

Интерполяция

Выполнил: Литти Тимофей

1. Постановка задачи

Интерполяция и диэлектрическая проницаемость

Для каждого металла заданы таблицы значений реальной (n) и мнимой (k) частей комплексного показателя преломления в зависимости от длины волны λ . Комплексная диэлектрическая проницаемость $\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$ рассчитывается как квадрат показателя преломления⁴:

$$\varepsilon = (n + ik)^2 = (n^2 - k^2) + i(2nk)$$

Следовательно:

- $\varepsilon_1 = n^2 - k^2$ ⁵
- $\varepsilon_2 = 2nk$ ⁶

Плазмонный резонанс

Поляризуемость α сферической частицы в среде с диэлектрической проницаемостью ε_{ex} (для вакуума/воздуха $\varepsilon_{ex} = 1$) определяется формулой:

$$\alpha = 3\varepsilon_{ex} \frac{\varepsilon_m - \varepsilon_{ex}}{\varepsilon_m + 2\varepsilon_{ex}}$$

Условие резонанса: Знаменатель стремится к минимуму, что для малых потерь (ε_2) соответствует условию $\text{Re}(\varepsilon_m) = -2\varepsilon_{ex}$.

2. Код

Для интерполяции мы будем использовать кубические сплайны, так как они обеспечивают гладкость функции, необходимую для физических спектров.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.interpolate import interp1d

# --- Данные из задания ---
```

```

# Золото (Au)
wl_au = np.array([0.4, 0.5, 0.652, 0.73, 0.85, 0.918, 1.033])
n_au = np.array([1.65, 0.916, 0.166, 0.164, 0.198, 0.222, 0.272])
k_au = np.array([1.956, 1.840, 3.15, 4.35, 5.63, 6.168, 7.07])

# Серебро (Ag)
wl_ag = np.array([0.405, 0.5, 0.664, 0.75, 0.85, 0.918, 1.033])
n_ag = np.array([0.173, 0.13, 0.14, 0.146, 0.152, 0.18, 0.22])
k_ag = np.array([1.95, 2.974, 4.15, 4.908, 5.72, 6.183, 6.99])

# Диапазон интерполяции (0.3 - 1.2 микрон)
wl_fine = np.linspace(0.3, 1.2, 500)

def process_metal(wl_exp, n_exp, k_exp, label):
    # Интерполяция n и k
    # Используем 'cubic' для гладкости или 'linear' для строгого следования
    # точкам
    f_n = interp1d(wl_exp, n_exp, kind='cubic', fill_value="extrapolate")
    f_k = interp1d(wl_exp, k_exp, kind='cubic', fill_value="extrapolate")

    n_fine = f_n(wl_fine)
    k_fine = f_k(wl_fine)

    # Расчет диэлектрической проницаемости  $\epsilon_s = (n + ik)^2$ 
    eps1 = n_fine**2 - k_fine**2
    eps2 = 2 * n_fine * k_fine

    # Расчет поляризуемости  $\alpha$  ( $\epsilon_{ex} = 1$ )
    eps_m = eps1 + 1j*eps2
    eps_ex = 1.0
    alpha = 3 * eps_ex * (eps_m - eps_ex) / (eps_m + 2 * eps_ex)

    return n_fine, k_fine, eps1, eps2, alpha

# Получение данных
n_au_f, k_au_f, e1_au, e2_au, alpha_au = process_metal(wl_au, n_au, k_au,
"Au")
n_ag_f, k_ag_f, e1_ag, e2_ag, alpha_ag = process_metal(wl_ag, n_ag, k_ag,
"Ag")

# --- Визуализация ---
fig, axs = plt.subplots(2, 2, figsize=(14, 10))

# 1. График n и k для Золота
axs[0, 0].plot(wl_fine, n_au_f, 'r-', label='n (interp)')
axs[0, 0].plot(wl_fine, k_au_f, 'b-', label='k (interp)')

```

