаграммы рассеяния, которые принимают следующий вид для P -поляризации:

$$F_\theta^P(\theta, \varphi) = jk_e \sum_{m=0}^M (j \sin \theta)^m \cos\{(m+1)\varphi\} \times \sum_{n=1}^{N_e^m} \{p_{nm}^e \cos \theta + q_{nm}^e\} \exp\{-jk_e z_n^e \cos \theta\} - jk_e \sin \theta \sum_{n=1}^{N_e^0} r_n^e \exp\{-jk_e z_n^e \cos \theta\},$$

$$F_\theta^S(\theta, \varphi) = -jk_e \sum_{m=0}^M (j \sin \theta)^m \sin\{(m+1)\varphi\} \times \sum_{n=1}^{N_e^m} \{p_{nm}^e + q_{nm}^e \cos \theta\} \exp\{-jk_e z_n^e \cos \theta\} \quad (5)$$

и для S -поляризации

$$F_{theta}^S(\vartheta, \varphi) = jk_e \sum_{m=0}^M (j \sin \theta)^m \sin\{(m+1)\varphi\} \times \sum_{n=1}^{N_e^m} \{p_{nm}^e \cos \theta - q_{nm}^e\} \exp\{-jk_e z_n^e \cos \theta\},$$

$$F_{varphi}^S(\vartheta, \varphi) = jk_e \sum_{m=0}^M (j \sin \theta)^m \cos\{(m+1)\varphi\} \times \sum_{n=1}^{N_e^m} \{p_{mn}^e \cos \theta - q_{nm}^e\} \exp\{-jk_e z_n^e \cos \theta\} + jk_e \sin \theta \sum_{n=1}^{N_e^0} r_n^e \exp\{-jk_e z_n^e \cos \theta\}. \quad (6)$$

Здесь $\{p_{mn}, q_{mn}, r_n\}$ — амплитуды ДИ для различных гармоник Фурье (m) и различных положений ДИ (n), а z_n^e — координаты ДИ, соответствующих рассеянному полю.

Поскольку основной целью является вычисление сечения поглощения, мы для его определения будем использовать оптическую теорему [26], а именно соотношение вида

$$\sigma_{\text{ext}}(\theta_0, \lambda) \sigma_{\text{scs}}(\theta_0, \lambda) + \sigma_{\text{abs}}(\theta_0, \lambda).$$

Здесь σ_{ext} — сечение экстинкции, σ_{scs} — сечение рассеяния, σ_{abs} — сечение поглощения. В нашем случае сечение рассеяния определяется как

$$\sigma_{\text{scs}}^{P,S}(\theta_0, \lambda) = \int_{\Omega} DSC^{P,S}(\theta_0, \theta, \varphi) d\Omega, \quad (7)$$

где дифференциальное сечение рассеяния

$$DSC^{P,S}(\theta_0, \theta, \varphi) = |F_{\theta}^{P,S}(\theta_0, \theta, \varphi)|^2 + |F_{\varphi}^{P,S}(\theta_0, \theta, \varphi)|^2.$$

Кроме того, мы будем вычислять сечения экстинкции для P - и S -поляризаций, которые применительно к нашему могут быть вычислены как [25]

$$\sigma_{\text{ext}}^P(\theta_0, \lambda) = -\frac{4\pi}{k_e} \text{Im} F_{\theta}^P(\pi - \theta_0, \pi),$$

$$\sigma_{\text{ext}}^S(\theta_0, \lambda) = \frac{4\pi}{k_e} \text{Im} F_{\varphi}^S(\pi - \theta_0, \pi). \quad (8)$$

Суммируя изложенное выше, будем определять сечение поглощения следующим образом:

$$\sigma_{\text{abs}}(\theta_0, \lambda) = \sigma_{\text{ext}}(\theta_0, \lambda) - \sigma_{\text{scs}}(\theta_0, \lambda). \quad (9)$$

Легко заметить, что интегрирование по φ в формуле (7), в силу (5), (6), проводится в аналитическом виде и остается вычислить интеграл по θ для каждой (m) фурье-гармоники.

3. Численные результаты

Перейдем к рассмотрению численных результатов. Поскольку на практике используются гибридные наночастицы со средним размером 10–20 nm, а характерная толщина золотой плёнки составляет всего 2–5 nm [27,28], будем рассматривать именно такой диапазон размеров слоистых частиц. Выберем диаметр ядра $D = 12$ nm.

