

П.М. ТОМЧУК, В.М. СТАРКОВ

Інститут фізики НАН України, відділ теоретичної фізики  
(Просп. Науки, 46, Київ 03680; e-mail: vjachnikstar@gmail.com)**ВПЛИВ ДИСПЕРСІЇ ФОРМ  
АНСАМБЛЮ МЕТАЛЕВИХ НАНОЧАСТИНОК  
НА ЇХ ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ**

УДК 534

*Теоретичну основу роботи становить положення, що при розмірах наночастинок, менших за довжину вільного пробігу електрона і несферичній їх формі, дисипативні процеси всередині наночастинок характеризуються тензорною величиною. Діагональні елементи цього тензора разом з коефіцієнтами деполяризації визначають півширини плазмових резонансів. На основі цього отримані усереднені характеристики з урахуванням впливу форми наночастинок як на коефіцієнти деполяризації, так і на компоненти тензора оптичної провідності. Запропоновано три оригінальних варіанти функцій, побудованих на основі спільного використання функцій Гауса і "шапочки", які задають розподіл наночастинок за формою.*

*Ключові слова:* наносистема, оптика, металеві наночастинок, усереднені характеристики.

**1. Вступ**

Характерною ознакою оптичних властивостей ансамблів металевих наночастинок є наявність в них плазмових резонансів. Кількість цих резонансів, їх положення на шкалі частот, а також їх декрементів згасання залежать від форми металевої наночастинок (див., наприклад, [1, 2]). Оскільки створити ансамбль абсолютно ідентичних наночастинок проблематично, то при експериментальному дослідженні процесів поглинання і розсіяння світла таким ансамблем мають справу, як правило, з ефективними (усередненими) оптичними характеристиками.

З процедурою усереднення оптичних характеристик ансамблю сфероїдальних металевих наночастинок можна познайомитись, наприклад, в [3, 4].

При вивченні впливу форми металевих наночастинок на їх оптичні властивості в попередніх роботах, опублікованих в науковій літературі, допускалось, що дисипативні процеси всередині нано-

частинок характеризуються скалярною високочастотною провідністю. Проте, нами було показано [2, 5, 6], що при розмірах наночастинок, менших за довжину вільного пробігу електрона і несферичній їх формі, оптична провідність замість скалярної стає тензорною величиною. Діагональні елементи цього тензора разом з коефіцієнтами деполяризації визначають півширини плазмових резонансів [2, 8].

У цій ситуації усереднення по формі наночастинок уже не зводиться до усереднення по коефіцієнтах деполяризації [3]. Тому в даній роботі послідовно і концентровано викладені отримані раніше теоретичні основи [2, 5, 6, 8] дослідження оптичних характеристик ансамблю металевих наночастинок еліпсоподібної форми, включаючи компоненти тензора оптичної провідності, компоненти тензора деполяризації та коефіцієнт поглинання. При цьому кожен етап досліджень ілюструється графічними залежностями.

На основі цього отримані усереднені характеристики з урахуванням впливу форми наночастинок

як на коефіцієнти деполаризації, так і на компоненти тензора оптичної провідності.

Вплив форми на провідність в процедурі усереднення враховано вперше.

## 2. Постановка задачі

Розглянемо ансамбль еліпсоподібних металевих наночастинок, що знаходяться в діелектричній матриці. Будемо вважати, що наночастинок мають однаковий об'єм, але дещо різні форми. Задача полягає в тому, щоб виявити на цій моделі, як дисперсія форм впливає на усереднені оптичні характеристики ансамблю (коефіцієнти поглинання і розсіяння світла ансамблем наночастинок). Для спрощення моделі і доведення задачі до кінця ми на певному етапі будемо вважати, що форма наночастинок має вигляд еліпсоїда обертання (сфероїда). В цьому випадку форма наночастинок характеризується єдиним параметром (ексцентриситетом або відношенням радіусів кривизни). Тому і функція розподілу наночастинок за формою буде залежати тільки від цього параметра.