```

axs[0, 0].scatter(wl_au, n_au, c='red', label='n (exp)')
axs[0, 0].scatter(wl_au, k_au, c='blue', label='k (exp)')
axs[0, 0].set_title("Показатель преломления Au")
axs[0, 0].legend()

# 2. График eps1 и eps2 для Золота и Серебра
axs[0, 1].plot(wl_fine, e1_au, 'g-', label='eps1 Au')
axs[0, 1].plot(wl_fine, e1_ag, 'g--', label='eps1 Ag')
axs[0, 1].axhline(-2, color='black', linestyle=':', label='Resonance condition')
axs[0, 1].set_title("Диэлектрическая проницаемость (Re)")
axs[0, 1].legend()

# 3. Поляризуемость (Abs(alpha)) для поиска резонанса
axs[1, 0].plot(wl_fine, np.abs(alpha_au), 'orange', label='|alpha| Au')
axs[1, 0].plot(wl_fine, np.abs(alpha_ag), 'cyan', label='|alpha| Ag')
axs[1, 0].set_title("Абсолютная поляризуемость |α|")
axs[1, 0].legend()

# 4. Мнимая часть поляризуемости (соответствует поглощению)
axs[1, 1].plot(wl_fine, alpha_au.imag, 'orange', label='Im(alpha) Au')
axs[1, 1].plot(wl_fine, alpha_ag.imag, 'cyan', label='Im(alpha) Ag')
axs[1, 1].set_title("Мнимая часть поляризуемости Im(α)")
axs[1, 1].legend()

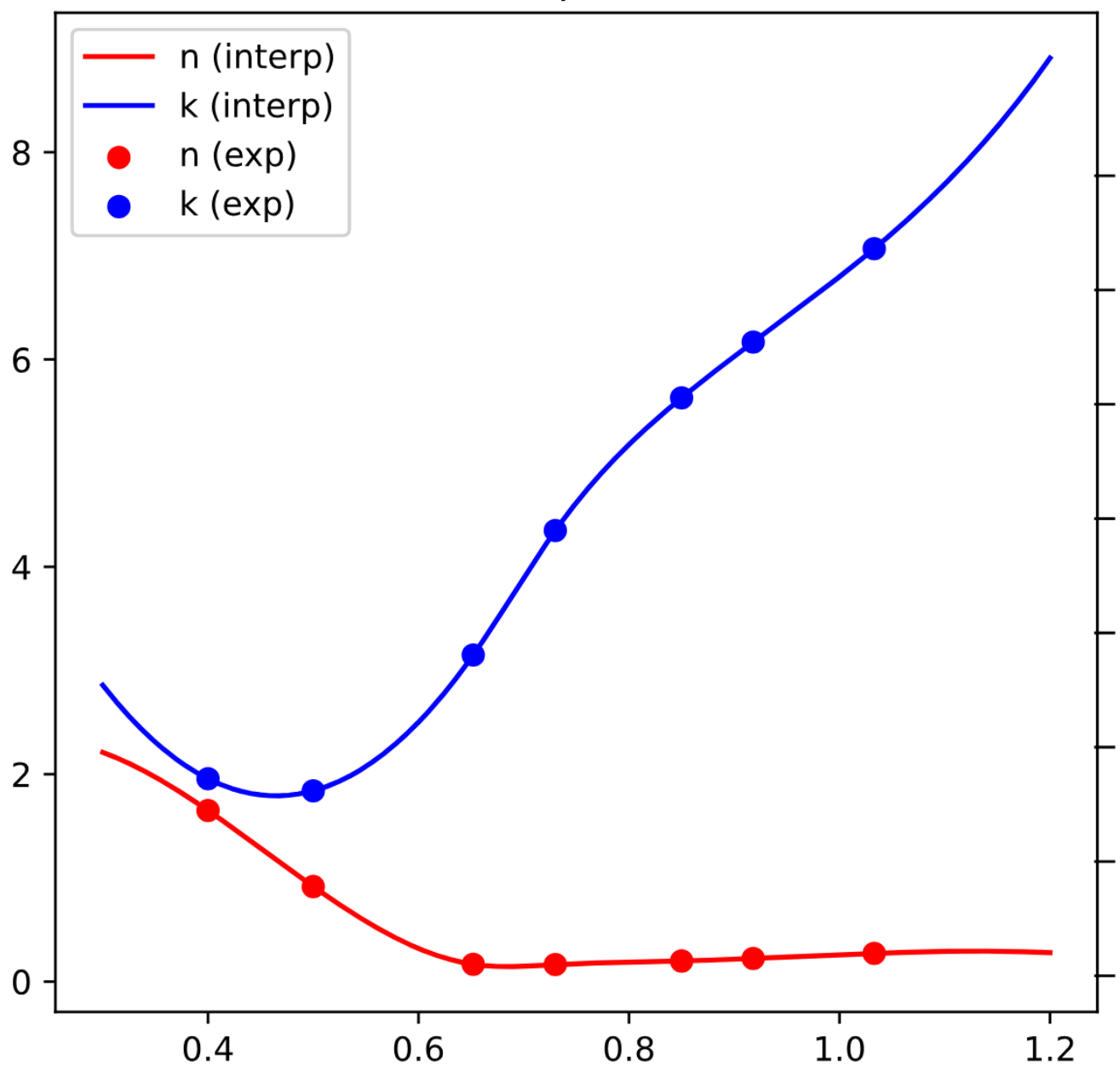
plt.tight_layout()
plt.show()

