19

Анализ влияния квантовых эффектов на фототермические свойства слоистых наночастиц методом дискретных источников

© Ю.А. Еремин, В.В. Лопушенко

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
Москва, Россия

e-mail: lopushnk@cs.msu.ru

Поступила в редакцию 17.11.2025 г.
В окончательной редакции 29.12.2025 г.
Принята к публикации 30.12.2025 г.

Метод дискретных источников используется для исследования влияния квантовых эффектов, возникающих в золотых и серебряных ядрах слоистых наночастиц с плотным диэлектрическим покрытием. Подобное покрытие предназначено для предотвращения кластеризации частиц без снижения уровня поглощенной частицей энергии. В результате исследования установлено, что сечение поглощения слоистых частиц с серебряным ядром в четыре раза больше, чем у частиц с ядром из золота. Также определено, что диэлектрическое покрытие не снижает уровень поглощенной энергии по сравнению с однородными металлическими наночастицами. Показано, что изменение вытянутости ядра позволяет продвигать максимум сечения поглощения внутрь области прозрачности биотканей, в то время как вариация эквиобъемного диаметра ядра практически не меняет положение максимума сечения поглощения в области длин волн. Влияние же квантовых эффектов сводится к сдвигу максимума сечения поглощения в область коротких волн на величину 15 nm и небольшому снижению его величины.

Ключевые слова: слоистые наночастицы, золотые и серебряные ядра, квантовые эффекты, мезоскопические граничные условия, параметры Фейбельмана, метод дискретных источников.

DOI: 10.61011/OS.2026.02.62697.8789-25

Введение

Плазмонные наночастицы (НЧ) используются в многочисленных приложениях: генной инженерии, биосенсорике, терапии рака, при визуализации внутренних органов и доставке лекарств [1]. В частности, лечение онкологии осуществляется на основе плазмонной фототермической терапии (ФТ) с применением золотых и серебряных НЧ, которые поглощают электромагнитную энергию и преобразуют ее в тепло [2]. Большинство НЧ, разработанных для ФТ, интенсивно поглощают излучение в первом ближнем инфракрасном диапазоне (ИК) ($\sim 650-950$ nm), где свет лучше проникает в живые ткани и снижается нецелевой нагрев окружающей патологическое образование здоровой ткани [3].

Размер НЧ — важный фактор, влияющий на клеточную абсорбцию и внутриклеточное распределение. НЧ менее 10 nm могут легко проникать через клеточные мембраны, обеспечивая прямой контакт с ядерной ДНК и белками. Исследования показали, что мелкие НЧ лучше поглощаются клетками и легче проникают в опухоль, чем более крупные [4]. Хотя сферические НЧ являются наиболее распространенными, частицы анизотропной формы, такие как стержни, треугольники и звезды, широко применяются в диагностике и лечении рака. Золотые наностержни, например, демонстрируют заметное поглощение в ближнем ИК диапазоне, что позволяет проводить с их помощью ФТ опухолей, расположенных глубоко в тканях [5]. Серебряные НЧ также обладают полезными оптическими свойствами, в том числе более высокими, чем у золотых частиц, значениями сечения поглощения. Таким образом, серебро способно обеспечить более эффективное преобразование света в тепло по сравнению с золотом [6,7].

Чтобы защитить органы от нежелательного воздействия металлов, выполняется функционализация поверхности НЧ посредством нанесения биосовместимых полимерных покрытий, которые гарантируют стабильность НЧ, не снижая при этом их терапевтическую результативность. Функционализация поверхности НЧ имеет решающее значение, поскольку она приводит к уменьшению поверхностной энергии, выступая в качестве барьера, препятствующего агрегации НЧ в кластеры и обеспечивая их дисперсное распределение в органах [8].

Отношение доли поглощенного света, перешедшего в тепло, к общей поглощенной энергии, определяемой сечением поглощения НЧ, называется эффективностью фототермического преобразования. Сравнительный анализ различных геометрий плазмонных НЧ показал, что эффективность фототермического преобразования наностержней примерно вдвое выше, чем у нанооболочек и нанозвездочек, при одинаковом сечении поглощения [3].

Миниатюризация размеров НЧ представляет собой современный тренд в совершенствовании средств проведения ФТ. Например, было установлено, что уменьшенные золотые НЧ (30×7 nm) лучше поглощаются клетками тканей и обладают меньшей токсичностью, чем стандартные (56×14 nm) [4]. Однако при столь

малых размерах возникают квантовые эффекты (КЭ), которые определенным образом влияют на фототермические свойства плазмонных НЧ. Наличие таких КЭ как пространственная нелокальность, смещение электронного облака по отношению к поверхности НЧ и затухание Ландау может существенно изменять как положение, так и амплитуду плазмонного резонанса (ПР), который выступает как ключевой фактор обеспечения максимального поглощения энергии [9,10].

