

Задача дифракции на плазмонной сфере с мезоскопическими граничными условиями для потенциалов Дебая

Арьянова А. О.^{1*}, Лопушенко В. В.^{1*}

^{1*} МГУ имени М.В. Ломоносова, Ленинские горы, Москва, 119991, Москва, Россия.

* Автор(ы), ответственный(ые) за переписку. E-mail(s): annaaryanova@gmail.com; lopushnk@cs.msu.ru;

Аннотация

В работе рассматривается решение задачи дифракции на плазмонной сфере с мезоскопическими граничными условиями, позволяющими учитывать квантовые эффекты на поверхности металла. Решение строится с помощью электромагнитных потенциалов Дебая. Показано, что, как и в классическом случае, краевая задача для электромагнитного поля сводится к двум скалярным задачам для пары потенциалов, а полученные в работе мезоскопические аналоги граничных условий сводятся к классическим условиям сопряжения для потенциалов Дебая в отсутствие квантовых эффектов. Особенностью полученных мезоскопических условий является наличие в них не только первой, но и второй нормальной производной потенциалов. Получены решения сформулированных скалярных задач и построены представления для полей, которые полностью совпали с решением соответствующей векторной задачи. Таким образом, по аналогии с классическими подходами, можно сделать вывод об эквивалентности мезоскопических краевых задач для электромагнитного поля и потенциалов Дебая.

Ключевые слова: Дифракция на сфере, теория Ми, потенциалы Дебая, мезоскопические граничные условия, наноплазмоника

Получено редакцией 14.02.2026; внесены авторские правки 17.02.2026; принята к публикации 20.02.2026

1 Введение

В настоящее время плазмонные наночастицы находят разнообразные применения в технике, медицине, химии, биологии, и других областях. При определенной длине волны падающего на частицу электромагнитного излучения наблюдается плазмонный резонанс – явление резкого возрастания интенсивности поля вблизи частицы. Зависимость положения резонанса от материала среды, в которой находится частица, в частности, позволяет создавать ультра-чувствительные сенсоры, работающие на основе плазмонных эффектов и способные улавливать единичные молекулы некоторых веществ [1]. Энергия, поглощенная плазмонной частицей, выделяется в окружающее пространство в виде тепла, приводя к так называемому фототермическому эффекту, лежащему в основе фототермической терапии – неинвазивного метода лечения опухолей посредством введения в них наночастиц с последующим облучением их светом. При этом клетки опухоли разрушаются в результате локального теплового воздействия. В настоящее время активно проводятся исследования метода *in vitro* и *in vivo* для внедрения его в клиническую практику [2].

Наибольшее распространение в практических приложениях получили наночастицы сферической формы [3]-[4], теоретическое описание которых в рамках классической электродинамики дает теория Ми – фундаментальная аналитическая методика решения задачи дифракции на однородной сфере, разработанная Густавом Ми в начале прошлого века. Данная теория вместе с её обобщениями для случаев многослойной сферы и кластера сфер является наиболее популярным методом решения ряда задач дифракции и подробно освещена в литературе, например в [5]. Существует также подход к решению подобных задач, использующий потенциалы Дебая, которые оказываются удобными не только в электродинамике [6], но и в других областях [7]. Этот подход основан на представлении электрических и магнитных полей с помощью пары скалярных потенциалов, для которых из векторных уравнений Максвелла получаются скалярные волновые уравнения, решения которых записываются в виде ряда с неизвестными коэффициентами. Для определения коэффициентов ряда осуществляется переход от граничных условий для касательных компонент электромагнитных полей к граничным условиям для потенциалов Дебая. Следует отметить, что с помощью потенциалов Дебая можно решать задачи дифракции не только на сферических частицах, но и на цилиндрических, эллиптических и др. [8].

При изучении плазмонных наночастиц сверхмалых размеров классического решения оказывается недостаточно из-за возникающих в металле квантовых эффектов [9], существенно влияющих на характеристики плазмонного резонанса. В связи с этим в наноплазмонике было предложено расширение классической теории Максвелла с применением

мезоскопических граничных условий, обобщающих условия непрерывности тангенциальных компонент электромагнитного поля для учета поверхностных квантовых эффектов [10]-[11]. Для сферических частиц построено мезоскопическое расширение теории Ми [12]. В данной работе показано, что соответствующие мезоскопические граничные условия могут быть сформулированы для потенциалов Дебая. Такой подход делает возможным переход от векторной задачи к скалярной, что существенно упрощает получение аналитических решений и проведение расчетов при исследовании характеристик плазмонных наносфер с учетом квантовых эффектов.