Будем исследовать сферические и сфероидальные частицы как наиболее часто используемые, при этом деформация частицы будет сохранять фиксированный объем ядра. Слоистые сфероидальные частицы также известны под наименованием слоистые нанорисинки (core-shell nanoprice) [29,30]. В качестве материала магнитного ядра будем рассматривать Fe_3O_4 и Fe_2O_3 [31], а материалом оболочки — золото. При проведении расчетов будем учитывать частотную дисперсию показателя преломления ядра $n_i = \sqrt{\varepsilon_i}$, взяв нужные значения из базы данных [32], а для золота $n_s = \sqrt{\varepsilon_s}$ — из работы [33]. Квантовые параметры золота (Au), соответствующие теории ОНО, возьмем в соответствии с [16]:

$$\hbar\omega_p = 9.02 \text{ eV}, \quad \hbar\gamma = 0.071 \text{ eV},$$

$$v_F = 1.39 \frac{10^{12} \mu\text{m}}{\text{s}}, \quad D = 8.62 \frac{10^8 \mu\text{m}^2}{\text{s}}.$$

Будем полагать, что частица находится в среде с показателем преломления $n_e = \sqrt{\varepsilon_e}$, причем $n_e = 1.33$ (вода). В работе [34] рассматривались сферические магнито-плазмонные наночастицы, состоящие из магнитного ядра и золотой оболочки с возникающей в ней ПД. В результате моделирования было установлено следующее.

1. Увеличение диаметра ядра частицы или уменьшение толщины оболочки ведет к смещению максимума ПР в длинноволновую область.

2. Использование Fe_2O_3 в ядре вместо Fe_3O_4 приводит к увеличению амплитуды ПР, одновременно смещая ПР в инфракрасный диапазон длин волн.

В настоящем исследовании мы будем рассматривать сфероидальные частицы вытянутой формы (nanoprice), которые используются на практике [30]. Преимущество подобных частиц состоит в том, что магнитное ядро вытянутых сфероидальных частиц позволяет их ориентировать в заданном направлении, используя постоянное магнитное поле. Когда наночастицы ориентированы, можно использовать поляризованный оптический источник излучения, например, с P -поляризацией для оптимизации возбуждения локального ПР сечения поглощения, тем самым усиливая процесс фототермического нагрева с одновременным применением более умеренных оптических мощностей [30].

Проведем сравнительный анализ поведения сечения поглощения для сферы и сфероида с соотношением осей $r = 2$, состоящих из ядра Fe_2O_3 , покрытого золотой оболочкой толщиной 2 nm. На рис. 2 приведены результаты для различных углов падения P -поляризованной плоской волны ($\theta_0 = 0^\circ, 90^\circ$). Из результатов видно, что в случае учета ПД (кривые NL) сферическая частица и сфероид при осевом падении волны $\theta_0 = 0^\circ$ демонстрируют сдвиг ПР до 25 nm при уменьшении его амплитуды по сравнению со случаем без учёта ПД (кривые LR). Для сфероида $r = 2$ при угле падения волны $\theta_0 = 90^\circ$ и P -поляризации (вектор \mathbf{E}_0 параллелен большей оси) амплитуда ПР возрастает в 3 раза по сравнению со сферическим случаем.

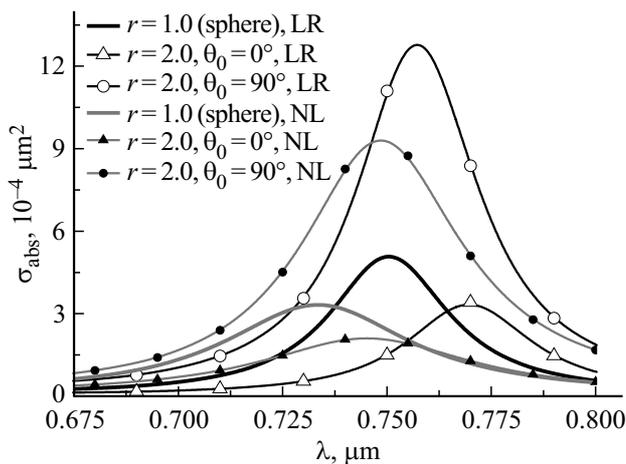


Рис. 2. Влияние ПД на сечение поглощения для сферы и сфероида с соотношением осей $r = 2$ при различных углах падения. Показаны кривые, полученные при отсутствии (LR) и наличии (NL) ПД.