Целью настоящей работы является оценка влияния КЭ, возникающих в наноразмерных ядрах из благородных металлов, на сечение поглощения в задаче дифракции на металлических телах с диэлектрическим покрытием. Для анализа влияния КЭ на уровень поглощенной энергии слоистых НЧ с плазмонным ядром мы используем модификацию метода дискретных источников [11]. Учет КЭ в ядре НЧ осуществляется посредством использования мезоскопических граничных условий с параметрами Фейбельмана, так называемыми функциями поверхностного отклика (surface response functions) [12,13].

Граничная задача рассеяния

Будем рассматривать возбуждение линейно поляризованной плоской электромагнитной волной P-поляризации $\{\mathbf{E}_0, \mathbf{H}_0\}$ слоистой частицы с металлическим ядром (область D_i), покрытым слоем прозрачного диэлектрика (область D_s). Будем считать, что частица обладает осевой симметрией относительно оси OZ. Внешнюю неограниченную область, окружающую частицу, обозначим как D_e. Поверхности металлического ядра ∂D_i и диэлектрического слоя ∂D_s считаем достаточно гладкими ($\partial D_{i,s} \in C^{(2,\tau)}$). Все среды считаются немагнитными, а временная зависимость электромагнитного поля имеет вид $\exp(j\omega t)$.

Сформулируем граничную задачу рассеяния для слоистой НЧ с диэлектрическим покрытием. Она включает в себя следующие уравнения и условия.

1. Систему уравнений Максвелла в областях постоянства параметров

$$\nabla \times \mathbf{H}_\alpha = jk\varepsilon_\alpha \mathbf{E}_\alpha,\ \nabla \times \mathbf{E}_\alpha = -jk\mathbf{H}_\alpha \text{ в } D_\alpha,\ \alpha = i, s, e. \tag{1}$$

2. Мезоскопические условия сопряжения полей на поверхности металлического ядра

$$n_i \times (\mathbf{E}_i(P) - \mathbf{E}_s(P)) = -d_\perp \mathbf{n}_i \times \nabla\{\mathbf{n}_i \cdot (\mathbf{E}_i(P) - \mathbf{E}_s(P))\},$$

$$\mathbf{n}_i(\mathbf{H}_i(P) - \mathbf{H}_s(P)) = 0, \quad P \in \partial D_i. \tag{2}$$

3. Классические условия сопряжения на внешней поверхности диэлектрического слоя

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

$$\mathbf{n}_s \times (\mathbf{H}_s(Q) - \mathbf{H}_e(Q)) = \mathbf{n}_s \times \mathbf{H}_0(Q), \quad Q \in \partial D_s. \tag{3}$$

4. Условия излучения Сильвера-Мюллера [14] на бесконечности

$$\lim_{r\to\infty} r \cdot \left(\sqrt{\varepsilon_e}\mathbf{E}_e(M) \times \frac{\mathbf{r}}{r} - \mathbf{H}_e(M)\right) = 0,\ r = |M|,\ M \in D_e. \tag{4}$$

Здесь $\{\mathbf{E}_e, \mathbf{H}_e\}$ — рассеянное поле вне слоистой частицы, $\{\mathbf{E}_i, \mathbf{H}_i\}$ — полное поле внутри ядра, $\{\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s\}$ — полное поле внутри оболочки, $\varepsilon_{e,s,i}$ — диэлектрические проницаемости сред в соответствующих областях, причем $\mathrm{Im}\varepsilon_{e,s} = 0$, $\mathrm{Im}\varepsilon_i \geq 0$, $\mathbf{n}_{i,s}$ — единичные внешние нормали к поверхностям раздела сред с различными характеристиками $\partial D_{i,s}$, $k = \omega/c$.

Комплексный параметр Фейбельмана $d_\perp(\omega)$ определяется через плотность индуцированных внешним полем поверхностных зарядов на поверхности раздела металл-диэлектрик. Его вещественная часть соответствует центру масс электронного облака поверхностных зарядов, мнимая — описывает затухание Ландау. Для ядра из благородных металлов вещественная часть параметра Фейбельмана $\mathrm{Re}d_\perp(\omega) \leq 0$ [12], что означает „вдавливание“ электронного облака внутрь поверхности ядра.

Будем полагать, что граничная задача (1)–(4) имеет единственное решение.

Метод дискретных источников

Для решения поставленной граничной задачи мы будем использовать метод дискретных источников (МДИ) [11]. МДИ — это численно-аналитический, поверхностно-ориентированный метод, в рамках которого представление для поля строится в виде суммы полей мультиполей, расположенных на оси симметрии внутри слоистой частицы. Такой подход позволяет автоматически удовлетворить системе уравнений Максвелла (1) в соответствующих областях и условиям излучения Сильвера-Мюллера (4) на бесконечности. Неизвестные коэффициенты (амплитуды) дискретных источников (ДИ) находятся из мезоскопических условий сопряжения (2) на поверхности ядра и стандартных условий сопряжения (3) на внешней поверхности оболочки. Важно подчеркнуть, что МДИ особенно эффективен в задачах рассеяния с мезоскопическими граничными условиями, поскольку поля, создаваемые ДИ вблизи поверхности ядра, представляют собой аналитические функции [13]. Это позволяет аналитически вычислять производные любого порядка на поверхности ядра, что необходимо для удовлетворения мезоскопических граничных условий (2).