Отже, нехай ансамбль металевих наночастинок опромінюється монохроматичною електромагнітною хвилею, електричне поле якої має вигляд:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}. \quad (1)$$

У формулі (1)  $\mathbf{E}_0$  – амплітуда електричного поля  $\omega$ ,  $\mathbf{k}$  – частота і хвильовий вектор; координати і час визначаються відповідно через  $\mathbf{r}$  і  $t$ .

Будемо вважати, що довжина електромагнітної хвилі ( $\lambda = 2\pi c/\omega$ ) значно більша характерних розмірів наночастинок ( $R_i$ ,  $R_i$  – радіус кривизни):

$$\lambda \gg \max \{R_i\} \quad (i = 1, 2, 3). \quad (2)$$

В цьому випадку електричне поле, індуковане всередині металевій частинки еліпсоїдальної форми зовнішнім полем хвилі (1), буде постійним і буде зв'язаним із зовнішнім полем  $\mathbf{E}_0$  співвідношенням [7, 8]:

$$E_{\text{in}}^i = \frac{E_0^j}{1 + L_j (\epsilon_{jj} - 1)}, \quad (3)$$

де  $L_j$  – головні значення компонент тензора деполаризації,  $\epsilon_{jj}$  – діагональні компоненти тензора діелектричної проникності, які в оптичному діапазоні для металевих частинок еліпсоїдальної форми

можна записати у формі [7, 8]:

$$\epsilon_{jj} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} + i \frac{4\pi}{\omega} \sigma_{jj}(\omega) \equiv \epsilon' + i \frac{4\pi}{\omega} \sigma_{jj}(\omega). \quad (4)$$

У формулі (4) введено такі позначення:  $\omega_p$  – плазмова частота ( $\omega_p = (4\pi n_0 e^2/m)^{1/2}$ ),  $e$  – заряд,  $m$  – маса,  $n_0$  – концентрація електронів.

У роботах [2, 5, 6] показано, що у випадку несферичної форми наночастинок і її розміри менші за довжину вільного пробігу електрона, оптична провідність із скалярної стає тензорною величиною.

У дипольному наближенні (2), коли внутрішнє поле в середині металевій частинки відомо і має вигляд (3), можна знайти вплив цього поля на функцію розподілу електронів за швидкостями. Як показано в [2, 5, 6] додаток до рівноважної функції розподілу Фермі, зумовлений впливом поля  $\mathbf{E}_{\text{in}}$ , має вигляд:

$$f_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = -e \mathbf{E}_{\text{in}} \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \left( \frac{1 - e^{-\tilde{\nu} t_0}}{\tilde{\nu}} \right). \quad (5)$$

У формулі (5)  $\tilde{\nu} \equiv \nu - i\omega$ , де  $\nu$  – частота зіткнень електронів в об'ємі наночастинок,  $t_0$  – характеристика лінеаризованого (по полю) кінетичного рівняння:

$$t_0 = \frac{1}{\vartheta'^2} \left\{ \mathbf{r}' \vartheta' + \sqrt{(R^2 - r'^2) \vartheta'^2 + \mathbf{r}' \vartheta'} \right\}. \quad (6)$$

Тут  $\mathbf{r}'$  і  $\mathbf{v}'$  – відповідно вектори координат і швидкості в деформованих системах координат, в яких еліпсоїд набуває форму сфери [2, 6]. Зв'язок деформованих і недеформованих компонент має простий вигляд:

$$\vartheta'_i = \frac{R_i}{R} \vartheta_i, \quad x'_i = \frac{R_i}{R} x_i, \quad (7)$$

де  $R$  – радіус кривизни еліпсоїда;  $R = (R_1 R_2 R_3)^{1/3}$ .

У виразі (5) не врахований внесок у поглинання вихрових струмів (магнітне поглинання). Цей механізм детально (з врахуванням розсіяння електронів як в об'ємі, так і на поверхні кластера) розглянуто в [2, 5]. У видимому діапазоні частот внесок магнітного поглинання малий в порівнянні з електричним поглинанням. Тому ми ним нехтуємо. Детальніше про магнітне поглинання можна ознайомитись, наприклад, в [9].

