

doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-818-823

УДК 517.9

Влияние размерности, геометрии и ориентации наноструктур на распределение электрического поля в вопросах усиления комбинационного рассеяния света

Карина Игоревна Матвеева^{1✉}, Андрей Юрьевич Зюбин², Игорь Игоревич Кон³,
Илья Геннадьевич Самусев⁴

^{1,2,3,4} Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация

¹ matveeva.k.i@inbox.ru✉, <https://orcid.org/0000-0003-2585-163X>

² azubin@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9766-1408>

³ IKon@kantiana.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3271-1635>

⁴ ISamusev@kantiana.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5026-7510>

Аннотация

Предмет исследования. Выполнен анализ результатов численного моделирования зависимости напряженности электрического поля от размерности и геометрии золотых наноструктур и их ориентации относительно поляризации падающего излучения. **Метод.** Моделирование напряженности электрического поля вблизи единичной наноструктуры осуществлено с применением метода конечных разностей во временной области (Finite-Difference Time-Domain, FDTD). FDTD-метод — эффективный теоретический способ исследования взаимодействия электромагнитной волны и плазмонных нанообъектов. Исследованы объекты — единичные золотые наностержни, имеющие различную геометрию (цилиндр, сфероцилиндр, вытянутый эллипсоид) и варьируемую полудлину ($L = 10–120$ нм). Источник излучения — плоскополяризованная волна ($\lambda = 632$ нм). **Основные результаты.** В результате проведенного моделирования определена локализация электрического поля вблизи наноструктур, а также получены максимальные теоретические значения напряженности ближнего электрического поля. Показано, что зависимость максимумов напряженности электрического поля от полудлины золотых наноструктур при их продольной ориентации имеет нелинейный характер. **Практическая значимость.** Полученные теоретические расчеты напряженности электрического поля вблизи исследуемых плазмонных нанообъектов позволят в дальнейшем определить оптимальные параметры наночастиц и условия возбуждения плазмонного резонанса. В результате возможно создание оптических структур с высоким сигналом усиления комбинационного рассеяния света, детектируемого от исследуемых веществ, находящихся вблизи такой структуры.

Ключевые слова

FDTD-моделирование, плазмонный резонанс, наночастицы, наностержни, ГРПС

Благодарности

Работа выполнена в рамках Соглашения с Минобрнауки России № 75-02-2022-872.

Ссылка для цитирования: Матвеева К.И., Зюбин А.Ю., Кон И.И., Самусев И.Г. Влияние размерности, геометрии и ориентации наноструктур на распределение электрического поля в вопросах усиления комбинационного рассеяния света // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22, № 5. С. 818–823. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-818-823

Influence of the dimension, geometry, and orientation of nanostructures on the distribution of the electric field in matters of enhancing of Raman scattering

Karina I. Matveeva^{1✉}, Andrey Yu. Zyubin², Igor I. Kon³, Ilia G. Samusev⁴

^{1,2,3,4} Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation

¹ matveeva.k.i@inbox.ru✉, <https://orcid.org/0000-0003-2585-163X>

² azubin@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9766-1408>

³ IKon@kantiana.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3271-1635>

⁴ ISamusev@kantiana.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5026-7510>

Abstract

The presented work reflects and analyzes the results of numerical simulation of the electric field strength dependence on the dimensionality and geometry of gold nanostructures as well as their orientation relative to the polarization of the incident radiation. The simulation of the electric field strength near a single nanostructure was performed using the Finite-Difference Time-Domain (FDTD) method. FDTD modeling is an effective theoretical way to study the interaction between electromagnetic waves and plasmonic nanoobjects represented by single gold nanorods with different geometry (cylinder, spherical cylinder, elongated ellipsoid) and variable half-length ($L = 10\text{--}120\text{ nm}$). The radiation source was a plane-polarized wave ($\lambda = 632\text{ nm}$). As a result of the simulation, the localization of the electric field near the nanostructures has been determined and the maximum theoretical values of the near-field strength have been obtained. The dependence of the electric field strength maxima has been demonstrated to be nonlinear on the half-length of gold nanostructures in case of their longitudinal orientation to E-vector. The obtained theoretical calculations of the electric field strength near the plasmonic nanoparticles, including gold nanorods, allow us to determine the optimal nanoparticle parameters and excitation conditions for the plasmon resonance occurrence which in turn provides an opportunity to create SERS-structures with a high Raman scattering enhancement.

Keywords

FDTD simulation, plasmon resonance, nanoparticles, nanorods, SERS

Aknowledgements

The research was carried out within the state assignment of Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation No. 75-02-2022-872.

