

## МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРОСКОПИИ ПОТЕРЬ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНАМИ ДЛЯ ЧАСТИЦ ВБЛИЗИ ПОЛУБЕСКОНЕЧНОЙ ПОДЛОЖКИ

✉ А. А. Кичигин, М. А. Юркин

*Институт химической кинетики и горения СО РАН, Новосибирск, Россия*  
*Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия*

✉ alkichigin@gmail.com

Спектроскопия потерь энергии электронами (*Electron energy-loss spectroscopy, EELS*) — это экспериментальная техника, которая позволяет исследовать плазмонные частицы с пространственным разрешением менее 1 нм (на длинах волн видимого диапазона и выше) и с разрешением по энергии до 0,05 эВ [1]. Для интерпретации результатов эксперимента EELS необходимо иметь теоретическое описание взаимодействия произвольных частиц с электромагнитным полем быстрого электрона и соответствующий метод компьютерного моделирования. Существует много методов, способных моделировать EELS, но все они ограничены нахождением частицы в вакууме, что не соответствует экспериментальным условиям, где частица всегда находится на подложке. Наличие подложки влияет на спектры EELS за счет смещения плазмонных резонансов в сторону более низких энергий [2, 3].

В данной работе разработана теория для моделирования EELS методом дискретных диполей применительно к частицам, находящимся вблизи границы раздела двух сред — на полубесконечной подложке; выражения реализованы в открытом ПО ADDA [4]. Поскольку в экспериментах подложка всегда конечна, необходимо определить границы применимости новой теории. В качестве исследуемой частицы возьмем серебряную призму, в основании которой лежит правильный пятиугольник, и дискретизируем ее кубическими диполями размером 1 нм (рис. 1). Нарисуем под призмой подложку из диполей того же размера и будем варьировать ее толщину. Пусть электроны с энергией 100 кэВ пролетают вблизи середины грани призмы.

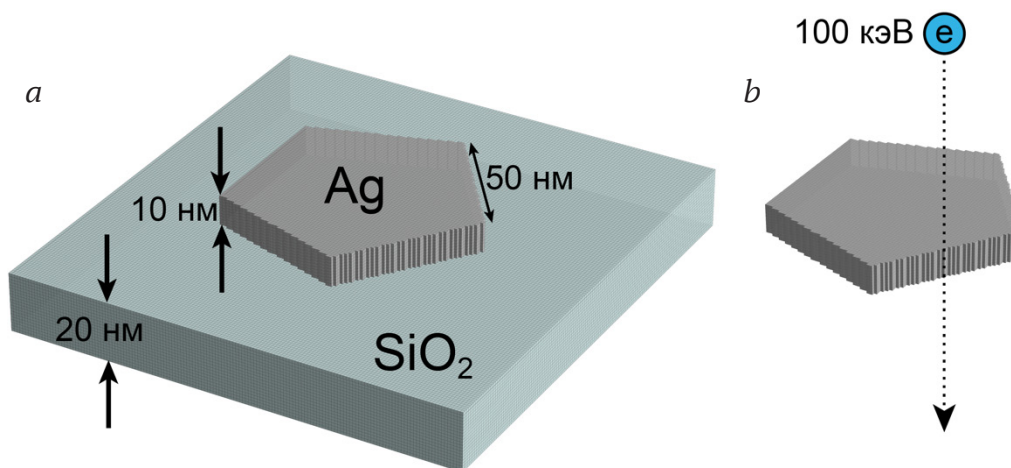


Рис. 1. Серебряная нанопризма с длиной стороны 50 нм и толщиной 10 нм: *a* — на конечной 20 нм подложке, дискретизованной диполями того же размера, что и сама призма; *b* — призма без подложки, схематично показан пролет электрона вблизи середины грани

Спектры EELS для различной толщины подложки приведены на рис. 2. Спектр в вакууме имеет два заметных пика на энергиях 2,35 и 3,2 эВ. В случае полубесконечной подложки эти два плазмонных пика находятся уже на энергиях 2 и 2,9 эВ соответственно. Как видно из спектров, при толщине подложки 10 нм (равно толщине призмы) пики сместились, но еще не совпали со случаем полубесконечной подложки. Начиная с толщины 20 нм и более, пики либо совпадают, либо отличаются на 0,05 эВ, что лежит в пределах экспериментальной погрешности. Таким образом, подложки с толщиной, составляющей 2 толщины частицы и более, можно моделировать как полубесконечные, что значительно сэкономит вычислительные ресурсы и время.