За допомогою функції розподілу знаходимо густину височастотного струму, який генерує зовнішнє поле (1) в середині наночастинки:

$$\mathbf{j} = \frac{2e}{(2\pi\hbar)^3} \int \boldsymbol{\vartheta} f_1(\mathbf{r}, \boldsymbol{\vartheta}) d^3(m\boldsymbol{\vartheta}). \quad (8)$$

Знаючи вектор густини струму  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ , легко із співвідношення

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{d}_0(t) = \int_V d^3r \mathbf{j}(\mathbf{r}, t), \quad (9)$$

знайти електричний дипольний момент  $\mathbf{d}_0$  металевої наночастинки. Оптичні характеристики металевих наночастинок і їх ансамблів, включаючи коефіцієнти поглинання і розсіяння ними світла, можна в загальному випадку виразити через відомі значення векторів  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  і  $\mathbf{d}_0$ .

Наприклад, коефіцієнт поглинання світла металевою частинкою об'єму  $V$ , що знаходиться в матриці з діелектричною сталою  $\epsilon_m$ , буде

$$K(\omega) = \frac{1}{2} \operatorname{Re} \int_V d\mathbf{r} (\mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}_m^*(\mathbf{r}, \omega)) / \left( \frac{c}{8\pi} \sqrt{\epsilon_m} |E^{(0)}|^2 \right). \quad (10)$$

Коефіцієнт поглинання ансамблем металевих наночастинок за умови, що можна нехтувати взаємодією наведених хвилю в різних наночастинках диполів (а це залежить від концентрації наночастинок), зводиться до суми внесків від поглинання окремих частинок.

Аналогічно можна визначити і переріз розсіяння. Зокрема середня за період інтенсивність випромінювання на відстані  $R_0$  (від наночастинки) в тілесний кут  $d\Omega$  генерованого електричним диполем буде [7]:

$$dW_s = \frac{c}{8\pi} |[\mathbf{E}' \times \mathbf{H}']| R_0^2 d\Omega = \frac{c}{8\pi} |\mathbf{H}'|^2 R_0^2 d\Omega. \quad (11)$$

В формулі (11)  $\mathbf{E}'$  і  $\mathbf{H}'$  – відповідно електрична і магнітна складові випромінювання диполем хвилі (при цьому  $\mathbf{E}' = \mathbf{H}'$ )

$$\mathbf{H}' = \frac{\omega^2}{c^2 R_0} (\mathbf{n} \times \mathbf{d}_0). \quad (12)$$

Орт  $\mathbf{n}$  визначає напрями спостереження.

Відношення (11) до інтенсивності опромінюючого потоку визначає переріз розсіяння.

Вище ми коротко описали схему отримання оптичних характеристик металевих наночастинок, починаючи від знаходження впливу електромагнітної хвилі на функцію розподілу електронів за швидкостями і закінчуючи виразами для коефіцієнта поглинання і перерізу розсіяння.

Більш детально з побудовою теорії поглинання і розсіяння світла металічними наночастинками еліпсоподібної форми можна познайомитись в роботах [2, 5, 6, 8].

### 3. Оптичні характеристики ансамблю металевих наночастинок еліпсоподібної форми

Нижче ми будемо розглядати ансамбль металевих наночастинок сферодальної форми (еліпсоїд обертання). Така форма є найпростішою серед асиметричних форм, оскільки ступінь асиметрії такої форми характеризується одним безрозмірним параметром – ексцентриситетом, або відношенням радіусів кривизни.

Нас буде цікавити, в першу чергу, вплив дисперсії форм наночастинок на їх оптичні характеристики (нагадаємо, що від форми залежать частоти плазмових резонансів і їх кількість). У зв'язку з цим будемо вважати для простоти, що маємо справу з набором наночастинок однакового об'єму ( $V$ ), але з різними ексцентриситетами ( $e_p$ ).