# Поиск резонансной длины волны (максимум поглощения)
res_au = wl_fine[np.argmax(alpha_au.imag)]
res_ag = wl_fine[np.argmax(alpha_ag.imag)]
print(f"Резонансная длина волны Au: {res_au:.3f} мкм")
print(f"Резонансная длина волны Ag: {res_ag:.3f} мкм")

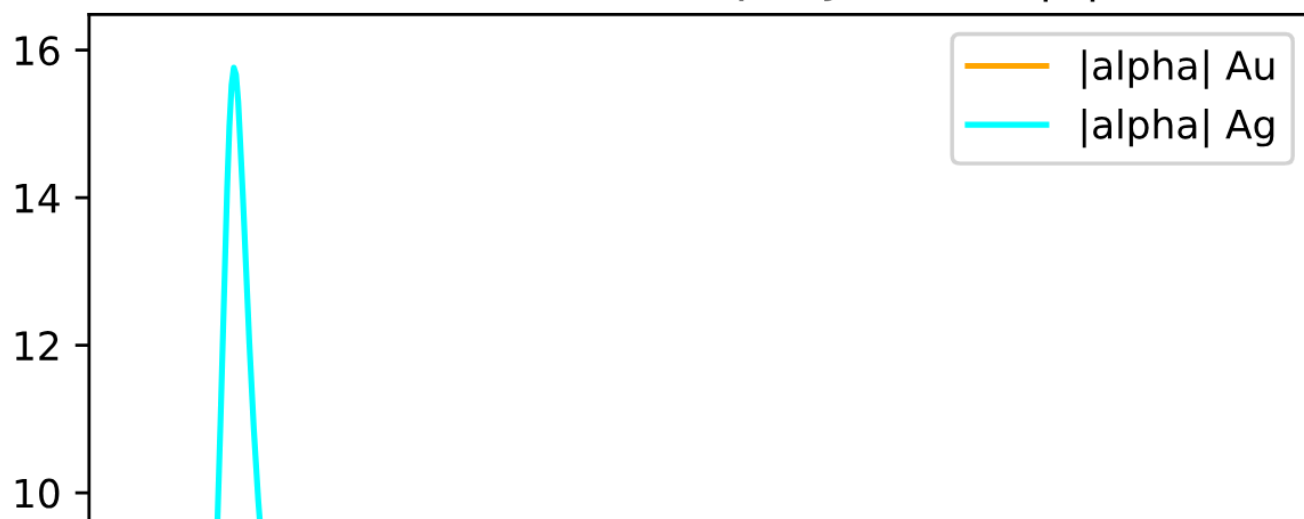
```

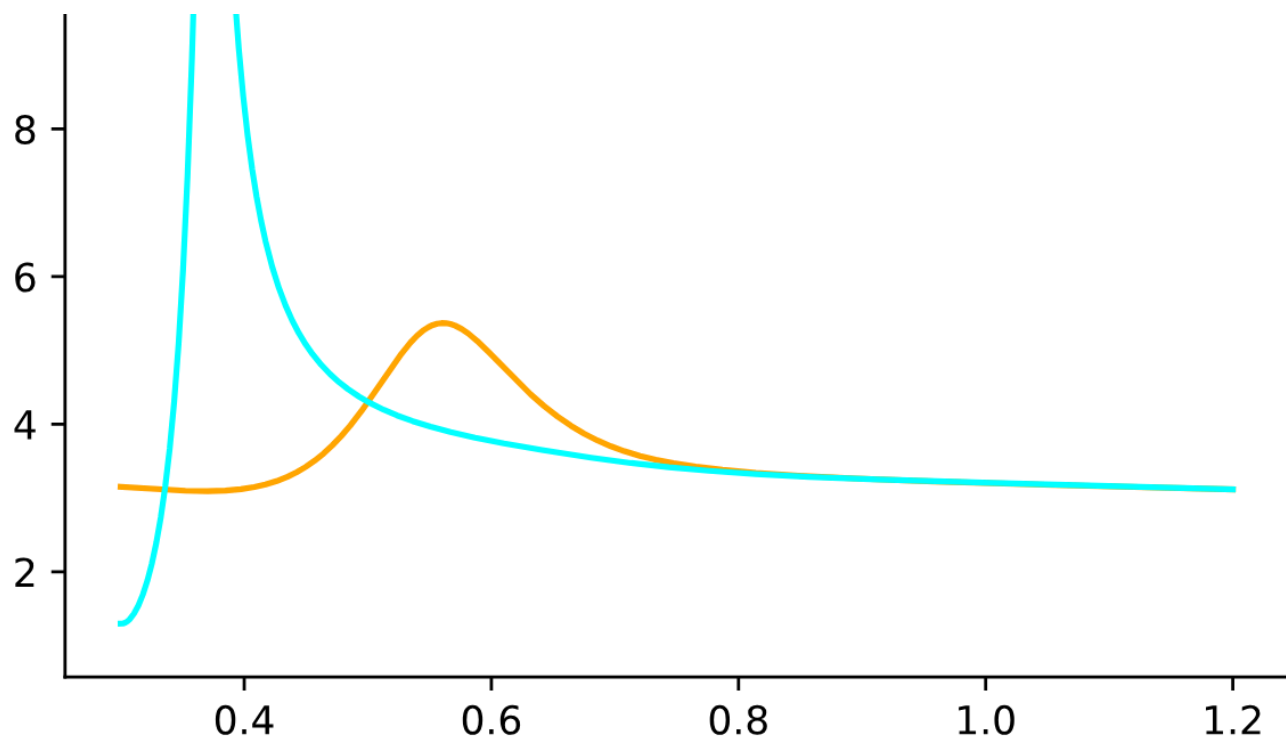
График

Показатель преломления Au

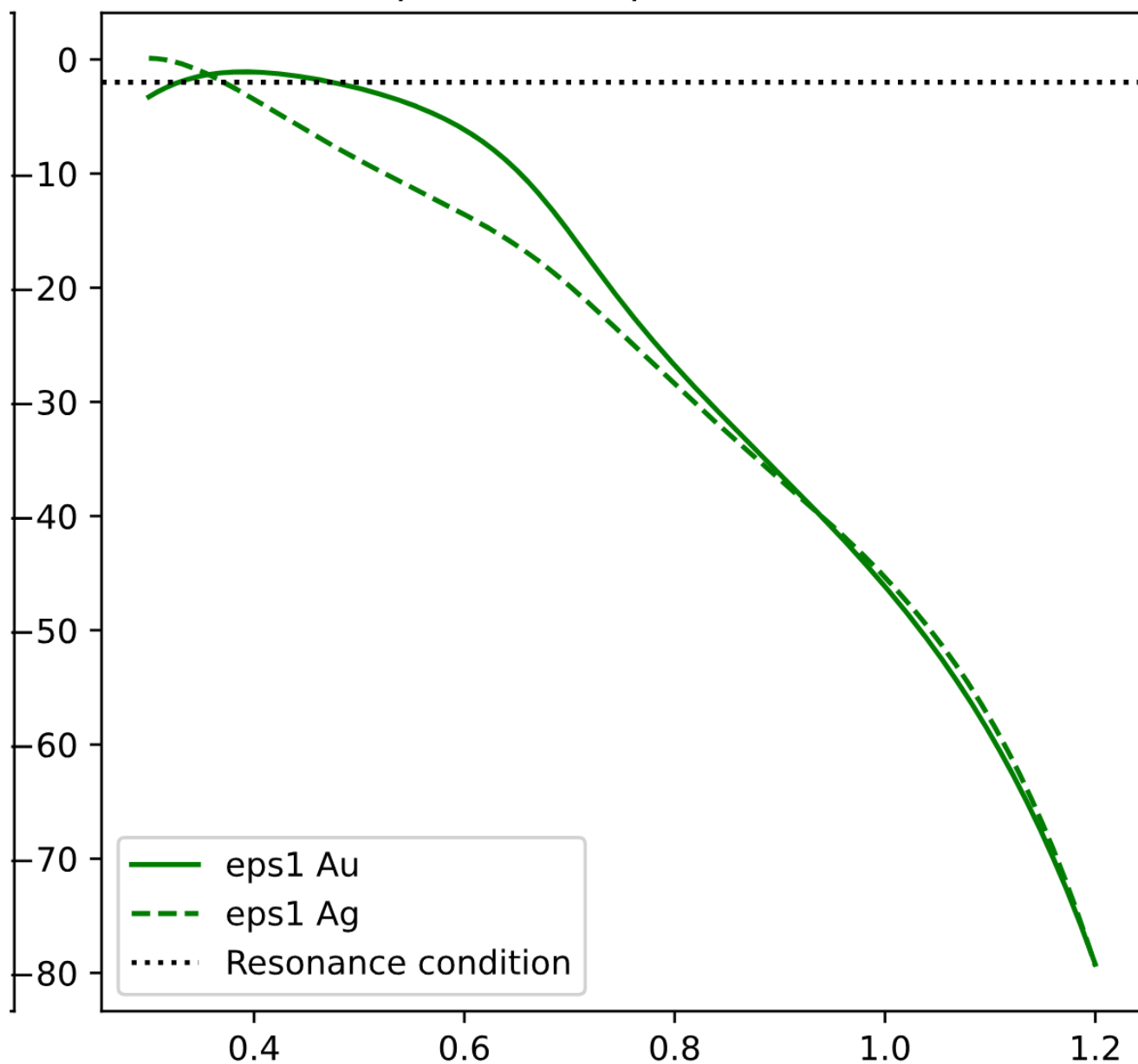


Абсолютная поляризуемость $|\alpha|$