2 Постановка задачи для электромагнитного поля

Рассмотрим задачу рассеяния плоской электромагнитной волны $\mathbf{E}^{inc}, \mathbf{H}^{inc}$ на сферической наночастице радиуса R . Пусть D_1 — область внутри сферы, ∂D_1 — поверхность сферы, а внешняя среда — $D_0 = \mathbb{R}^3/\bar{D}_1$. Будем считать, что все среды немагнитные, т.е. $\mu = 1$. Требуется найти поле рассеянной волны $\mathbf{E}^0, \mathbf{H}^0$ в области D_0 и поле $\mathbf{E}^1, \mathbf{H}^1$ в области D_1 , удовлетворяющие уравнениям Максвелла в $D_{0,1}$ (1), условиям излучения Сильвера-Мюллера [13] на бесконечности (2) и мезоскопическим условиям на границе ∂D_1 (3)

$$\operatorname{rot} \mathbf{H}^{0,1} = -ik\varepsilon_{0,1}\mathbf{E}^{0,1}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{E}^{0,1} = ik\mathbf{H}^{0,1}, \quad (1)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r \left(\sqrt{\varepsilon_0} \mathbf{E}^0 \times \frac{\mathbf{r}}{r} + \mathbf{H}^0 \right) = 0, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_1 \times [\mathbf{H}^1(M) - \mathbf{H}^{tot}(M)] &= j\omega d_{\parallel} \{ \mathbf{n}_1 \times [\mathbf{D}^1(M) - \mathbf{D}^{tot}(M)] \} \times \mathbf{n}_1, \\ \mathbf{n}_1 \times [\mathbf{E}^1(M) - \mathbf{E}^{tot}(M)] &= -d_{\perp} \mathbf{n}_1 \times \nabla \{ \mathbf{n}_1 \cdot [\mathbf{E}^1(M) - \mathbf{E}^{tot}(M)] \}, \\ M \in \partial D_1, \end{aligned} \quad (3)$$

где $\mathbf{E}^{tot} = \mathbf{E}^{inc} + \mathbf{E}^0$, $\mathbf{H}^{tot} = \mathbf{H}^{inc} + \mathbf{H}^0$ — полное поле в области D_0 , d_{\perp}, d_{\parallel} — поперечный и продольный параметры Фейбельмана для границы ∂D_1 , \mathbf{n}_1 — внешняя нормаль к ∂D_1 , $\varepsilon_{0,1}$ — диэлектрические проницаемости сред в D_0 и D_1 соответственно, \mathbf{D} — вектор электрического смещения, $k = 2\pi/\lambda$ — волновое число в вакууме. Параметры Фейбельмана представляют собой функции поверхностного отклика, имеющие комплексные значения и зависящие от длины волны падающего излучения, которые могут быть определены как экспериментально [11], так и с помощью теоретических расчётов [14],[15]. При отсутствии квантовых эффектов оба параметра принимают нулевые значения, т.е. $d_{\perp} = d_{\parallel} = 0$, и выражения (3) сводятся

к классическим условиям непрерывности касательных компонент полей

$$\begin{aligned}\mathbf{n}_1 \times [\mathbf{H}^1(M) - \mathbf{H}^{\text{tot}}(M)] &= 0, \\ \mathbf{n}_1 \times [\mathbf{E}^1(M) - \mathbf{E}^{\text{tot}}(M)] &= 0, M \in \partial D_1.\end{aligned}\quad (4)$$

Зададим для определенности направление распространения падающей плоской волны вдоль оси Oz, когда поле $\mathbf{E}^{\text{inc}}, \mathbf{H}^{\text{inc}}$ имеет вид

$$\begin{aligned}\mathbf{E}^{\text{inc}} &= \mathbf{e}_x \exp(ik_0 z), \\ \mathbf{H}^{\text{inc}} &= \mathbf{e}_y \sqrt{\varepsilon_0} \exp(ik_0 z),\end{aligned}\quad (5)$$

где $k_0 = k\sqrt{\varepsilon_0}$ — волновое число в D_0 , а зависимость от времени выбрана в виде $\exp(-i\omega t)$.