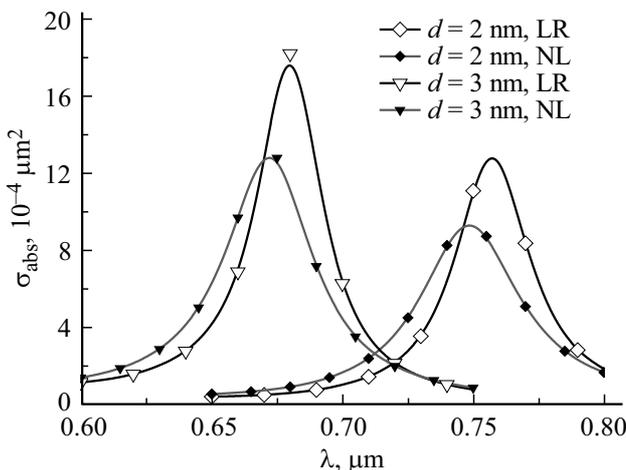


Рис. 3. Сечение поглощения для сфероидальной частицы с соотношением осей $r = 2$ и ядром Fe_2O_3 при различных толщинах золотой оболочки. Рассмотрены случаи отсутствия (LR) и наличия (NL) ПД.

На рис. 3 изображены кривые зависимости сечения поглощения от длины волны для сфероидов $r = 2$ с двумя различными толщинами оболочки при угле падения волны $\theta_0 = 90^\circ$ и P -поляризации при отсутствии (линии LR) и наличии ПД (линии NL). Видно, что увеличение толщины оболочки влечет за собой возрастание амплитуды ПР при одновременном смещении ПР на 75 нм в область коротких волн и выход из области прозрачности биоматериалов.

Аналогичное поведение можно наблюдать на рис. 4 для ядра Fe_3O_4 . При этом пики ПР оказываются сдвинутыми в область коротких длин волн примерно на те же 75 нм.

На рис. 5 приведены зависимости сечения поглощения ЭМ излучения от вытянутости сфероида с ядром Fe_2O_3

и золотой оболочкой толщиной 2 нм при угле падения P -поляризованной волны $\theta_0 = 90^\circ$. Как и ожидалось, увеличение вытянутости при сохранении объема ядра влечет за собой сдвиг ПР в область прозрачности биологических тканей с одновременным ростом амплитуды ПР. Во всех приведенных случаях влияние ПД (кривые NL) оказывается весьма существенным. Так, снижение амплитуды ПР превышает 25% при сдвиге в область коротких волн около 15 нм.

Результаты рис. 6 демонстрируют влияние окружающей среды на положение и амплитуду ПР в сфероидальной частице с ядром Fe_2O_3 и золотой оболочкой толщиной 2 нм при угле падения P -поляризованной волны $\theta_0 = 90^\circ$. Были выбраны вода $n_e = 1.33$, мозговое вещество $n_e = 1.36$ и биоматериал женской груди $n_e = 1.405$ [35]. Как явствует из результатов, увеличение плотности тканей влечет за собой сдвиг ПР в глубину

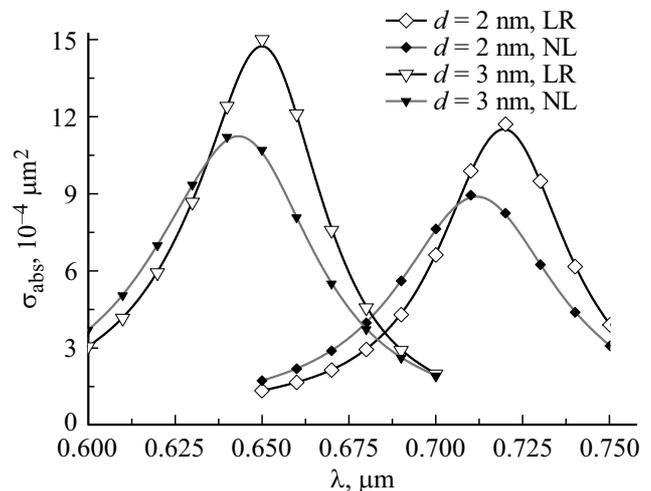


Рис. 4. Сечение поглощения для сфероидальной частицы с соотношением осей $r = 2$ и ядром Fe_3O_4 при различных толщинах золотой оболочки. Результаты получены при отсутствии (LR) и наличии (NL) ПД.