For citation: Matveeva K.I., Zyubin A.Yu., Kon I.I., Samusev I.G. Influence of the dimension, geometry, and orientation of nanostructures on the distribution of the electric field in matters of enhancing of Raman scattering. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 818–823 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-818-823

Введение

Идентификация и определение низкоконцентрированных веществ — одно из быстро развивающихся направлений в спектроскопическом анализе. Данный анализ успешно применяется в биологии, геологии, химии [1], медицине [2], мониторинге атмосферы [3], в междисциплинарных областях, а также в промышленной сфере [4]. В последнее двадцатилетие наиболее востребованным методом спектроскопии является метод гигантского комбинационного рассеяния света (ГКРС). Благодаря возникновению поверхностного плазмонного резонанса в планарных структурах и локализованного поверхностного плазмонного резонанса в наноструктурах [5], данный метод позволяет проводить высокоточный структурный анализ соединений [6–8]. При разработке активных оптических сенсоров широко используются металлы: золото, серебро, платина, медь, а также их композиты [9, 10]. Одним из важных аспектов метода ГКРС — совершенствование и создание новых конфигураций структур, усиливающих интенсивность сигнала комбинационного рассеяния света. В настоящее время диапазон значений усиления сигнала комбинационного рассеяния света составляет от 10^5 до 10^{14} [11]. Варьируя параметры планарных сенсоров, основанных на эффекте ГКРС, а также оптические свойства металлических наночастиц, адсорбированных на поверхности, можно контролировать генерацию плазмонного резонанса, тем самым достигая больших

значений коэффициента усиления ГКРС и увеличивая предел обнаружения объектов [12, 13]. Возможность создания различных ГКРС-структур требует в первую очередь теоретической оценки их эффективности. В данном вопросе помогают методы математического расчета оптических свойств наноструктур [14]. Один из применяемых вычислительных методов, в частности для целей плазмоники и нанооптики — метод конечных разностей во временной области (Finite-Difference Time-Domain, FDTD) [15].

В основе численного FDTD-метода лежит дискретизация уравнений Максвелла, имеющих дифференциальную форму [16]. Метод конечных разностей во временной области мощный и эффективный численный инструмент для исследования взаимодействия электромагнитной волны с плазмонными нанообъектами. Варьируя параметры нанообъектов и источника падающего излучения, можно рассчитать сечения экстинкции, максимальные значения напряженности электрического поля, отследить его локализацию вблизи исследуемых структур, а также оценить усиления электромагнитного излучения наноструктурами. Обзор научных работ, в частности [17–19], показал, что при сравнении экспериментальных и теоретических данных, рассчитанных FDTD-методом, наблюдаются отклонения между ними. Тем не менее общую тенденцию экспериментальных значений теоретические расчеты могут прогнозировать. К возможным факторам, приводящим к разногласию в данных, стоит отнести основные недостатки данного

метода — ступенчатую аппроксимацию [20], а также накопление численной ошибки дисперсии со временем моделирования [21].

Перспектива численного анализа напряженности электрического поля, генерируемого вблизи анизотропных наночастиц, в частности золотых наностержней варьируемой морфологии, связано с возможностью контроля зависимости длины волны продольной моды плазмонного резонанса [22]. Получение пика продольной моды плазмонного резонанса в области длинноволновых значений (800–1300 нм) позволяет усилить очень слабую интенсивность сигнала комбинационного рассеяния света в данной области. Кроме того, важность данного диапазона заключается в том, что лазерное возбуждение с длинами волн 785, 1064 и 1280 нм дает меньшую деградацию и фотообесцвечивание образца, уменьшенный фон флуоресценции и существенно большую глубину проникновения в биологические ткани по сравнению с коротковолновыми источниками [23].

В настоящей работе определены максимальные значения напряженности электрического поля вблизи единичных наностержней варьируемой геометрии, а также приведены основные 2D-картины распределения ближнего **E**-поля.

Используемые методы и подходы

Для реализации численного моделирования FDTD-методом применено программное обеспечение ANSYS Lumerical. В качестве базового алгоритма выбрана методика, описанная в работе [24], с внесенными корректировками. В качестве источника возбуждения использована плоско-поляризованная волна ($\lambda = 632$ нм), вектор напряженности электрического поля колеблется вдоль оси x . Амплитуда падающего поля установлена в программе со значением 1 В/м. Источник плоской волны расположен на расстоянии 5 нм от исследуемого объекта — золотых (Au) наностержней, которые имеют различную геометрию (цилиндр, сфероцилиндр, вытянутый эллипсоид) и варьируемую полудлину ($L = 10$ –120 нм) при постоянном радиусе $r = 8$ нм. Положение

исследуемых наночастиц в расчетной области имеет продольную и поперечную ориентацию относительно поляризации падающего излучения. Время симуляции составляло $T = 1000$ фс. Шаг сетки принимал значения $dx, dy, dz = 0,5$ нм для полудлин наностержней 10–80 нм, и 1 нм для полудлин 100–120 нм. Картины распределения ближнего **E**-поля получены с помощью 2D-монитора, расположенного в начальных координатах ($x = 0; y = 0; z = 0$) в плоскости x – y .