В качестве внешнего возбуждения будем рассматривать P-поляризованную плоскую волну, распространяющуюся наклонно по отношению к оси OZ. Именно в этом случае ПР достигает своего максимального значения [13]. Будем полагать, что вектор $\mathbf{E}_0$ лежит в плоскости падения XZ, а угол между волновым вектором и осью вращения составляет $\pi - \theta_0$. В этом случае поле

внешнего возбуждения принимает вид

$$\mathbf{E}_0 = (\mathbf{e}_x \cos\theta_0 + \mathbf{e}_z \sin\theta_0)\chi(x, z),$$
$$\mathbf{H}_0 = -\sqrt{\varepsilon_e}\mathbf{e}_y\chi(x, z), \quad (5)$$

где $\chi(x, z) = \exp\{-jk_e(x\sin\theta_0 - z\cos\theta_0)\}$, $k_e = k\sqrt{\varepsilon_e}$, $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$ — декартов базис.

Для учета осевой симметрии рассеивателя необходимо разложить поле скалярной плоской волны $\chi(x, z)$ в (5) в ряд Фурье вида

$$\exp\{-jk_e x\sin\theta_0\} = \sum_{m=0}^{\infty}(2 - \delta_{0m})(-j)^m \times j_m(k_e\rho\sin\theta_0)\cos(m\varphi). \quad (6)$$

Здесь δ_{0m} — символ Кронекера, j_m — цилиндрическая функция Бесселя, ρ, φ — цилиндрические координаты. Подставляя (6) в (5) и переходя от декартовой системы к цилиндрической, получим, что зависимость компонент полей от азимутального угла φ будет определяться функциями $\cos[(m+1)\varphi]$ и $\sin[(m+1)\varphi]$.

Поля в областях $D_{i,s,e}$ построим на основе векторных потенциалов, которые в цилиндрической системе координат могут быть записаны следующим образом [13]:

$$\mathbf{A}^{1,\alpha}_{mn} = Y^{\alpha}_m(\xi, z^{\alpha}_n)\{\mathbf{e}_\rho\cos[(m+1)\varphi] - \mathbf{e}_\varphi\sin[(m+1)\varphi]\}, \alpha = i, s, e,$$
$$\mathbf{A}^{2,\alpha}_{mn} = Y^{\alpha}_m(\xi, z^{\alpha}_n)\{\mathbf{e}_\varphi\sin[(m+1)\varphi] + \mathbf{e}_\varphi\cos[(m+1)\varphi]\},$$
$$\mathbf{A}^{3,\alpha}_{n} = Y^{\alpha}_0(\xi, z^{\alpha}_n)\mathbf{e}_z, \quad (7)$$

где соответствующие функции $Y^{\alpha}_m(\xi, z^{\alpha}_n)$ имеют вид

$$Y^{e}_m(\xi, z^{e}_n) = h^{(2)}_m(k_e R_{z^e_n})\left(\frac{\rho}{R_{z^e_n}}\right)^m,$$
$$Y^{i}_m(\xi, z^{i}_n) = j_m(k_i R_{z^i_n})\left(\frac{\rho}{R_{z^i_n}}\right)^m,$$
$$Y^{s\pm}_m(\xi, z^{s}_n) = h^{(2,1)}_m(k_s R_{z^s_n})\left(\frac{\rho}{R_{z^s_n}}\right)^m,$$

$h^{(1,2)}_m$ — сферические функции Ханкеля, в $D_e h^{(2)}_m$ удовлетворяет условиям излучения, j_m — сферические функции Бесселя, которые используются для представления поля внутри ядра, $k_{i,s,e} = k\sqrt{\varepsilon_{i,s,e}}$, $\xi = (\rho, z)$, $\rho^2 = x^2 + y^2$, $R^2_{z_n} = \rho^2 + (z - z_n)^2$, $\{z^{\alpha}_n\}_{n=1}^{N^m_\alpha}$ — координаты ДИ, распределенных вдоль оси вращения OZ, число которых может различаться в зависимости от номера $m = \overline{1, M}$ гармоники Фурье по φ.