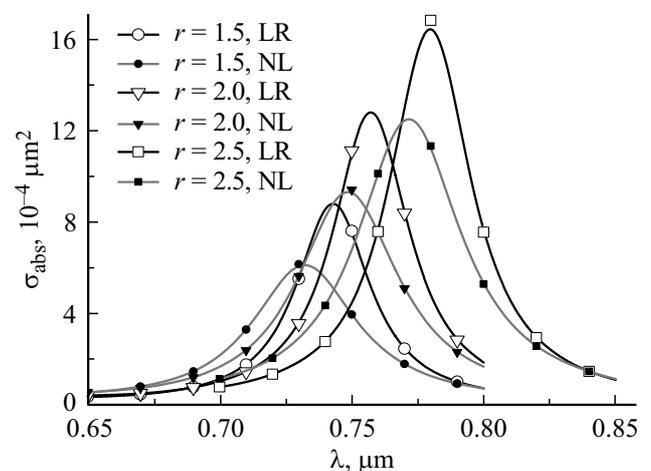


Рис. 5. Влияние вытянутости сфероида на сечение поглощения без учета (LR) и с учетом (NL) ПД.

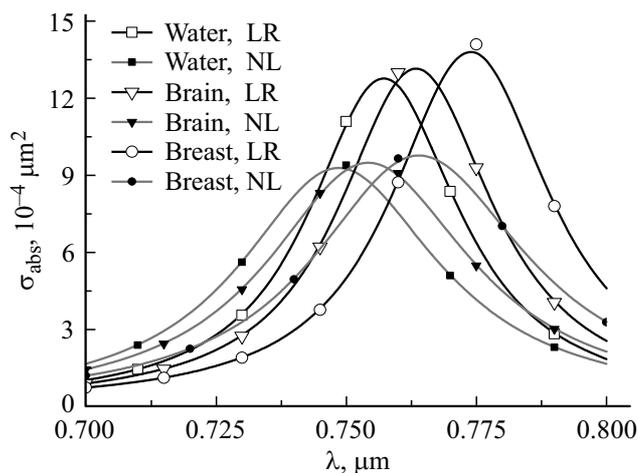


Рис. 6. Влияние окружающей среды на положение и амплитуду ПР в сфероиде с соотношением осей $r = 2$ без учета (LR) и с учетом (NL) ПД.

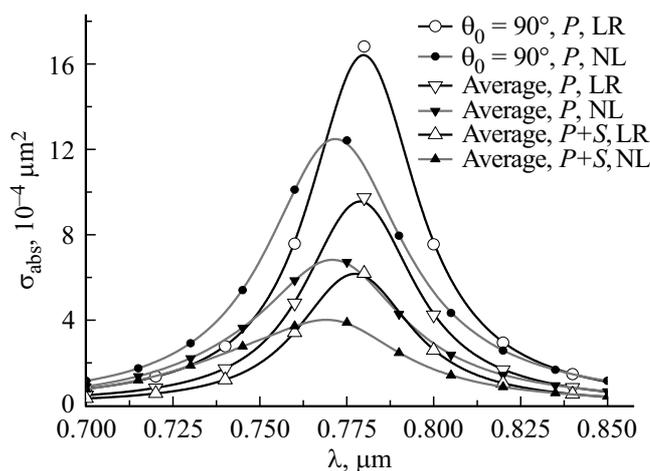


Рис. 7. Изменение сечения поглощения сфероида ($r = 2.5$) при усреднении по углам падения и поляризациям с учётом (NL) и без учёта (LR) ПД.

области прозрачности биологических тканей. Как и в предыдущих случаях, учет ПД в оболочке сопровождается снижением ПР до 30% при небольшом сдвиге в область коротких волн.

Рисунок 7 посвящен исследованию влияния ориентации частицы (ядро Fe_2O_3 и оболочка $d = 2 \text{ nm}$) по отношению к направлению распространения внешнего возбуждения. Для этого проводится усреднение сечения поглощения для P -поляризации по углам падения волны в диапазоне $\theta_0 \in (0^\circ, 90^\circ)$. Как видно из приведенных результатов, это влечет за собой снижение поглощения примерно на 42%. Дополнительное усреднение по поляризациям приводит к дополнительному снижению величины ПР. В этом случае суммарное снижение амплитуды составляет около 67%. Данное обстоятельство

демонстрирует важность учета ориентации частиц по отношению к направлению внешнего возбуждения.