Результаты исследования

В результате исследования установлено, что при продольной ориентации золотых наностержней относительно вектора колебания напряженности электрического поля наблюдается нелинейная зависимость значений максимумов напряженности ближнего электрического поля (рис. 1). На представленных графиках видны по два пиковых значения напряженности поля. Первое пиковое значение напряженности электрического поля для всех форм исследуемых единичных наностержней (цилиндр, сфероцилиндр, вытянутый эллипсоид) получено при полудлине наностержней, равной $L = 20$ нм.

Второе пиковое значение напряженности электрического поля наблюдается для наностержней цилиндрической и сфероцилиндрической форм при $L = 80$ нм, а для эллипсоидальной — при $L = 100$ нм. Исследование локализации электрического поля вблизи единичных наностержней показало, что пиковые значения локального электрического поля в плоскости x – y преимущественно локализованы на элементах наностержней с максимальной кривизной (рис. 2). Данное явление обусловлено быстрой миграцией заряда вдоль ориентированных структур [25]. Также на картинах распределения электрического поля для случаев цилиндрической и сфероцилиндрической форм наблюдалось явление стоячей волны, формирование которой было зафиксировано при полудлине наностержней, равной $L = 40$ нм (рис. 2, *a, b*). Данный эффект обусловлен возникновением плазмонной продольной моды высо-

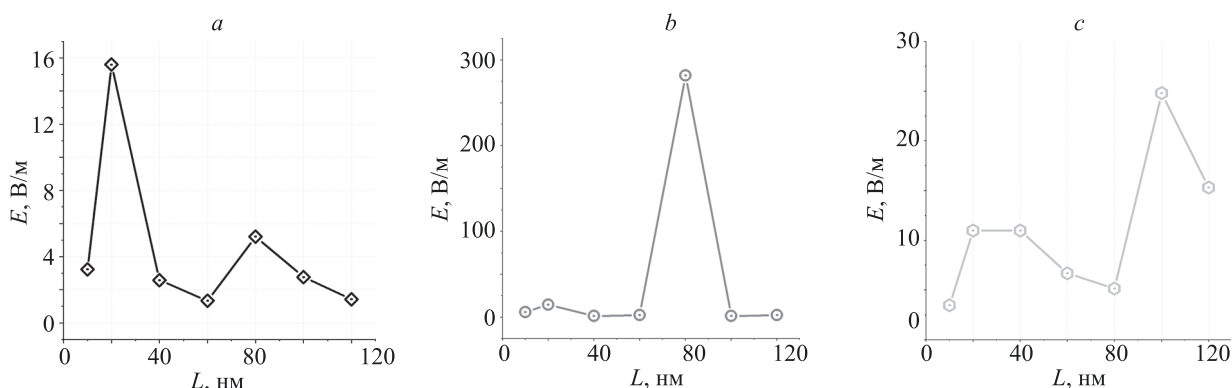


Рис. 1. Зависимость максимальных значений напряженности (E) электрического поля от полудлины для цилиндрической (*a*), сфероцилиндрической (*b*) и эллипсоидальной (*c*) форм наностержней при его продольной ориентации относительно вектора колебания напряженности электрического поля

Fig. 1. Dependence of the maximum values of the electric field (E) strength vs. the half-length for cylindrical (*a*), spherocylindrical (*b*) and ellipsoidal (*c*) shapes of nanorods with its longitudinal orientation relative to the electric field strength oscillation vector