Тогда представления для полей $\{\mathbf{E}_\alpha, \mathbf{H}_\alpha\}$ в областях D_α $(\alpha = i, s, e)$ для P-поляризации приобретают вид

$$\mathbf{E}^N_\alpha = \sum_{m=0}^{M}\sum_{n=1}^{N^m_\alpha}\left\{p^{\alpha}_{mn}\frac{j}{k\varepsilon_\alpha}\nabla\times\nabla\times\mathbf{A}^{1,\alpha}_{mn} + q^{\alpha}_{mn}\frac{1}{\varepsilon_\alpha}\nabla\times\mathbf{A}^{2,\alpha}_{mn}\right\} + \sum_{n=1}^{N^0_\alpha} r^{\alpha}_n\frac{j}{k\varepsilon_\alpha}\nabla\times\nabla\times\mathbf{A}^{3,\alpha}_n,$$

$$\mathbf{H}^N_\alpha = \frac{j}{k}\nabla\times\mathbf{E}^N_\alpha, \ \alpha = i, s\pm, e. \quad (8)$$

Поле внутри оболочки представляется в виде „уходящих“ $(h^{(2)}_m)$ и „приходящих“ $(h^{(1)}_m)$ волн, т. е.

$$\mathbf{E}^N_s = \mathbf{E}^N_{s+} + \mathbf{E}^N_{s-}, \ \mathbf{H}^N_s = \mathbf{H}^N_{s+} + \mathbf{H}^N_{s-}. \quad (9)$$

Легко убедиться, что построенные таким образом поля (8)–(9) удовлетворяют всем условиям граничной задачи (1)–(4), за исключением граничных условий (2) и (3), поставленных на поверхностях раздела сред с различными параметрами $\partial D_{i,s}$. Неизвестные амплитуды ДИ $\{p^{i,s\pm,e}_{mn}, q^{i,s\pm,e}_{mn}, r^{i,s\pm,e}_n\}$ определяются из этих граничных условий (2) и (3).

Остановимся кратко на вычислительной схеме МДИ. Поскольку построенные поля (8) и (9) представляют конечные суммы ряда Фурье по азимутальной переменной φ на поверхностях вращения $\partial D_{i,s}$, то удовлетворение граничных условий на поверхностях раздела сред сводится к последовательному сшиванию гармоник Фурье полей на образующих поверхностей вращения. Вычисление амплитуд ДИ осуществляется посредством использования обобщенного метода коллокаций [15] при поточечном сшивании гармоник Фурье полей на образующей поверхности вращения. Количество точек коллокаций L остается одинаковым для всех m гармоник фурье-полей, а число ДИ может различаться для внутреннего и внешнего поля и может меняться в зависимости от номера гармоники m. Как правило, выполняется соотношение $N^m_i + N^m_e + N^m_{s+} + N^m_{s-} < 4L$, т. е. соответствующие линейные системы оказываются переопределенными. Определение набора амплитуд ДИ выполняется с использованием QR-факторизации соответствующих матриц с последующим вычислением псевдорешения [16]. Контроль точности полученного приближенного решения можно осуществить посредством вычисления невязки полей на поверхностях слоистой частицы с использованием найденных амплитуд ДИ. Невязка вычисляется в точках, промежуточных по отношению к точкам коллокации, и служит надежным критерием сходимости приближенного решения к точному решению задачи дифракции [11].

При проведении расчетов нас будет интересовать сечение поглощения энергии. Для его вычисления мы будем использовать оптическую теорему [17]:

$$\sigma_{\text{abs}} = \sigma_{\text{ext}} - \sigma_{\text{scs}}, \quad (10)$$

здесь σ_{scs} — полное сечение рассеяния, σ_{ext} — сечение экстинкции, которое показывает, какую часть энергии забирает рассеиватель у плоской волны на рассеяние и поглощение. Сечение экстинкции вычисляется на основе диаграммы направленности рассеянного поля [13], компоненты которой применительно к нашему случаю

принимают вид

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

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

Сечение экстинкции, в свою очередь, определяется через диаграмму как

$$\sigma_{\text{ext}}(\lambda,\theta_0) = -\frac{4\pi}{k_e} \operatorname{Im} F_\theta(\pi-\theta_0,\pi). \qquad (11)$$

Сечение рассеяния выглядит следующим образом:

$$\sigma_{\text{scs}}(\lambda,\theta_0) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \{|F_\theta(\theta,\varphi)|^2 + |F_\varphi(\theta,\varphi)|^2\} \sin\theta \, d\theta.$$

Как уже отмечалось выше, контроль погрешности результата осуществляется посредством вычисления невязки полей на поверхностях ядра и оболочки, что позволяет получать достоверные результаты как для ближнего, так и дальнего полей.