Заключение

В заключении сформулируем основные результаты работы.

1. МДИ был адаптирован для исследования задачи поглощения электромагнитной энергии гибридной несферической частицей, составленной из магнитного ядра и золотой оболочки с учетом ПД золота в рамках теории ОНО.

2. Убедительно показано, что увеличение вытянутости частицы параллельно направлению поляризации внешнего поля при сохранении объема ядра частицы позволяет существенно увеличить величину поглощенной энергии и одновременно сдвинуть максимум поглощения в область прозрачности биологических тканей.

3. Учет ПД приводит к снижению величины поглощенной энергии до 30% при сдвиге в область коротких волн на величину около 25 nm.

4. Осреднение сечения поглощения по углам падения и поляризациям влечет за собой снижение поглощенной энергии в три раза. Данное обстоятельство демонстрирует важность ориентирования частиц и позволяет при использовании P -поляризованного источника излучения оптимизировать процесс фототермического нагрева на умеренных оптических мощностях, способствуя сбережению здоровых тканей и их быстрому восстановлению.

Резюмируя изложенное выше, отмечаем, что учет ПД необходим для разработки оптимальной стратегии практического применения магнитоплазмонных слоистых частиц при осуществлении фототермического нагрева онкологических образований с целью использования умеренных оптических мощностей и сбережения окружающих здоровых тканей.

Финансирование

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда № 22-21-00110, <https://rscf.ru/project/22-21-00110/>

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] J.W.M. Chon, K. Iniewski. *Nanoplasmonics. Advanced Device Applications* (CRC Press, Boca Raton, 2018). ISBN: 9781138072633
- [2] G. Barbillon. *Photonics*, **9** (112), 1 (2022). DOI: 10.3390/books978-3-0365-3704-7
- [3] G. Brennan, S. Bergamino, M. Pescio, S.A.M. Tofail, C. Silien. *Nanomaterials*, **10** (12), 2424 (2020). DOI: 10.3390/nano10122424