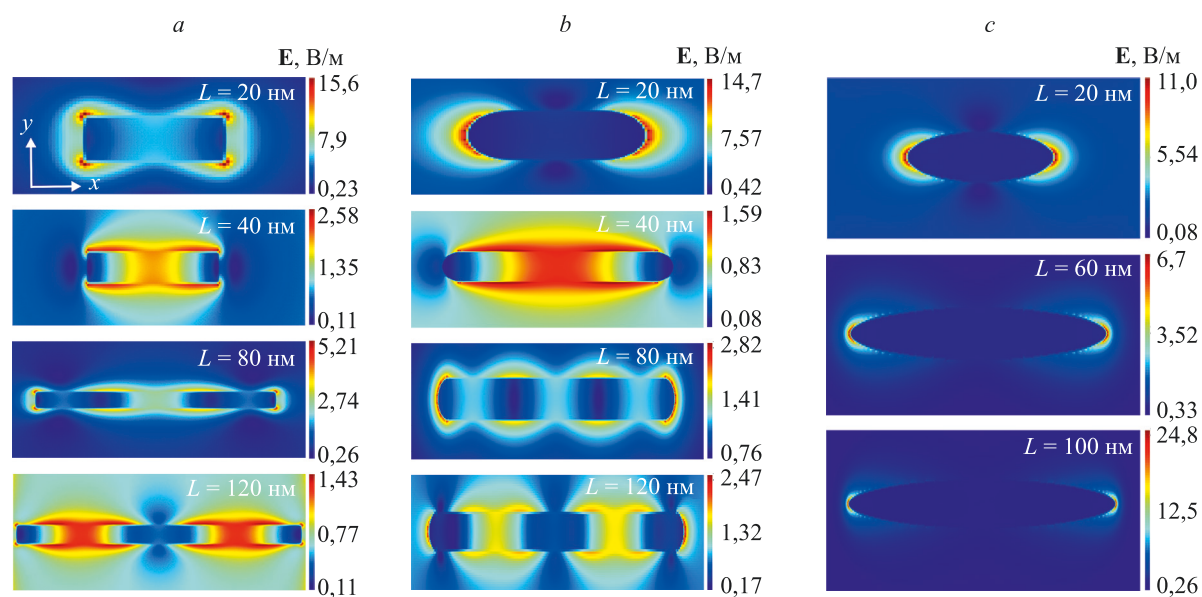


Рис. 2. Распределения напряженности (E) электрического поля вблизи единичных наностержней цилиндрической (а), сфероцилиндрической (b) и эллипсоидальной (c) форм

Fig. 2. Near-field distributions (E) of electric field near single nanorods of cylindrical (a), spherocylindrical (b) and ellipsoidal (c) shapes

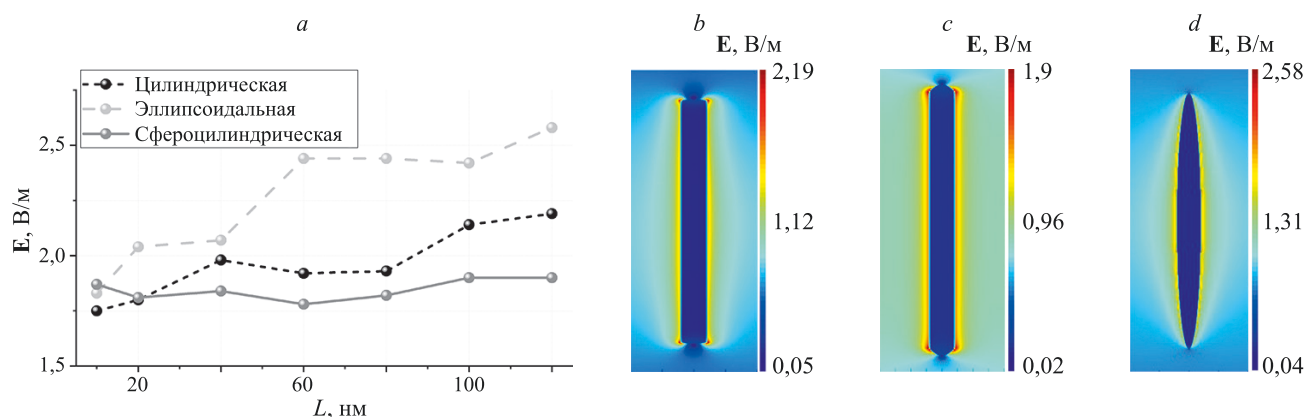


Рис. 3. Зависимость максимальных значений напряженности (E) электрического поля (a) от полудлины для цилиндрической (b), сфероцилиндрической (c) и эллипсоидальной (d) форм наностержней при его поперечной ориентации относительно вектора колебания напряженности электрического поля

Fig. 3. Dependence of the maximum values of the strength (E) of the electric field (a) vs. the half-length for cylindrical (b), spherocylindrical (c) and ellipsoidal (d) shapes of nanorods with its transverse orientation relative to the electric field strength oscillation vector

кого порядка с локальными узлами вдоль длинной оси наностержней, где фаза осцилляции электронов зависит от места дислокации на наночастицах [26]. Отметим, что формирование стоячей волны сопровождается падением напряженности электрического поля вблизи единичных наностержней.

При поперечной ориентации единичных наностержней относительно вектора колебания напряженности электрического поля видно монотонное увеличение максимального значения напряженности электрического поля при увеличении размера наночастиц. Максимум значения напряженности электрического поля установлен для наностержней эллипсоидальной геометрии при $L = 120$ нм (рис. 3, а).