Численные результаты

Рассмотрим слоистую НЧ типа ядро-оболочка. В качестве базовой геометрии выберем вытянутый сфероид эквиобъемного диаметра $D = 11\,\text{nm}$ и с соотношением осей $r = b/a = 4$ (здесь b — большая ось сфероида, совпадающая с осью симметрии OZ, a — малая ось). Пусть плазмонное ядро окружено диэлектрической оболочкой толщины $d = 4\,\text{nm}$ таким образом, что поверхность оболочки представляет собой поверхность сфероида, эквидистантная ядру на полюсе и экваторе сфероидального ядра. То есть это поверхность сфероида с осями $a+d$ и $b+d$. В базовой геометрии будем полагать, что размеры осей сфероида составляют $b = 28\,\text{nm}$, $a = 7\,\text{nm}$. Отметим, что на практике используются стержни с соотношением осей от 2 до 6 с толщиной покрытия от 3 до 30 nm [18]. В качестве базового покрытия выберем материал CTAB (гексадецилтриметиламмония бромид), показатель преломления которого $\sqrt{\varepsilon_s} = 1.526$ [7]. Заметим, что на практике иногда используют также материал PEG (полиэтиленгликоль) с показателем преломления $\sqrt{\varepsilon_s} = 1.457$. В качестве плазмонных материалов ядра будем рассматривать золото (Au) и серебро (Ag). Следует отметить, что серебро более подвержено окислению, поэтому выбор надежного защитного покрытия для серебра имеет решающее значение для обеспечения долговременной стабильности при проведении ФТ. Будем полагать, что слоистая частица располагается во внешней среде без поглощения, моделирующей женскую грудь, с показателем преломления $\sqrt{\varepsilon_e} = 1.405$ [19]. Пусть P-поляризованная плоская волна распространяется в направлении, перпендикулярном оси симметрии частицы ($\theta_0 = 90^\circ$), а вектор электрического поля лежит в плоскости XZ и параллелен большей оси сфероида. Как будет показано ниже, данная конфигурация возбуждения обеспечивает достижение максимальной амплитуды ПР.

Квантовые параметры, необходимые для вычисления параметра Фейбельмана для золота и серебра, определены значениями из [20]:

$$\text{Au}: \quad \hbar\omega_p = 9.02\,\text{eV}, \quad \hbar\gamma = 0.071\,\text{eV},$$
$$v_F = 1.39\cdot 10^{12}\,\mu\text{m/s}, \quad \mathcal{D} = 8.62\cdot 10^{8}\,\mu\text{m}^2/\text{s},$$
$$\text{Ag}: \quad \hbar\omega_p = 9.17\,\text{eV}, \quad \hbar\gamma = 0.021\,\text{eV},$$
$$v_F = 1.39\cdot 10^{12}\,\mu\text{m/s}, \quad \mathcal{D} = 9.62\cdot 10^{8}\,\mu\text{m}^2/\text{s}.$$

Здесь ω_p — плазменная частота металла, γ — скорость затухания Друде, v_F — скорость Ферми, $\mathcal{D}$ — коэффициент диффузии электронов, $\hbar$ — приведенная постоянная Планка. Показатели преломления золота и серебра с учетом частотной дисперсии брались из базы данных [21].

При проведении расчетов мы используем аналитическую формулу для параметра Фейбельмана, полученную в работе [22], а именно

$$d_\perp(\omega) = -j\,\frac{\varepsilon_i\varepsilon_s}{\varepsilon_i-\varepsilon_s}\,\frac{\sqrt{\beta^2+\mathcal{D}(\gamma+j\omega)}}{\omega_p\sqrt{\varepsilon_b}}\left(\frac{\varepsilon_b}{\varepsilon_i}-1\right)^{1.5}, \qquad (12)$$

где

$$\varepsilon_b = \varepsilon_i + \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega-j\gamma)}, \quad \beta^2 = \frac{3}{5}v_F^2.$$

Именно формула (12) позволяет рассматривать плазмонные металлы с различным диэлектрическим покрытием.

Перейдем к обсуждению численных результатов. На рис. 1 приведены сравнительные результаты для сечения поглощения (10) в зависимости от длины волны λ внешнего возбуждения, полученные для Au (рис. 1, a) и Ag (рис. 1, b). В обоих случаях сравнивается однородная частица без покрытия (homogeneous, hmg) со слоистыми частицами, имеющими различные покрытия PEG и CTAB. Классический случай (local response approximation, lra) — кривые с маркерами, учет КЭ с помощью мезоскопических граничных условий (surface response functions, srf) — сплошные кривые.