3 Краевая задача для потенциалов Дебая

Потенциалами Дебая удается воспользоваться тогда, когда поверхность рассеивателя совпадает с полной координатной поверхностью одной из ортогональных криволинейных систем координат [16]. В общем случае связь между электромагнитным полем и скалярными потенциалами может быть выражена через коэффициенты Ламе соответствующей системы координат. В рассматриваемой задаче дифракции мы используем сферическую систему координат (r, θ, φ) .

Пусть электромагнитное поле \mathbf{E}, \mathbf{H} удовлетворяет условию $E_r \neq 0, H_r = 0$. В таком случае оно называется *полем электрического типа* и выражается через электрический потенциал u . Аналогично, если электромагнитное поле \mathbf{E}', \mathbf{H}' удовлетворяет условию $E'_r = 0, H'_r \neq 0$, оно называется *полем магнитного типа* и выражается через магнитный потенциал v . Таким образом, если произвольное электромагнитное поле представимо в виде суперпозиции полей электрического и магнитного типа, то его можно выразить через два скалярных потенциала u и v следующим образом:

$$\begin{aligned}E_r &= \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + k_i^2 u, & H_r &= \frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + k_i^2 v, \\ E_\theta &= \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} + \frac{ik}{r \sin \theta} \frac{\partial v}{\partial \varphi}, & H_\theta &= \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} - \frac{ik}{r \sin \theta} \frac{\partial u}{\partial \varphi}, \\ E_\varphi &= \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial u}{\partial \varphi} - \frac{ikr}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta}, & H_\varphi &= \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v}{\partial \varphi} + \frac{ikr}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta},\end{aligned}$$

где u, v — скалярные функции, такие, что $u = r \cdot \bar{u}$ и $v = r \cdot \bar{v}$, а \bar{u} и \bar{v} удовлетворяют волновому уравнению, записанному в сферических координатах

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \bar{u}, \bar{v}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \bar{u}, \bar{v}}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \bar{u}, \bar{v}}{\partial \varphi^2} + k_i^2 \bar{u}, \bar{v} = 0. \quad (6)$$

Здесь $k_i = k \sqrt{\varepsilon_i}$ — волновое число в среде D_i , $i = 0, 1$.

Пусть $u^{0,1,inc}$, $v^{0,1,inc}$ — потенциалы соответствующих полей и $u^0 + u^{inc} = u^{tot}$, $v^0 + v^{inc} = v^{tot}$. Из классических условий непрерывности касательных компонент полей (4) на границе ∂D_1 получаются соответствующие граничные условия для потенциалов Дебая [16]

$$\begin{aligned} k_1^2 u^1 &= k_0^2 u^{tot}, & v^1 &= v^{tot}, \\ \frac{\partial u^1}{\partial r} &= \frac{\partial u^{tot}}{\partial r}, & \frac{\partial v^1}{\partial r} &= \frac{\partial v^{tot}}{\partial r}. \end{aligned} \quad (7)$$

Покажем, что возможно также получить аналогичные соотношения из мезоскопических граничных условий (3). Для этого запишем (3) покомпонентно

$$\begin{aligned} H_\varphi^1 - H_\varphi^{inc} &= H_\varphi^0 = -j\omega d_{\parallel} (\varepsilon_1 E_\theta^1 - \varepsilon_0 E_\theta^{inc} - \varepsilon_0 E_\theta^0), \\ H_\theta^1 - H_\theta^{inc} &= H_\theta^0 = j\omega d_{\perp} (\varepsilon_1 E_\varphi^1 - \varepsilon_0 E_\varphi^{inc} - \varepsilon_0 E_\varphi^0), \\ \left[E_\varphi^1 + \frac{d_{\perp}}{R \sin \theta} \frac{\partial E_\varphi^1}{\partial \varphi} - E_\varphi^0 - \frac{d_{\perp}}{R \sin \theta} \frac{\partial E_\varphi^0}{\partial \varphi} \right] &= \left[E_\varphi^{inc} + \frac{d_{\perp}}{R \sin \theta} \frac{\partial E_\varphi^{inc}}{\partial \varphi} \right], \\ E_\theta^1 + \frac{d_{\perp}}{R} \frac{\partial E_\theta^1}{\partial \theta} - E_\theta^0 - \frac{d_{\perp}}{R} \frac{\partial E_\theta^0}{\partial \theta} &= \left[E_\theta^{inc} + \frac{d_{\perp}}{R} \frac{\partial E_\theta^{inc}}{\partial \theta} \right] \end{aligned} \quad (8)$$