- [4] McK. Smith, M. McKeague, M.C. Derosa. *MethodsX*, **6**, 333 (2019). DOI: 10.1016/j.mex.2019.02.006
- [5] H-V. Tran, N. Ngo, R. Medhi, P. Srinoi, T. Liu, S. Rittikul-sittichai, T.R. Lee. *Materials*, **15** (2), 503 (2022). DOI: 10.3390/ma15020503
- [6] S. Cherukulappurath. *Fundamentals and Properties of Multifunctional Nanomaterials*, ed. by S. Thomas, N. Kalarikkal, A.R. Abraham (Elsevier, Amsterdam, 2021), ch. 13. DOI: 10.1016/B978-0-12-822352-9.00002-X
- [7] Z. Fattahi, A.Y. Khosroushahi, M. Hasanzadeh. *Biomedicine & Pharmacotherapy*, **132**, 110850 (2020). DOI: 10.1016/j.biopha.2020.110850
- [8] M. Hadded, A. Hmima, T. Maurer, A. Chehaidar, J. Plain. *Optical Materials*, **114**, 110946 (2021). DOI: 10.1016/j.optmat.2021.110946
- [9] E. Alphantéry. *Acta Biomaterialia*, **124**, 50 (2021). DOI: 10.1016/j.actbio.2021.01.028
- [10] I. Mukha, O. Chepurna, N. Vityuk, A. Khodko, L. Storozhuk, V. Dzhagan, D.R.T. Zahn, V. Ntziachristos, A. Chmyrov, T.Y. Ohulchansky. *Nanomaterials*, **11**(5), 1113 (2021). DOI: 10.3390/nano11051113
- [11] P.E. Stamatopoulou, Ch. Tserkezis. *Optical Materials Express*, **12**(5), 1869 (2022). DOI: 10.1364/OME.456407
- [12] Y. Huang, L. Gao. *J. Phys. Chem. C*, **118**(51), 30170 (2014). DOI: 10.1021/jp508289z
- [13] M. Barbry, P. Koval, F. Marchesin, R. Esteban, A.G. Borisov, J. Aizpurua, D. Sánchez-Portal. *Nano Lett.*, **15**(5), 3410 (2015). DOI: 10.1021/acs.nanolett.5b00759
- [14] M. Kupresak, X. Zheng, A.E. Vandenbosch, V.V. Moshchalkov. *Adv. Theory and Simul.*, **3**(1), 1900172 (2020). DOI: 10.1002/adts.201900172
- [15] N.A. Mortensen, S. Raza, M. Wubs, T. Søndergaard, S.I. Bozhevolnyi. *Nature Communications*, **5**, 3809 (2014). DOI: 10.1038/ncomms4809
- [16] M. Wubs, N.A. Mortensen. *Quantum Plasmonics*, ed. by S.I. Bozhevolnyi, L. Martin-Moreno, F. Garcia-Vidal (Springer, Berlin/Heidelberg, 2017), p. 279. DOI: 10.1007/978-3-319-45820-5_12
- [17] Ю.А. Еремин. *Опт. и спектр.*, **128**(9), 1388 (2021). DOI: 10.21883/OS.2020.09.49881.141-20 [Yu.A. Eremin. *Opt. Spectrosc.*, **128**, 1500 (2021). DOI: 10.1134/S0030400X20090088].
- [18] C. David, F.J. García de Abajo. *J. Phys. Chem. C*, **115**(40), 19470 (2011). DOI: 10.1021/jp204261u
- [19] C. David. *Nonlocal and Collective Phenomenain the Plasmons of Metallic Nanostructures* (Doctoral Thesis, Universidad Autonoma de Madrid, 2014).
- [20] Y. Huang, L. Gao. *J. Phys. Chem. C*, **118**(51), 30170 (2014). DOI: 10.1021/jp508289z
- [21] A. Doicu, Yu. Eremin, T. Wriedt. *J. Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **254**, 107196 (2020). DOI: 10.1016/j.jqsrt.2020.107196
- [22] J.M. McMahon, S.K. Gray, G.C. Schatz. *Phys. Rev. B*, **82**(3), 035423 (2010). DOI: 10.1103/PhysRevB.82.035423
- [23] *COMSOL — Software for Multiphysics Simulation* [Электронный ресурс]. URL: <https://www.comsol.com/>
- [24] Ю.А. Еремин, А.Г. Свешников. *Журн. вычисл. матем. и матем. физ.*, **61**(4), 34 (2021). DOI: 10.31857/S0044466921040049 [Yu.A. Eremin, A.G. Sveshnikov. *Comput. Math. and Math. Phys.*, **61**(4), 564 (2021). DOI: 10.1134/S0965542521040047].
- [25] Ю.А. Еремин. *Опт. и спектр.*, **129**(8), 1079 (2021). DOI: 10.21883/OS.2021.08.51205.1872-21 [Yu.A. Eremin. *Opt. Spectrosc.*, **129**, 1095 (2021). DOI: 10.1134/S0030400X21080087].
- [26] R.G. Newton. *Scattering Theory of Waves and Particles* (McGraw Hill, 1966).
- [27] Z. Izadiyan, K. Shameli, M. Miyake, S-Y. Teow, S-C. Peh, S.E. Mohamad, S.H.M. Taib. *Mater. Sci. Eng.: C*, **96**, 51 (2019). DOI: 10.1016/j.msec.2018.11.008
- [28] T. Dasri, A. Chingsungnoen. *J. Magnet. Magnet. Mat.*, **456**, 368 (2018). DOI: 10.1016/j.jmmm.2018.02.066
- [29] T.T. Nguyen, F. Mammari, S. Ammar. *Nanomaterials*, **8**(3), 149 (2018). DOI: 10.3390/nano8030149
- [30] C.M. García-Rosas, L.A. Medina, P. Lopez, N. Large, A. Reyes-Coronado. *J. Nanoparticle Research*, **23**, 144 (2021). DOI: 10.1007/s11051-021-05261-x
- [31] T. Mahmoudi-Badiki, E. Alipour, H. Hamishehkar, S.M. Golabi. *J. Electroanal. Chem.*, **788**, 210 (2017). DOI: 10.1016/j.jelechem.2017.02.011
- [32] *Refractive index database* [Электронный ресурс]. URL: <https://refractiveindex.info>
- [33] P.B. Johnson, R.W. Christy. *Phys. Rev. B*, **6**, 4370 (1972). DOI: 10.1103/PhysRevB.6.4370
- [34] Yu.A. Eremin, V.V. Lopushenko. *Nanomaterials*, **11**, 3297 (2021). DOI: 10.3390/nano11123297
- [35] R. Khan, B. Gul, S. Khan, H. Nisar, I. Ahmad. *Photodiagnosis Photodyn. Ther.*, **33**, 102192 (2021). DOI: 10.1016/j.pdpdt.2021.102192