

## BP/VÚ/DP Modelování nano a sub-nano metrové oblasti povrchu kovových nanostruktur

vedoucí práce: Ing. Milan Burda, Ph.D.

školitel-specialista: Ing. Pavel Kwiecien, Ph.D.

Přesnost fyzikálního popisu interakce plazmonické nanostruktury s vnějším polem je odvislá nejen od adekvátního popisu interakce vnitřní (objemové) části materiálu, ale též i blízkého okolí jeho povrchu. Nelokální plazmonické modely jakým je hydrodynamický model (HDM) [1] a jeho různé modifikace započítávají do celkové odezvy kovové nanostruktury vliv vývoje elektronového plynu v objemu kovové nanostruktury. Se zmenšujícími se rozměry nanostruktury však narůstá poměr povrchu ku objemu uvažovaného nanoobjektu a do jeho odezvy o to více promlouvají jevy odehrávající se na rozhraní, jež mohou nezanedbatelnou měrou ovlivnit i vnitřní odezvu materiálu, a které zasahují za rámec standardního nelokálního popisu. Elektronový plyn nerespektuje geometricky stanovenou hranici a spíše lze uvažovat o kontinuálním poklesu hustoty elektronového plynu se vzdávající vzdáleností od povrchu tvořeného iontovou mřížkou kovu. V této souvislosti se hovoří o takzvaném „spill out“ jevu [2]. Dalšími jevy hodnými pozornosti je povrchem zesílený útlum elektronového plynu často označovaný jako Landaův útlum [3] či jev tunelování mezi dvěma kovovými nanostrukturami [4], jejichž vzájemná vzdálenost je dostatečně malá. Slibným východiskem pro modelování vybraných jevů na rozhraní se jeví Lindhardova teorie permitivity kovu [5] či Landaova-Fermiho teorie kapaliny nabitých neinteragujících kvazi-částic [5]. Zamýšleným propojením nelokálního modelu objemové části nanostruktury a vhodného modelu pro velmi blízkou (sub-nanometrová až nanometrová) oblast jejího rozhraní, by bylo možné zpřesnit výpočty interakce a zároveň zkoumat jevy kvantové povahy.

### Reference

- [1] Hiremath, K. R., Zschiedrich, L., & Schmidt, F. (2012). Numerical Solution of Nonlocal Hydrodynamic Drude Model for Arbitrary Shaped Nano-Plasmonic Structures Using Nédélec Finite Elements. *Journal of Computational Physics*, 231(17), 5890–5896. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2012.05.013>
- [2] Alves, R. A., Pacheco-Peña, V., & Navarro-Cía, M. (2022). Madelung Formalism for Electron Spill-Out in Nonlocal Nanoplasmonics. *The Journal of Physical Chemistry C*, 126(34), 14758–14765. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.2c04828>
- [3] Shahbazyan, T. V. (2016). Landau Damping of Surface Plasmons in Metal Nanostructures. *Physical Review B*, 94(23), 235431. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.235431>
- [4] Esteban, R., Zugarramurdi, A., Zhang, P., Nordlander, P., García-Vidal, F. J., Borisov, A. G., & Aizpurua, J. (2015). A Classical Treatment of Optical Tunneling in Plasmonic Gaps: Extending the Quantum Corrected Model to Practical Situations. *Faraday Discussions*, 178, 151–183. <https://doi.org/10.1039/C4FD00196F>
- [5] Mahan, G. D. (2000). *Many-Particle Physics* (3rd ed). Kluwer Academic/Plenum Publishers.