и подставим в (8) представления полей через скалярные потенциалы. Из первых двух уравнений получим

$$\begin{aligned} i\omega \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\varepsilon_1 u^1 - \varepsilon_0 u^{tot} + d_{\parallel} \left(\varepsilon_1 \frac{\partial u^1}{\partial r} - \varepsilon_0 \frac{\partial u^{tot}}{\partial r} \right) \right] + \\ + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[\frac{\partial v^1}{\partial r} - d_{\parallel} (k_1^2 v^1 - k_0^2 v^{tot}) \right] &= 0, \\ -i\omega \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[\varepsilon_1 u^1 - \varepsilon_0 u^{tot} + d_{\parallel} \left(\varepsilon_1 \frac{\partial u^1}{\partial r} - \varepsilon_0 \frac{\partial u^{tot}}{\partial r} \right) \right] + \\ + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\frac{\partial v^1}{\partial r} - d_{\parallel} (k_1^2 v^1 - k_0^2 v^{tot}) \right] &= 0. \end{aligned}$$

Из оставшихся двух уравнений (8) следует, что

$$\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[\frac{\partial v^1}{\partial r} - d_{\parallel} (k_1^2 v^1 - k_0^2 v^{tot}) \right] - \frac{ik}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} [v^1 - v^{tot}] = 0, \text{ и}$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\frac{\partial u^1}{\partial r} - d_{\parallel} \left(\frac{\partial^2 u^1}{\partial r^2} - \frac{\partial^2 u^{tot}}{\partial r^2} \right) \right] + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[\frac{\partial u^1}{\partial r} - d_{\parallel} \left(\frac{\partial^2 u^1}{\partial r^2} - \frac{\partial^2 u^{tot}}{\partial r^2} \right) \right] = 0.$$

Из представленных соотношений можно заключить, что мезоскопические условия (8) будут выполнены, если потребовать, чтобы u и v удовлетворяли следующим граничным условиям:

$$\begin{aligned} k_1^2 \left(u^1 + d_{\parallel} \frac{\partial u^1}{\partial r} \right) &= k_0^2 \left(u^{tot} + d_{\parallel} \frac{\partial u^{tot}}{\partial r} \right), \\ v^1 &= v^{tot}, \\ \frac{\partial v^1}{\partial r} - d_{\parallel} k_1^2 v^1 &= \frac{\partial v^{tot}}{\partial r} - d_{\parallel} k_0^2 v^{tot}, \\ \frac{\partial u^1}{\partial r} + d_{\perp} \left(\frac{\partial^2 u^1}{\partial r^2} + k_1^2 u^1 \right) &= \frac{\partial u^{tot}}{\partial r} + d_{\perp} \left(\frac{\partial^2 u^{tot}}{\partial r^2} + k_0^2 u^{tot} \right). \end{aligned} \quad (9)$$

Как следует из полученных мезоскопических условий (9), при стремлении параметров Фейбельмана к нулю они сводятся к классическим условиям (7). Отметим, что особенностью соотношений (9) является наличие нормальных производных первого и второго порядков электрических потенциалов u .

Для выделения единственного решения волнового уравнения (6) в неограниченной области D_0 используются условия излучения Зоммерфельда [13]

$$\frac{\partial \bar{u}^0}{\partial r} - ik_0 \bar{u}^0, \bar{v}^0 = \bar{o} \left(\frac{1}{r} \right), \quad r \rightarrow \infty. \quad (10)$$

Иногда их дополняют соотношением $\bar{u}^0, \bar{v}^0 = O(r^{-1}), r \rightarrow \infty$ [13], которое является следствием (10). Как и в классическом случае, выбранные согласно условиям Зоммерфельда решения для потенциалов Дебая обеспечивают выполнение условий излучения Сильвера-Мюллера для электромагнитных полей на бесконечности (2).