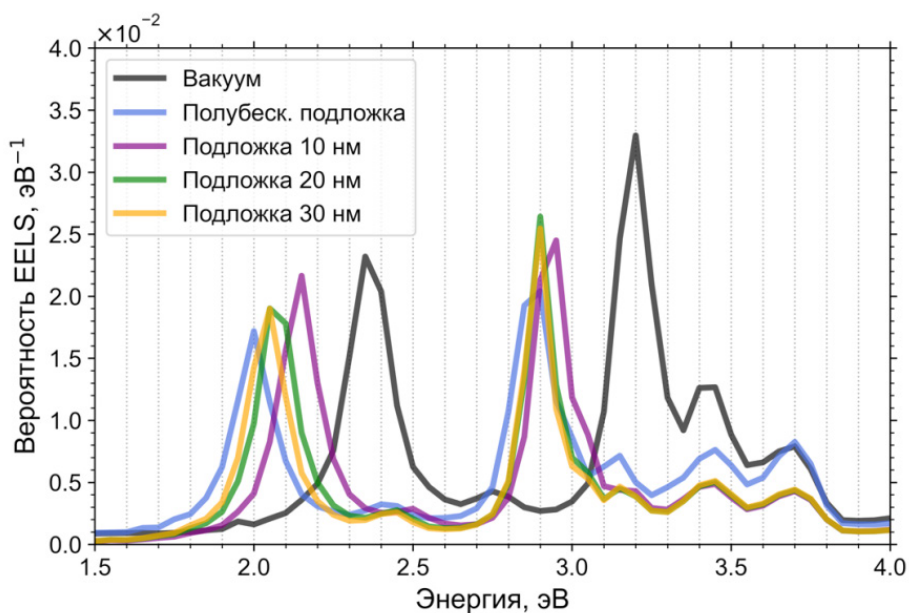


Рис. 2. Спектры EELS при различных конфигурациях подложки под призмой

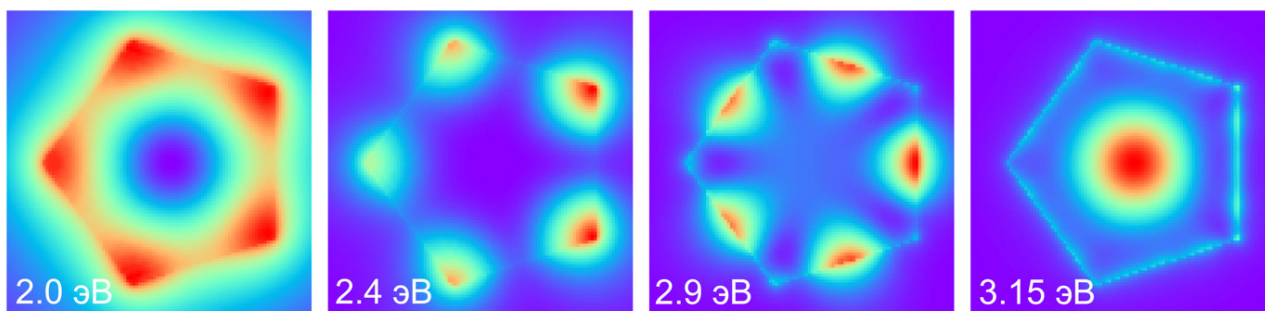


Рис. 3. Плазмонные карты для всех резонансов исследуемой нанопризмы

Эта призма на полубесконечной подложке обладает плазмонными резонансами на энергиях 2; 2,4; 2,9 и 3,15 эВ. Соответствующие плазмонные карты приведены на рис. 3.

### Список литературы

1. García de Abajo F. J., Di Giulio V. Optical excitations with electron beams: challenges and opportunities // ACS Photonics. 2021. Vol. 8, № 4. P. 945–974.

2. Kadkhodazadeh S. et al. The substrate effect in electron energy-loss spectroscopy of localized surface plasmons in gold and silver nanoparticles // *A C S Photonics. Am. Chem. Soc.* 2017. Vol. 4, № 2. P. 251–261.

3. Maier S.A., Atwater H.A. Plasmonics: Localization and guiding of electromagnetic energy in metal/dielectric structures // *J. Appl. Phys. Am. Inst. Phys. AIP.* 2005. Vol. 98, № 1. P. 011101.

4. Yurkin M.A., Hoekstra A.G. The discrete dipole approximation: an overview and recent developments // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2007. Vol. 106, № 1–3. P. 558–589.