Коефіцієнт поглинання світла окремою сферодальною металевою наночастинкою можна отримати із (10), скориставшись виразом для поглинутої енергії такими наночастинками в [2]:

$$K(\omega) = \frac{4\pi}{3} V \frac{\epsilon_m^{3/4}}{c} \times \left\{ \frac{2\sigma_{\perp}}{[\epsilon_m + L_{\perp}(\epsilon' - \epsilon_m)]^2 + (4\pi L_{\perp} \sigma_{\perp} / \omega)^2} + \frac{\sigma_{\parallel}}{[\epsilon_m + L_{\parallel}(\epsilon' - \epsilon_m)]^2 + (4\pi L_{\parallel} \sigma_{\parallel} / \omega)^2} \right\}, \quad (13)$$

$\omega \in [\omega_1, \omega_2]$ .

В (13) вже приведено усереднення по орієнтації осі симетрії сфероїда.

Крім того, в (13) позначено через  $\sigma_{\perp}$  і  $\sigma_{\parallel}$  – компоненти тензора оптичної провідності.

У системі координат з віссю  $OZ$  вздовж осі симетрії сфероїда діагональні компоненти тензора оптичної провідності мають вигляд:

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} \equiv \sigma_{\perp}; \quad \sigma_{zz} \equiv \sigma_{\parallel}. \quad (14)$$

Аналогічно:

$$L_x = L_y \equiv L_{\perp}; \quad L_z = L_{\parallel}. \quad (15)$$

Головні значення компонент тензора деполаризації більш конкретно

$$L_x = L_y = \frac{1}{2}(1 - L_z) \equiv L_{\perp}; \quad L_{\perp} = \frac{1}{2}(1 - L_{\parallel});$$

$$L_z \equiv L_{\parallel} = \begin{cases} \frac{1 - e_p^2}{2e_p^3} \left[ \ln \left( \frac{1 + e_p}{1 - e_p} \right) - 2e_p \right], \\ \text{при } R_{\parallel} > R_{\perp}, \\ \frac{1 + e_p^2}{e_p^3} (e_p - \arctan e_p), \\ \text{при } R_{\parallel} < R_{\perp}, \end{cases} \quad (16)$$

де  $e_p^2 \equiv \left| 1 - R_{\perp}^2/R_{\parallel}^2 \right|$ ;  $R_{\perp}$  і  $R_{\parallel}$  – півосі сфероїда.

В роботах [2, 5] було показано, що у випадку не-сферичної металевої наночастинок, меншої за розмірами довжини вільного пробігу електрона, оптична провідність на відміну від сферичної форми стає тензорною величиною. Компоненти цього тензора для еліпсоподібних наночастинок у загальному випадку і в різних граничних випадках досліджено в [2, 5].

Нас буде цікавити вигляд відмінних від нуля компонент тензора оптичної провідності для сфероїдальної форми ( $\sigma_{\perp}$  і  $\sigma_{\parallel}$ ). Ми обмежимося випадком, коли вплив форми на компоненти тензора оптичної провідності максимальний. А така ситуація має місце при домінуючій ролі поверхневого розсіяння електронів. Вираз (5) враховує як об'ємне розсіяння електронів (через параметр  $\nu$ ), так і поверхневе розсіяння (через характеристику  $t_0$ ). Формально чисто поверхневі розсіяння електронів отримуємо при  $\nu \rightarrow 0$ , а фактично мається на увазі нерівність  $\nu \ll v_F/R$  (тобто об'ємна частота зіткнень мала в порівнянні з прольотною частотою електрона від стінки до стінки). Деталі обчислення (8) див. в [2, 5]:

$$\sigma_{\perp} = \frac{3\sigma_0}{16} \times$$

$$\times \begin{cases} \frac{(1 - e_p^2)^{1/3}}{e_p^3} [e_p (1 + 2e_p^2) - (1 - 4e_p^2) \times \\ \times (1 - e_p^2)^{-1/2} \arcsin e_p] \text{ при } R_{\perp} < R_{\parallel}, \\ \frac{(1 + e_p^2)^{1/3}}{e_p^3} [-e_p (1 - 2e_p^2) + (1 + 4e_p^2) \times \\ \times (1 + e_p^2)^{-1/2} \ln(e_p + \sqrt{1 + e_p^2})] \text{ при } R_{\perp} > R_{\parallel}, \end{cases} \quad (17)$$