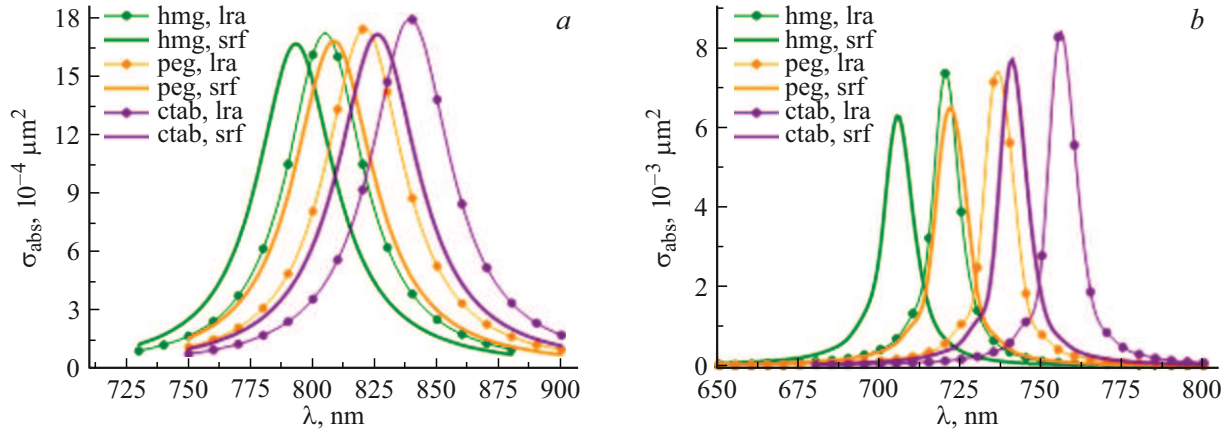

Рис. 1. Сравнение локального (lra) и мезоскопического (srf) подходов для золотых (a) и серебряных (b) частиц без покрытия (hmg) и с покрытиями PEG и CTAB. Амплитуда ПР в случае Ag в 4 раза больше, чем у Au.

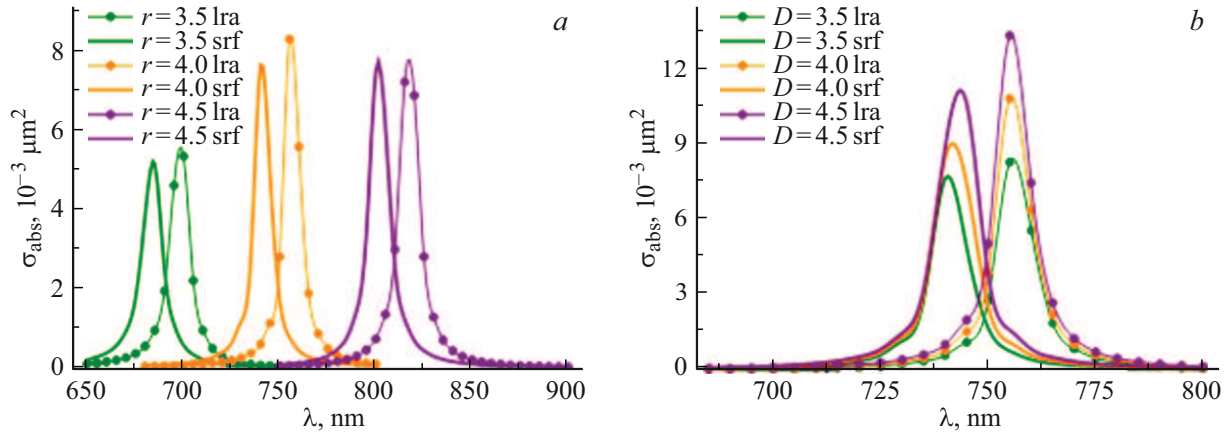

Рис. 2. Зависимость сечения поглощения серебряной частицы с покрытием CTAB от вытянутости ядра (a) и эквиобъемного диаметра ядра (b): сравнение результатов, полученных с помощью локального (lra) и мезоскопического (srf) подходов. Увеличение вытянутости ведет к сдвигу ПР в область длинных волн. Слабая вариация размера ядра немного влияет на амплитуду ПР, но его положение не меняется.

Из рисунка видны существенные различия между графиками, построенными для золота и серебра. Во-первых, амплитуда ПР в случае серебряного ядра в четыре раза превосходит амплитуду, соответствующую золотому ядру. Во-вторых, максимум у золота лежит почти на 100 nm правее максимума серебра, ближе к правой части окна прозрачности биотканей. Кроме того, кривая в случае серебра гораздо острее. В то же время сдвиг в коротковолновую область (blue shift) для обоих металлов примерно одинаков и равен 15 nm, а снижение амплитуды ПР (damping) также почти совпадает и составляет около 5 %. Отметим, что при наличии покрытия снижение амплитуды ПР остается таким же, как и в случае однородной частицы. Кроме того, увеличение плотности покрытия естественно приводит к смещению ПР в область длинных волн (red shift).

Для примера приведем детали расчета 4-й кривой на рис. 1, a, соответствующей частице AuCTAB, $D = 11$ nm, $r = 4$, $d = 4$ nm, с мезоскопическими граничными условиями (srf). В этом случае величина относительной невязки в норме l_2 менее 0.4 % обеспечивала 3 стабильных знака сечения поглощения σ_{abs} во всем диапазоне длин волн. При этом использовались 3 гармоники Фурье ($m = 0, 1$ и независящая от φ гармоника), суммарное число точек коллокаций на обеих поверхностях равнялось $L = 542$, а число источников для представления полей составляло $N_i^m = N_e^m = N_{s-}^m = N_{s+}^m = 68$.