Электрическое поле на длине волны 632 нм при поперечной ориентации наностержней относитель-

но вектора колебания напряженности электрического поля имеет слабую интенсивность и в основном распределено на боковых гранях наностержней вдоль оси y (рис. 3, b–d). Заметим, что при цилиндрической и сфероцилиндрической геометриях, по мере увеличения полудлины наностержней, локализация максимальных значений электрического поля смещена к торцевым углам структуры.

Заключение

В результате проведенного моделирования определен характер локализации электрического поля вблизи рассматриваемых наноструктур, а также получены максимальные теоретические значения напряженности ближнего электрического поля. Показано, что зависи-

мость максимумов напряженности электрического поля от полудлины золотых наноструктур при их продольной ориентации относительно вектора напряженности электрического поля имеет нелинейный характер.

Полученные результаты могут быть использованы при создании высокочувствительных оптических сенсоров для целей прикладной фотоники и анализа низкоконцентрированных веществ.

Литература

1. Brode W.R. *Chemical Spectroscopy*. John Wiley & Sons, 1939.
2. Sahu R.K., Mordechai S. Spectroscopic techniques in medicine: The future of diagnostics // *Applied Spectroscopy Reviews*. 2016. V. 51. N 6. P. 484–499. <https://doi.org/10.1080/05704928.2016.1157809>
3. Xia J., Zhu F., Bounds J., Aluauee E., Kolomenskii A., Dong Q., He J., Meadows C., Zhang S., Schuessler H. Spectroscopic trace gas detection in air-based gas mixtures: Some methods and applications for breath analysis and environmental monitoring // *Journal of Applied Physics*. 2022. V. 131. N 22. P. 220901. <https://doi.org/10.1063/5.0091263>
4. De Bleye C., Chavez P.-F., Mantanus J., Marini R., Hubert Ph., Rozet E., Ziemons E. Critical review of near-infrared spectroscopic methods validations in pharmaceutical applications // *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*. 2012. V. 69. P. 125–132. <https://doi.org/10.1016/j.jpba.2012.02.003>
5. Хлебцов Н.Г. Оптика и биофотоника наночастиц с плазмонным резонансом // *Квантовая электроника*. 2008. Т. 38. № 6. С. 504–529.
6. Boginskaya I., Gainutdinova A., Gusev A., Mailyan K., Mikhailitsyn A., Sedova M., Vdovichenko A., Ryzhikov I., Chvalun S., Lagarkov A. Detection of organic substances by a sers method using a special ag-poly(chloro-p-xylylene)-ag sandwich substrate // *Coatings*. 2020. V. 10. N 8. P. 799. <https://doi.org/10.3390/coatings10080799>
7. Aitekenov S., Sultangaziyev A., Abdirova P., Yussupova L., Gaipov A., Utegulov Z., Bukasov R. Raman, Infrared and Brillouin spectroscopies of biofluids for medical diagnostics and for detection of biomarkers // *Critical Reviews in Analytical Chemistry*. 2022. in press. <https://doi.org/10.1080/10408347.2022.2036941>
8. Mandal P., Tewari B.S. Progress in surface enhanced Raman scattering molecular sensing: A review // *Surfaces and Interfaces*. 2022. V. 28. P. 101655. <https://doi.org/10.1016/j.surf.2021.101655>
9. Mosier-Boss P.A. Review of SERS substrates for chemical sensing // *Nanomaterials*. 2017. V. 7. N 6. P. 142. <https://doi.org/10.3390/nano7060142>
10. Goncharov V.K., Kozadaev K.V., Mel'nikov K.A., Mikitchuk E.P., Novikov A.G. Atmospheric laser deposition of sers-active colloids of noble metals (Ag, Au, and Pt) // *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. 2018. V. 91. N 5. P. 1291–1295. <https://doi.org/10.1007/s10891-018-1860-6>
11. Cao Y., Zhang J., Yang Y., Huang Z., Long N.V., Fu C. Engineering of SERS substrates based on noble metal nanomaterials for chemical and biomedical applications // *Applied Spectroscopy Reviews*. 2015. V. 50. N 6. P. 499–525. <https://doi.org/10.1080/05704928.2014.923901>
12. Procházka M. *Surface-Enhanced Raman Spectroscopy* // *Biological and Medical Physics, Biomedical Engineering*. Springer, 2016. 221 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-23992-7>
13. Zeng Z., Liu Y., Wei J. Recent advances in surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS): Finite-difference time-domain (FDTD) method for SERS and sensing applications // *TrAC Trends in Analytical Chemistry*. 2016. V. 75. P. 162–173. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2015.06.009>
14. Hao F., Nordlander P. Efficient dielectric function for FDTD simulation of the optical properties of silver and gold nanoparticles // *Chemical Physics Letters*. 2007. V. 446. N 1-3. P. 115–118. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2007.08.027>
15. Yang Z.L., Li Q., Ruan X., Li Z., Ren B., Xu H., Tian Z. FDTD for plasmonics: Applications in enhanced Raman spectroscopy // *Chinese Science Bulletin*. 2010. V. 55. N 24. P. 2635–2642. <https://doi.org/10.1007/s11434-010-4044-0>
16. Schneider J.B. *Understanding the Finite-Difference Time-Domain Method*. School of electrical engineering and computer science Washington State University, 2010.
17. Rafiee M., Chandra S., Ahmed H., McCormack S.J. Optimized 3D finite-difference-time-domain algorithm to model the plasmonic