$$\sigma_{\parallel} = \frac{3\sigma_0}{8} \times$$

$$\times \begin{cases} \frac{(1 - e_p^2)^{1/3}}{e_p^3} [-e_p (1 - 2e_p^2) + (1 - e_p^2)^{-1/2} \times \\ \times \arcsin e_p] \text{ при } R_{\perp} < R_{\parallel}, \\ \frac{(1 + e_p^2)^{1/3}}{e_p^3} [e_p (1 + 2e_p^2) - (1 + e_p^2)^{-1/2} \times \\ \times \ln(e_p + \sqrt{1 + e_p^2})] \text{ при } R_{\perp} > R_{\parallel}, \end{cases} \quad (18)$$

$$\nu_s = v_F/2R. \quad (19)$$

У (17), (18)  $\nu_s$  – прольотна частота електрона (від стінки до стінки) в сферичній частинці, рівній по об'єму еліпсоподібній,  $v_F$  – швидкість Фермі,  $R$  – радіус. Крім того, в цих формулах маємо відомий результат для сферичних наночастинок (при  $e_p \rightarrow 0$ ):

$$\sigma_0 = \frac{3n_0e^2}{2m\omega^2} \nu_s = \frac{n_0e^2}{m\omega^2} \left( \frac{3}{4} \frac{v_F}{R} \right). \quad (20)$$

У формулах (17) і (18) ми опустили осциляційні (по частоті) члени, що пов'язані з резонансом частоти зовнішньої електромагнітної хвилі з прольотною частотою. У видимім діапазоні такий резонанс не істотний (детальніше див. у [10, 11]).

Як бачимо із (16) і (17), (18), від форми залежать (через ексцентриситет) не тільки головні значення компонент тензора деполаризації, а й головні значення тензора оптичної провідності. Тому, при усередненні по дисперсії форм потрібно враховувати обидві залежності.

Як уже було сказано вище, вираз (13) дає значення коефіцієнта поглинання сфероїдальною металічною наночастиною об'ємом  $V$  і довільної форми (залежно від  $e_p$  або  $\rho_e$ ). Також у виразі (13) вже враховано усереднення по орієнтаціях осей симетрії сфероїда. Оскільки між ексцентриситетом

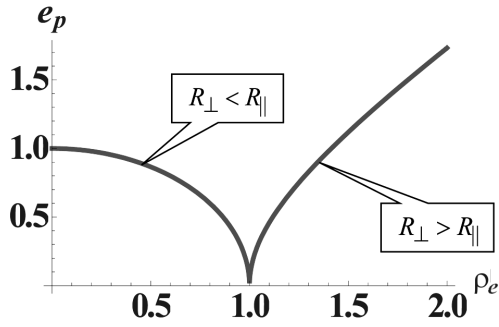


Рис. 1. Крива залежності ексцентриситету  $e_p = \sqrt{|1 - \rho_e^2|}$  від параметра  $\rho_e = R_{\perp}/R_{\parallel}$

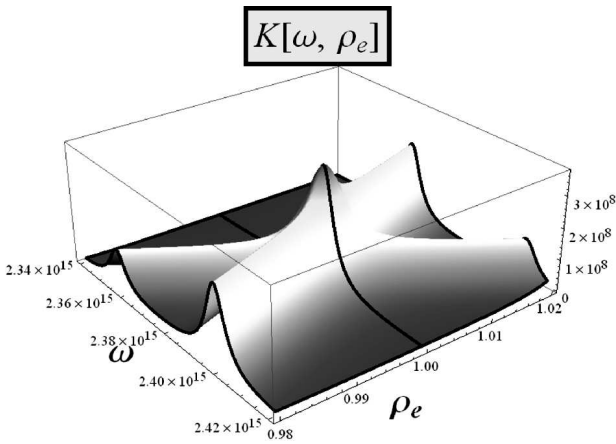


Рис. 2. Залежність коефіцієнта поглинання світла  $K(\omega, \rho_e)$  сфероїдальною металевою наночастиною від її форми (через параметр  $\rho_e$ ) і частоти світла  $\omega$