Ограничимся далее рассмотрением частиц с ядром из серебра. На рис. 2, a представлены результаты расчета сечения поглощения для частиц базовой геометрии с различной степенью вытянутости. Видно, что увеличение соотношения осей ($r = 3.5, 4, 4.5$) сфероида продвигает ПР вглубь окна прозрачности биотканей. При этом влияние КЭ сводится лишь к сдвигу ПР в область коротких волн. На рис. 2, b можно видеть результаты, соответствующие вариации эквиобъемного диаметра серебряного ядра ($D = 11, 12, 13$ nm). Инте-

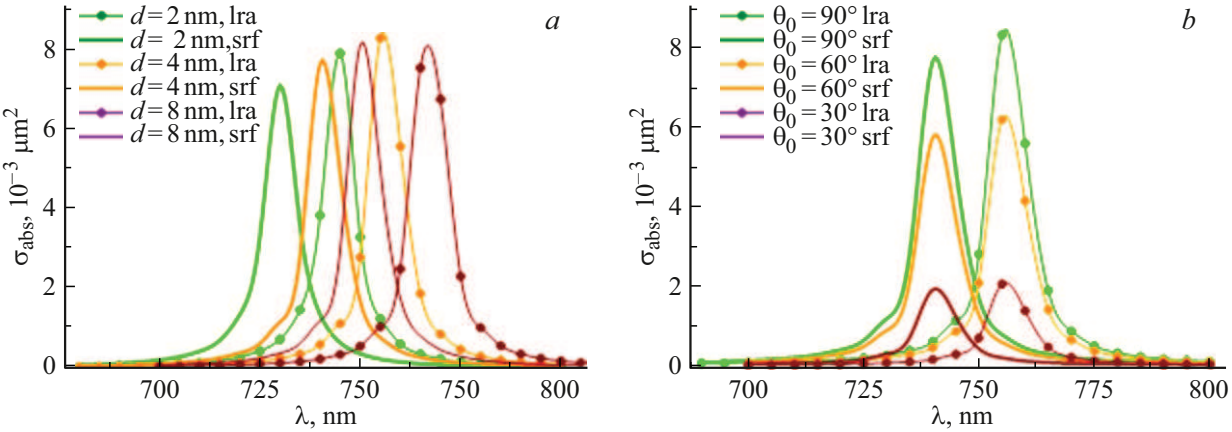

Рис. 3. Зависимость сечения поглощения серебряной частицы с покрытием CTAB от толщины покрытия (a) и угла падения плоской волны (b): сравнение результатов, полученных с помощью локального (lra) и мезоскопического (srf) подходов. При увеличении толщины покрытия ПР сдвигается в область длинных волн, видимо, за счет увеличения размеров частицы. При наклонном падении волны уменьшается z-компонента поля и значительно снижается амплитуда ПР.

ресно отметить, что положение ПР-сечения поглощения в области длин волн практически не зависит от изменения диаметра в данных пределах.

На рис. 3, a можно видеть графики сечения рассеяния при вариациях толщины диэлектрического покрытия CTAB ($d = 2, 4, 8$ nm). Смещение в длинноволновую область происходит, по-видимому, в связи с увеличением общего размера слоистой частицы, влияние же КЭ сводится к сдвигу в область коротких волн на 15 nm. Рис. 3, b посвящен исследованию сечения поглощения слоистой частицы базовой конфигурации при изменении угла падения плоской волны ($\theta_0 = 30°, 60°, 90°$). Хорошо видно, как при уменьшении угла падения волны снижается и амплитуда ПР. При этом сдвиг в сторону коротких волн, возникающий при учете КЭ, остается постоянным и равным 15 nm.

Заключение

Сформулируем основные результаты, полученные в работе.

1. Метод дискретных источников был успешно адаптирован к исследованию проявления КЭ в плазмонном ядре слоистой НЧ. При этом учет КЭ проводился на основе мезоскопических граничных условий с параметрами Фейбельмана.

2. Проведен сравнительный анализ сечения поглощения слоистых частиц для наноразмерных ядер из золота и серебра. В результате установлено, что диэлектрическое покрытие не влияет на фототермические свойства слоистых НЧ. При этом частицы с серебряными ядрами демонстрируют в четыре раза более высокие значения поглощенной энергии, чем золотые. Учет же КЭ приводит к смещению положения ПР в коротковолновую область на 15 nm при небольшом уменьшении его амплитуд на 5 %.

3. Показано, что изменение вытянутости ядра при постоянной толщине покрытия позволяет продвигать максимум сечения поглощения внутрь области прозрачности биотканей. Слабая вариация эквиобъемного диаметра ядра практически не меняет положение ПР в области длин волн.

4. Установлено, что изменение угла падения плоской волны по отношению к оси симметрии частицы существенно снижает величину сечения поглощения, оставляя при этом сдвиг между классическим и мезоскопическим ПР постоянным и равным 15 nm.