References

1. Brode W.R. *Chemical Spectroscopy*. John Wiley & Sons, 1939.
2. Sahu R.K., Mordechai S. Spectroscopic techniques in medicine: The future of diagnostics. *Applied Spectroscopy Reviews*, 2016, vol. 51, no. 6, pp. 484–499. <https://doi.org/10.1080/05704928.2016.1157809>
3. Xia J., Zhu F., Bounds J., Aluauee E., Kolomenskii A., Dong Q., He J., Meadows C., Zhang S., Schuessler H. Spectroscopic trace gas detection in air-based gas mixtures: Some methods and applications for breath analysis and environmental monitoring. *Journal of Applied Physics*, 2022, vol. 131, no. 22, pp. 220901. <https://doi.org/10.1063/5.0091263>
4. De Bleye C., Chavez P.-F., Mantanus J., Marini R., Hubert Ph., Rozet E., Ziemons E. Critical review of near-infrared spectroscopic methods validations in pharmaceutical applications. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 2012, vol. 69, pp. 125–132. <https://doi.org/10.1016/j.jpba.2012.02.003>
5. Khlebtsov N.G. Optics and biophotonics of nanoparticles with a plasmon resonance. *Quantum Electronics*, 2008, vol. 38, no. 6, pp. 504–529. <https://doi.org/10.1070/QE2008v038n06ABEH013829>
6. Boginskaya I., Gainutdinova A., Gusev A., Mailyan K., Mikhailitsyn A., Sedova M., Vdovichenko A., Ryzhikov I., Chvalun S., Lagarkov A. Detection of organic substances by a sers method using a special ag-poly(chloro-p-xylylene)-ag sandwich substrate. *Coatings*, 2020, vol. 10, no. 8, pp. 799. <https://doi.org/10.3390/coatings10080799>
7. Aitekenov S., Sultangaziyev A., Abdirova P., Yussupova L., Gaipov A., Utegulov Z., Bukasov R. Raman, Infrared and Brillouin spectroscopies of biofluids for medical diagnostics and for detection of biomarkers. *Critical Reviews in Analytical Chemistry*, 2022, in press. <https://doi.org/10.1080/10408347.2022.2036941>
8. Mandal P., Tewari B.S. Progress in surface enhanced Raman scattering molecular sensing: A review. *Surfaces and Interfaces*, 2022, vol. 28, pp. 101655. <https://doi.org/10.1016/j.surf.2021.101655>
9. Mosier-Boss P.A. Review of SERS substrates for chemical sensing. *Nanomaterials*, 2017, vol. 7, no. 6, pp. 142. <https://doi.org/10.3390/nano7060142>
10. Goncharov V.K., Kozadaev K.V., Mel'nikov K.A., Mikitchuk E.P., Novikov A.G. Atmospheric laser deposition of sers-active colloids of noble metals (Ag, Au, and Pt). *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2018, vol. 91, no. 5, pp. 1291–1295. <https://doi.org/10.1007/s10891-018-1860-6>
11. Cao Y., Zhang J., Yang Y., Huang Z., Long N.V., Fu C. Engineering of SERS substrates based on noble metal nanomaterials for chemical and biomedical applications. *Applied Spectroscopy Reviews*, 2015, vol. 50, no. 6, pp. 499–525. <https://doi.org/10.1080/05704928.2014.923901>
12. Procházka M. *Surface-Enhanced Raman Spectroscopy*. *Biological and Medical Physics, Biomedical Engineering*, Springer, 2016, 221 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-23992-7>
13. Zeng Z., Liu Y., Wei J. Recent advances in surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS): Finite-difference time-domain (FDTD) method for SERS and sensing applications. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 2016, vol. 75, pp. 162–173. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2015.06.009>
14. Hao F., Nordlander P. Efficient dielectric function for FDTD simulation of the optical properties of silver and gold nanoparticles. *Chemical Physics Letters*, 2007, vol. 446, no. 1-3, pp. 115–118. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2007.08.027>
15. Yang Z.L., Li Q., Ruan X., Li Z., Ren B., Xu H., Tian Z. FDTD for plasmonics: Applications in enhanced Raman spectroscopy. *Chinese Science Bulletin*, 2010, vol. 55, no. 24, pp. 2635–2642. <https://doi.org/10.1007/s11434-010-4044-0>
16. Schneider J.B. *Understanding the Finite-Difference Time-Domain Method*. School of electrical engineering and computer science Washington State University, 2010.
17. Rafiee M., Chandra S., Ahmed H., McCormack S.J. Optimized 3D finite-difference-time-domain algorithm to model the plasmonic