В результате исходная векторная задача для полей (1) - (3) сведена к скалярным краевым задачам для потенциалов Дебая (6), (9), (10). Покажем, что решения этих задач совпадают.

4 Решение мезоскопической задачи для потенциалов Дебая

Волновое уравнение (6) решается методом разделения переменных с представлением решения в виде ряда с неизвестными коэффициентами, для определения которых воспользуемся мезоскопическими граничными условиями (9). С учетом разложения

$$\exp(ikz) = \exp(ikr \cos \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} i^n (2n+1) j_n(kr) P_n(\cos \theta), \quad (11)$$

где $j_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{n+1/2}(x)$ — сферические функции Бесселя, $J_{n+1/2}(x)$ — цилиндрические функции Бесселя, а $P_n(\cos \theta)$ — полиномы Лежандра, получим разложение в ряд по сферическим функциям потенциалов Дебая для плоской волны [8]

$$\begin{aligned} u^{\text{inc}} &= \frac{1}{k_0^2} \sum_{n=1}^{\infty} i^{n-1} \frac{(2n+1)}{n(n+1)} r j_n(k_0 r) P_n^1(\cos \theta) \cos \varphi, \\ v^{\text{inc}} &= \frac{1}{k_0^2} \sum_{n=1}^{\infty} i^{n-1} \frac{(2n+1)}{n(n+1)} r j_n(k_0 r) P_n^1(\cos \theta) \sin \varphi. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь $P_n^m(\cos \theta)$ — присоединённые многочлены Лежандра. Поскольку в разложении (12) присутствуют только члены с $m = 1$, разложения для потенциалов Дебая вне и внутри частицы примут вид

$$\begin{aligned} u^0 &= \sum_{n=0}^{\infty} C_n^u r h_n^{(1)}(k_0 r) P_n^1(\cos \theta) \cos \varphi, \\ v^0 &= \sum_{n=0}^{\infty} C_n^v r h_n^{(1)}(k_0 r) P_n^1(\cos \theta) \sin \varphi, \\ u^1 &= \sum_{n=0}^{\infty} D_n^u r j_n(k_1 r) P_n^1(\cos \theta) \cos \varphi, \\ v^1 &= \sum_{n=0}^{\infty} D_n^v r j_n(k_1 r) P_n^1(\cos \theta) \sin \varphi. \end{aligned} \quad (13)$$

где $h_n^{(1)}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} H_{n+1/2}^{(1)}(x)$ — сферические функции Ханкеля первого рода, а $C_n^{u,v}$ и $D_n^{u,v}$ — неизвестные коэффициенты, подлежащие определению. Сферические функции Ханкеля первого рода выбраны из условий излучения Зоммерфельда (10).

Для вычисления неизвестных коэффициентов в разложениях потенциалов $u^{0,1}, v^{0,1}$, подставим представления (12) – (13) в граничные условия (9) и получим систему линейных алгебраических уравнений

относительно переменных $C_n^u, C_n^v, D_n^u, D_n^v$, которая состоит из двух независимых систем для электрических (14) и магнитных (15) потенциалов

$$\begin{aligned} k_1^2 \Phi_n(1, -d_{\parallel} k_1, k_1) D_n^u - k_0^2 Z_n(1, -d_{\parallel} k_0, k_0) C_n^u &= k_0^2 \Phi_n(1, -d_{\parallel} k_0, k_0) a_n, \\ \Phi_n(\hat{d}_{\perp}, k_1, k_1) D_n^u - Z_n(\hat{d}_{\perp}, k_0, k_0) C_n^u &= \Phi_n(\hat{d}_{\perp}, k_0, k_0) a_n, \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \psi_n(k_1 r) D_n^v - \zeta_n(k_0 r) C_n^v &= \psi_n(k_1 r) a_n, \\ \Phi_n(d_{\parallel} k_1^2, k_1, k_1) D_n^v - Z_n(d_{\parallel} k_0^2, k_0, k_0) C_n^v &= \Phi_n(d_{\parallel} k_0^2, k_0, k_0) a_n, \end{aligned} \quad (15)$$