Финансирование работы

Исследования авторов поддержаны Московским центром фундаментальной и прикладной математики МГУ имени М.В. Ломоносова по соглашению № 075-15-2025-345.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] L. Liz-Marzán. Ed. *Colloidal Synthesis of Plasmonic Nanometals* (Jenny Stanford Publishing, N.Y., 2021).

[2] A. Andleeb, A. Andleeb, S. Asghar, G. Zaman, M. Tariq, A. Mehmood, M. Nadeem, C. Hano, J.M. Lorenzo, B.H. Abbasi. Cancers (Basel), **13** (11), 2818 (2021). DOI: 10.3390/cancers13112818

[3] W.H. Skinner, M. Salimi, L. Moran, I. Blein-Dezayes, M. Mehta, S. Mosca, A.-G. Vaideanu, B. Gardner, F. Palombo, A.G. Schätzlein, P. Matousek, T. Harries, N. Stone. J. Phys. Chem. C, **129** (3), 1864 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpcc.4c06381

[4] N. Hlapisi, S.P. Songca, P.A. Ajibade. Pharmaceutics, **16** (10), 1268 (2024). DOI: 10.3390/pharmaceutics16101268

[5] H.S. Han, K.Y. Choi. Biomedicines, **9** (3), 305 (2021). DOI: 10.3390/biomedicines9030305
[6] O. Gherasim, R.A. Puiu, A.C. Bîrcă, A.-C. Burduşel, A.M. Grumezescu. Nanomaterials, **10** (11), 2318 (2020). DOI: 10.3390/nano10112318
[7] P. Singh, S. Pandit, S.R. Balusamy, M. Madhusudanan, H. Singh, H.M. Amsath Haseef, I. Mijakovic. Advanced Healthcare Materials, **14** (4), e2403059 (2024). DOI: 10.1002/adhm.202403059
[8] W.A. Arcos Rosero, A. Bueno Barbezan, C. Daruich de Souza, M.E. Chuery Martins Rostelato. Pharmaceutics, **16** (2), 255 (2024). DOI: 10.3390/pharmaceutics16020255
[9] C. Tserkezis, W. Yan, W. Hsieh, G. Sun, J.B. Khurgin, M. Wubs, N.A. Mortensen. Int. J. Mod. Phys. B, **31** (24), 1740005 (2017). DOI: 10.1142/S0217979217400057
[10] P.E. Stamatopoulou, C. Tserkezis. Opt. Materials Express, **12** (5), 1869 (2022). DOI: 10.1364/OME.456407
[11] Ю.А. Еремин, А.Г. Свешников. Журн. вычислит. мат. мат. физ., **61** (4), 34 (2021). DOI: 10.31857/S0044466921040049 [Yu.A. Eremin, A.G. Sveshnikov. Computat. Math. Math. Phys., **61** (4), 564 (2021). DOI: 10.1134/S0965542521040047].
[12] N.A. Mortensen. Nanophotonics, **10** (10), 2563 (2021). DOI: 10.1515/nanoph-2021-0156
[13] Ю.А. Еремин, В.В. Лопушенко. Опт. и спектр., **133** (7), 783 (2025). DOI: 10.61011/OS.2025.07.61113.8146-25
[14] Д. Колтон, Р. Кресс. *Методы интегральных уравнений в теории рассеяния* (Мир, М., 1987). [D. Colton, R. Kress. *Integral Equation Methods in Scattering Theory* (John Wiley & Son, N.Y., 1983)].
[15] Н.С. Бахвалов. *Численные методы* (Наука, М., 1975). [N.S. Bakhvalov. *Numerical methods* (MIR Publishers, M., 1977)].
[16] В.В. Воеводин, Ю.А. Кузнецов. *Матрицы и вычисления* (Наука, М., 1984).
[17] Х. Хёнл, А. Мауэ, К. Вестпфаль. *Теория дифракции* (Мир, М., 1964).
[18] N.G. Khlebtsov, S.V. Zarkov. J. Phys. Chem. C, **128** (36), 15029 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcc.4c03126
[19] Y. Eremin, V. Lopushenko. Nanomaterials, **11** (12), 3297 (2021). DOI: 10.3390/nano11123297
[20] S. Raza, S.I. Bozhevolnyi, M. Wubs, N.A. Mortensen. J. Physics: Condensed Matter, **27** (18), 183204 (2015). DOI: 10.1088/0953-8984/27/18/183204
[21] M.N. Polyanskiy. Refractiveindex.info Database of Optical Constants, Scientific Data, **11** (1), 94 (2024). DOI: 10.1038/s41597-023-02898-2
[22] M.H. Eriksen, C. Tserkezis, N.A. Mortensen, J.D. Cox. Nanophotonics, **13** (15), 2751 (2024). DOI: 10.1515/nanoph-2023-0575