- properties of metal nanoparticles with near-unity accuracy // *Chemosensors*. 2021. V. 9. N 5. P. 114. <https://doi.org/10.3390/chemosensors9050114>
18. Grand J., Adam P.-M., Grimault A.-S., Vial A., Lamy de la Chapelle M., Bijeon J.-L., Kostcheev S., Royer P. Optical extinction spectroscopy of oblate, prolate and ellipsoid shaped gold nanoparticles: experiments and theory // *Plasmonics*. 2006. V. 1. N 2-4. P. 135–140. <https://doi.org/10.1007/s11468-006-9014-7>
 19. Xu J., Kvasnička P., Idso M., Jordan R.W., Gong H., Homola J., Yu Q. Understanding the effects of dielectric medium, substrate, and depth on electric fields and SERS of quasi-3D plasmonic nanostructures // *Optics express*. 2011. V. 19. N 21. P. 20493–20505. <https://doi.org/10.1364/OE.19.020493>
 20. Ладутенко К.С., Белов П.А. Моделирование интегральных схем нанофотоники: метод FDTD // *Наносистемы: физика, химия, математика*. 2012. Т. 3. № 5. С. 44–64.
 21. Cheng Y., Chen G., Wang X.-H., Yang S. Analytical investigations on FDTD numerical dispersion // *Proc. of the IEEE MTT-S International Conference on Numerical Electromagnetic and Multiphysics Modeling and Optimization (NEMO)*. 2020. P. 9343614. <https://doi.org/10.1109/NEMO49486.2020.9343614>
 22. Ross M.B., Blaber M.G., Schatz G.C. Using nanoscale and mesoscale anisotropy to engineer the optical response of three-dimensional plasmonic metamaterials // *Nature Communications*. 2014. V. 5. P. 4090. <https://doi.org/10.1038/ncomms5090>
 23. Bedics M.A., Kearns H., Cox J.M., Mabbott S., Ali F., Shand N.C., Faulds K., Benedict J.B., Graham D., Detty M.R. Extreme red shifted SERS nanotags // *Chemical Science*. 2015. V. 6. N 4. P. 2302–2306. <https://doi.org/10.1039/C4SC03917C>
 24. Kon I.I., Zyubin A.Y., Seteikin A.Y., Samusev I.G. FDTD simulations field on gold nanoparticles and silver nanorods // *Proceedings of SPIE*. 2021. V. 11904. P. 119041I. <https://doi.org/10.1117/12.2602518>
 25. Zeng Z., Quan X., Yu X., Chen S., Zhang S. Nanoscale lightning rod effect in 3D carbon nitride nanoneedle: Enhanced charge collection and separation for efficient photocatalysis // *Journal of Catalysis*. 2019. V. 375. P. 361–370. <https://doi.org/10.1016/j.jcat.2019.06.019>
 26. Nicoletti O., Wubs M., Mortensen N.A., Sigle W., van Aken P.A., Midgley P.A. Surface plasmon modes of a single silver nanorod: an electron energy loss study // *Optics Express*. 2011. V. 19. N 16. P. 15371–15379. <https://doi.org/10.1364/OE.19.015371>
 - properties of metal nanoparticles with near-unity accuracy. *Chemosensors*, 2021, vol. 9, no. 5, pp. 114. <https://doi.org/10.3390/chemosensors9050114>
 18. Grand J., Adam P.-M., Grimault A.-S., Vial A., Lamy de la Chapelle M., Bijeon J.-L., Kostcheev S., Royer P. Optical extinction spectroscopy of oblate, prolate and ellipsoid shaped gold nanoparticles: experiments and theory. *Plasmonics*, 2006, vol. 1, no. 2-4, pp. 135–140. <https://doi.org/10.1007/s11468-006-9014-7>
 19. Xu J., Kvasnička P., Idso M., Jordan R.W., Gong H., Homola J., Yu Q. Understanding the effects of dielectric medium, substrate, and depth on electric fields and SERS of quasi-3D plasmonic nanostructures. *Optics express*, 2011, vol. 19, no. 21, pp. 20493–20505. <https://doi.org/10.1364/OE.19.020493>
 20. Ladutenko K.S., Belov P.A. Nanophotonics integrated circuits simulation: FDTD method. *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*, 2012, vol. 3, no. 5, pp. 44–64. (in Russian)
 21. Cheng Y., Chen G., Wang X.-H., Yang S. Analytical investigations on FDTD numerical dispersion. *Proc. of the IEEE MTT-S International Conference on Numerical Electromagnetic and Multiphysics Modeling and Optimization (NEMO)*, 2020, pp. 9343614. <https://doi.org/10.1109/NEMO49486.2020.9343614>
 22. Ross M.B., Blaber M.G., Schatz G.C. Using nanoscale and mesoscale anisotropy to engineer the optical response of three-dimensional plasmonic metamaterials. *Nature Communications*, 2014, vol. 5, pp. 4090. <https://doi.org/10.1038/ncomms5090>
 23. Bedics M.A., Kearns H., Cox J.M., Mabbott S., Ali F., Shand N.C., Faulds K., Benedict J.B., Graham D., Detty M.R. Extreme red shifted SERS nanotags. *Chemical Science*, 2015, vol. 6, no. 4, pp. 2302–2306. <https://doi.org/10.1039/C4SC03917C>
 24. Kon I.I., Zyubin A.Y., Seteikin A.Y., Samusev I.G. FDTD simulations field on gold nanoparticles and silver nanorods. *Proceedings of SPIE*, 2021, vol. 11904, pp. 119041I. <https://doi.org/10.1117/12.2602518>
 25. Zeng Z., Quan X., Yu X., Chen S., Zhang S. Nanoscale lightning rod effect in 3D carbon nitride nanoneedle: Enhanced charge collection and separation for efficient photocatalysis. *Journal of Catalysis*, 2019, vol. 375, pp. 361–370. <https://doi.org/10.1016/j.jcat.2019.06.019>
 26. Nicoletti O., Wubs M., Mortensen N.A., Sigle W., van Aken P.A., Midgley P.A. Surface plasmon modes of a single silver nanorod: an electron energy loss study. *Optics Express*, 2011, vol. 19, no. 16, pp. 15371–15379. <https://doi.org/10.1364/OE.19.015371>