где использованы обозначения

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= x j_n(x), \quad \zeta_n(x) = x h_n^{(1)}(x), \quad \psi'_n(x) = \frac{d\psi_n(x)}{dx}, \quad \zeta'_n(x) = \frac{d\zeta_n(x)}{dx}, \\ \Phi_n(b_1, b_2, k_i) &= b_1 \psi_n(k_i r) + b_2 \psi'_n(k_i r), \quad Z_n(b_1, b_2, k_i) = b_1 \zeta_n(k_i r) + b_2 \zeta'_n(k_i r), \\ a_n &= \frac{i^{n-1}}{k_0^2} \frac{2n+1}{n(n+1)}, \quad \hat{d}_{\perp} = d_{\perp} \frac{n(n+1)}{r^2}. \end{aligned}$$

При выводе второго уравнения системы (14) учтено соотношение

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right) \begin{Bmatrix} \psi_n(kr) \\ \zeta_n(kr) \end{Bmatrix} = \frac{n(n+1)}{r^2} \begin{Bmatrix} \psi_n(kr) \\ \zeta_n(kr) \end{Bmatrix}.$$

Коэффициенты $C_n^u, C_n^v, D_n^u, D_n^v$, являющиеся решением систем (14) - (15), записываются в явном виде следующим образом:

$$\begin{aligned} D_n^u &= \frac{[Z_n(1, -d_{\parallel} k_0, k_0) \Phi_n(\hat{d}_{\perp}, k_0, k_0) - Z_n(\hat{d}_{\perp}, k_0, k_0) \Phi_n(1, -d_{\parallel} k_0, k_0)] k_0^2 a_n}{\Delta_u}, \\ C_n^u &= \frac{[k_1^2 \Phi_n(1, -d_{\parallel} k_1, k_1) \Phi_n(\hat{d}_{\perp}, k_0, k_0) - k_0^2 \Phi_n(\hat{d}_{\perp}, k_1, k_1) \Phi_n(1, -d_{\parallel} k_0, k_0)] a_n}{\Delta_u}, \\ D_n^v &= \frac{[\Phi_n(d_{\parallel} k_0, 1, k_0) \zeta_n(k_0 r) - Z_n(d_{\parallel} k_0, 1, k_0)] k_0 a_n}{\Delta_v}, \\ C_n^v &= \frac{[k_0 \Phi_n(d_{\parallel} k_0, 1, k_0) \psi_n(k_1 r) - k_1 \Phi_n(d_{\parallel} k_1, 1, k_1) \psi_n(k_0 r)] a_n}{\Delta_v}, \end{aligned} \quad (16)$$

$$\Delta_u = k_0^2 \Phi_n(\hat{d}_\perp, k_1, k_1) Z_n(1, -d_\parallel k_0, k_0) - k_1^2 \Phi_n(1, -d_\parallel k_1, k_1) \Phi_n(\hat{d}_\perp, k_0, k_0),$$

$$\Delta_v = k_1 \Phi_n(d_\parallel k_1, 1, k_1) \zeta_n(k_0 r) - k_0 Z_n(d_\parallel k_0, 1, k_0) \psi_n(k_1 r).$$

Тем самым, решена задача (6), (9), (10) для потенциалов Дебая. Формулы (16) полностью согласуются с результатами, представленными в работе [12]. При отсутствии квантовых эффектов, когда $d_\perp = 0$ и $d_\parallel = 0$, полученные выражения являются решением задачи дифракции на проницаемой сфере с классическими граничными условиями.