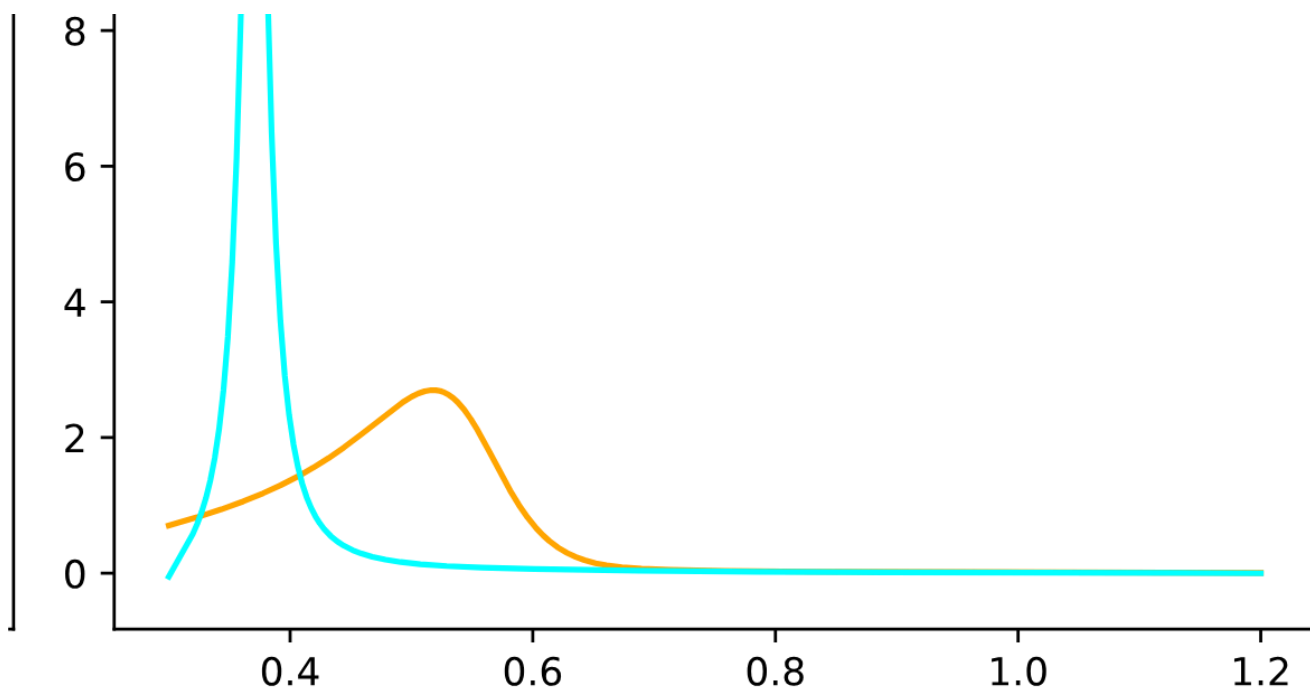


Диэлектрическая проницаемость (Re)



Мнимая часть поляризуемости $\text{Im}(\alpha)$





3. Анализ результатов

Поведение спектров за пределами экспериментальных данных ¹⁰

При экстраполяции (длины волн < 0.4 мкм или > 1.033 мкм) методы интерполяции (особенно полиномиальные или сплайновые) могут вести себя нефизично¹¹. Например, n может стать отрицательным. Физически в длинноволновой области металлы описываются **моделью Друде**, где ε_1 пропорционально $-\lambda^2$.

Сравнение золота и серебра:

- **Резонансная длина волны:** Для серебряной наночастицы в вакууме резонанс обычно наблюдается в ближнем ультрафиолете или на границе видимого диапазона ($\sim 0.35\text{--}0.42$ мкм). Для золота резонанс смещен в зелено-желтую область спектра (~ 0.52 мкм).
- **Интенсивность резонанса:** Серебро обладает более "чистым" резонансом с более высокой амплитудой поляризуемости α , так как мнимая часть диэлектрической проницаемости ε_2 (потери) у серебра в видимом диапазоне значительно ниже, чем у золота

Влияние среды

Если поместить частицы в среду с $\varepsilon_{ex} > 1$ (например, воду или стекло), условие $\varepsilon_1 = -2\varepsilon_{ex}$ будет выполняться при более отрицательных значениях ε_1 , что приведет к красному смещению резонансного пика для обоих металлов.