Авторы

Матвеева Карина Игоревна — младший научный сотрудник, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, [sc 57200305996](https://orcid.org/0000-0003-2585-163X), <https://orcid.org/0000-0003-2585-163X>, matveeva.k.i@inbox.ru

Зюбин Андрей Юрьевич — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, [sc 57193159520](https://orcid.org/0000-0002-9766-1408), <https://orcid.org/0000-0002-9766-1408>, azubin@mail.ru

Кон Игорь Игоревич — младший научный сотрудник, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, [sc 57218930458](https://orcid.org/0000-0003-3271-1635), <https://orcid.org/0000-0003-3271-1635>, IKon@kantiana.ru

Самусев Илья Геннадьевич — кандидат физико-математических наук, директор Научно-образовательного центра «Фундаментальная и прикладная фотоника. Нанопотоника», Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, [sc 12779220200](https://orcid.org/0000-0001-5026-7510), <https://orcid.org/0000-0001-5026-7510>, ISamusev@kantiana.ru

Authors

Karina I. Matveeva — Junior Researcher, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, [sc 57200305996](https://orcid.org/0000-0003-2585-163X), <https://orcid.org/0000-0003-2585-163X>, matveeva.k.i@inbox.ru

Andrey Yu. Zyubin — PhD (Physics & Mathematics), Senior Researcher, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, [sc 57193159520](https://orcid.org/0000-0002-9766-1408), <https://orcid.org/0000-0002-9766-1408>, azubin@mail.ru

Igor I. Kon — Junior Researcher, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, [sc 57218930458](https://orcid.org/0000-0003-3271-1635), <https://orcid.org/0000-0003-3271-1635>, IKon@kantiana.ru

Ilya G. Samusev — PhD (Physics & Mathematics), REC Head of the “Fundamental and Applied Photonics, Nanophotonics”, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, [sc 12779220200](https://orcid.org/0000-0001-5026-7510), <https://orcid.org/0000-0001-5026-7510>, ISamusev@kantiana.ru

Статья поступила в редакцию 28.06.2022
Одобрена после рецензирования 22.08.2022
Принята к печати 26.09.2022

Received 28.06.2022
Approved after reviewing 22.08.2022
Accepted 26.09.2022



Работа доступна по лицензии
Creative Commons
«Attribution-NonCommercial»