5 Численные результаты

Используем рассмотренный метод решения задачи дифракции на плазменной сфере для исследования влияния квантовых эффектов в золотой наночастице на плазмонный резонанс в сечении рассеяния

$$\sigma_{sca} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi |F(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta,$$

где $\mathbf{F}(\theta, \varphi)$ – диаграмма направленности

$$\mathbf{F}(\theta, \varphi) = F_\varphi(\theta, \varphi) \mathbf{e}_\varphi + F_\theta(\theta, \varphi) \mathbf{e}_\theta.$$

С учетом представления для потенциалов (13) компоненты диаграммы направленности можно вычислить по формулам

$$F_\theta(\theta, \varphi) = k_0^2 \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \left[C_n^v \frac{P_n^{(1)}(\cos \theta)}{\sin \theta} - C_n^u \frac{dP_n^{(1)}(\cos \theta)}{d(\cos \theta)} \sin \theta \right] \cos \varphi,$$

$$F_\varphi(\theta, \varphi) = k_0^2 \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \left[C_n^v \frac{dP_n^{(1)}(\cos \theta)}{d(\cos \theta)} \sin \theta - C_n^u \frac{P_n^{(1)}(\cos \theta)}{\sin \theta} \right] \sin \varphi.$$

Будем рассматривать золотую сферу, расположенную в диэлектрической среде с вещественным показателем преломления. В этом случае на границе металл-диэлектрик $d_\parallel = 0$ [15].

На Рис. 1 представлены графики сечения рассеяния золотой сферы радиуса 5 нм. Пунктирная кривая соответствует расчетам, выполненным с помощью классической теории Ми [17]. Сплошные кривые получены с помощью представленного в данной работе метода решения задачи с мезоскопическими условиями (9) при различных значениях поперечного параметра Фейбельмана d_\perp . Видно, что при $d_\perp = 0$, т.е. в классическом

случае, решение совпадает с результатами теории Ми. Влияние квантовых эффектов даже при малых значениях $d_{\perp} = \pm 0.2$ нм приводит к заметному изменению амплитуды резонансного пика.

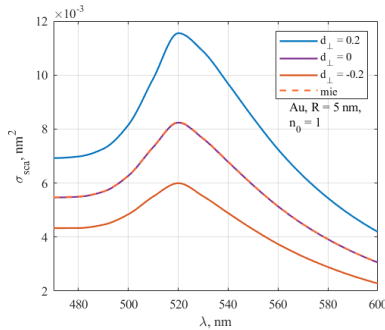


Рис. 1: Сечения рассеяния золотой сферы радиуса $R = 5$ нм, внешняя среда – воздух.

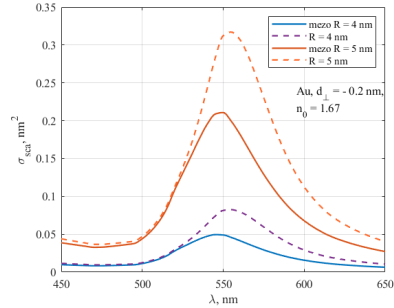


Рис. 2: Сечения рассеяния золотых сфер различного радиуса. Внешняя среда – оптическое стекло SF5.

На Рис. 2 изображены сечения рассеяния для золотых сфер различного радиуса, помещенных в оптическое стекло SF5 с показателем преломления $n_0 = 1.67$. По сравнению со случаем, когда частица находилась в воздухе (Рис. 1), резонансные пики стали более резкими и произошел их сдвиг в сторону длинных волн. Также стало заметно влияние квантовых эффектов на положение резонанса – резонансные пики сдвигаются в область более коротких волн (blue shift) с одновременным снижением максимального значения. Кроме того, чем больше радиус частицы, тем больше амплитуда резонансного пика.

6 Заключение

В данной работе сформулирована граничная задача дифракции на мезоскопической сфере для потенциалов Дебая. Показано, что аналогично классическому случаю, векторную мезоскопическую задачу для электромагнитного поля можно свести к скалярным задачам для потенциалов Дебая. Разделение задач для электрического и магнитного потенциалов оказалось возможным благодаря полученным в работе мезоскопическим граничным условиям (9), в которые вошли нормальные производные первого и второго порядка потенциалов. Таким образом, сохранены все известные из классической электродинамики преимущества потенциалов Дебая, которые могут быть полезны, в частности, при исследовании влияния квантовых эффектов в плазмонных сферических частицах на их оптические характеристики. В работе получено решение сформулированной краевой задачи для потенциалов и показано, что оно полностью совпадает с решением задачи для электромагнитного поля, что указывает на эквивалентность этих задач. С помощью полученного

решения проведены расчеты, демонстрирующие влияние квантовых эффектов в золотых сферических наночастицах на величину и положение плазмонного резонанса в оптическом диапазоне длин волн.

Авторские декларации

Финансирование

Работа выполнена в рамках финансирования по государственному заданию МГУ имени М.В. Ломоносова.

Конфликт интересов

Отсутствует.

Вклад авторов

А. О. Арьянова — обзор литературы, вывод формул, реализация компьютерного модуля, численные эксперименты, визуализация и сравнение результатов, написание текста статьи.

В. В. Лопушенко — постановка задачи, обзор литературы, обсуждение аналитических и численных результатов, написание текста статьи.

Список литературы

- [1] Graphene–Gold Metasurface Architectures for Ultrasensitive Plasmonic Biosensing / S. Zeng, S. Kandammathe Valiyaveedu, J. Shang et al. // *Advanced Materials*. — 2015. — 10. — Vol. 27. — Pp. 6163–6169.
- [2] Nanoparticle-Based Photothermal Therapy for Breast Cancer Noninvasive Treatment / Y. Xiong, Y. Rao, J. Hu et al. // *Advanced Materials*. — 2023. — 11. — Vol. 37. — P. e2305140.
- [3] Plasmonic Cu₂S₂₄ nanocages for novel solar photothermal nanoink and nanofilm / M. Xi, L. Xu, N. Li et al. // *Nano Research*. — 2021. — 10. — Vol. 15.
- [4] Photothermal antimicrobial materials for water disinfection / Ruiting Ni, Yue Zhang, Xuexue Dong et al. — 2025. — 01. — Pp. 331–376.
- [5] *Gouesbet Gerard, Gréhan Gérard*. Generalized Lorenz-Mie Theories. — 2017. — 02.
- [6] *Kofron David*. The electromagnetic Debye potentials reviewed: including sources and new solutions // *General Relativity and Gravitation*. — 2022. — 07. — Vol. 54.

- [7] Клещёв А. А. Потенциалы дебая и “типа дебая” в задачах дифракции, излучения и распространения упругих волн // *Акустический журнал*. — 2012. — Т. 58. — С. 338–341.
- [8] Борн М., Вольф Э. Основы оптики. 2-е изд. Перевод с англ. — Наука, 1973.
- [9] Еремин Ю. А., Свешников А. Г. Квазиклассические модели квантовой наноплазмоники на основе метода Дискретных источников (обзор) // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. — 2021. — Т. 61. — С. 34–62.
- [10] Еремин Ю. А., Лопушенко В. В. Анализ влияния квантовых эффектов на оптические характеристики плазмонных наночастиц методом дискретных источников // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. — 2023. — 11. — Vol. 63. — Pp. 1911–1921.
- [11] A general theoretical and experimental framework for nanoscale electromagnetism / Y. Yang, D. Zhu, W. Yan et al. // *Nature*. — 2019. — 12. — Vol. 576. — Pp. 248–252.
- [12] Plasmon-emitter interactions at the nanoscale / P. A. Gonçalves, T. Christensen, N. Rivera et al. // *Nature communications*. — 2020. — 01. — Vol. 11. — P. 366.
- [13] Колтон Д., Кресс Р. Методы интегральных уравнений в теории рассеяния/Пер. с англ. под ред. А.Г. Свешникова. — М.: Мир, 1987.
- [14] Еремин Ю. А., Лопушенко В. В. Численный метод решения задачи дифракции, описываемой уравнениями максвелла с мезоскопическими граничными условиями // *Дифференциальные уравнения*. — 2024. — 08. — Vol. 60. — Pp. 1100–1111.
- [15] Nonlocal effects in plasmon-emitter interactions / M. Eriksen, C. Tserkezis, N. Mortensen, J. Cox // *Nanophotonics*. — 2024. — Vol. 13, no. 15. — Pp. 2741–2751. — URL: <https://doi.org/10.1515/nanoph-2023-0575>.
- [16] Иванов Е. А. Дифракция электромагнитных волн на двух телах. — Наука и техника, 1968.
- [17] I. Lopushenko. MATLAB interface to W. Wiscombe’s Mie scattering Fortran program. — 2025. — URL: <https://doi.org/10.5281/zenodo.17069741>.