$e_p = \sqrt{|1 - R_{\perp}^2/R_{\parallel}^2|}$  і відношенням радіусів кривизни, як бачимо із рис. 1, не має взаємно однозначної відповідності, то надалі нам буде зручніше усереднювати оптичні характеристики по параметру  $\rho_e = R_{\perp}/R_{\parallel}$ , а вираз (13) для коефіцієнта  $K(\omega)$  поглинання світла сфероїдальною металевою наночастиною використовувати у вигляді

$$K(\omega, \rho_e) = \frac{4\pi\epsilon_m^{3/2}}{3c} \left\{ 2\sigma_{\perp}(\omega, \rho_e) / \left\{ [\epsilon_m + L_{\perp}(\rho_e)(\epsilon' - \epsilon_m)]^2 + (4\pi L_{\perp}(\rho_e)\sigma_{\perp}(\omega, \rho_e)/\omega)^2 \right\} + \sigma_{\parallel}(\omega, \rho_e) / \left\{ [\epsilon_m + L_{\parallel}(\rho_e)(\epsilon' - \epsilon_m)]^2 + (4\pi L_{\parallel}(\rho_e)\sigma_{\parallel}(\omega, \rho_e)/\omega)^2 \right\} \right\},$$

$$\omega \in [\omega_1\omega_2], \rho_e \in [0, \infty). \quad (21)$$

Тут  $K(\omega, \rho_e) = K(\omega)/V$ .

На рис. 2 подана залежність  $K(\omega, \rho_e)$  від форми і частоти світла. Два хребта на поверхні (рис. 2) відповідають двом плазмовим резонансам, які при  $\rho_e = 1$  перетинаються і відповідають в цій точці плазмовому резонансу сфероїдальної наночастинок.

Функцію розподілу металевих наночастинок за формою прийемо у вигляді:

$$\Phi(\rho_e) = N P(\rho_e),$$

де  $N$  – концентрація наночастинок, а  $P(\rho_e)$  – нормована на одиницю ймовірність того, що серед ансамблю із  $N$  наночастинок присутня наночастинка з формою, яка характеризується параметром  $\rho_e$  (надалі опустимо індекс  $e$ ), так що

$$\int_0^{\infty} P(\rho) d\rho = 1,$$

а ефективне значення коефіцієнта сумарного поглинання буде:

$$\overline{K(\omega)} = \int_0^{\infty} K(\omega, \rho) P(\rho) d\rho. \quad (22)$$

#### 4. Вибір вигляду функції $P(\rho)$

Функцію  $P(\rho)$ , яка задає ймовірність наночастинок в одиниці об'єму з даними значеннями  $\rho \in [0, \infty)$ , можна трактувати як щільність ймовірності функції  $K(\omega, \rho)$ , а функцію  $\overline{K(\omega)}$  – як усереднення по формі коефіцієнта сумарного поглинання ансамблю наночастинок.

В ролі першого кроку побудови  $P(\rho)$  розглянемо нормальний закон розподілу (закон Гауса), який одержав саме широке застосування при вирішенні практичних задач. За цим законом щільність ймовірності нормально розподіленої випадкової величини виражається формулою:

$$P_g(x) = \frac{1}{\sigma_g \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x - a_g)^2}{2\sigma_g^2}\right), \quad (23)$$

$$x \in (-\infty, +\infty),$$

де  $a_g$  і  $\sigma_g$  – математичне сподівання та середнє квадратичне відхилення випадкової величини відповідно. Тут важливо відзначити, що областю визначення функції Гауса (23) є вся числова вісь:

$x \in (-\infty, +\infty)$ . У той самий час область визначення шуканої функції  $P(\rho)$  – права піввісь:  $\rho \in [0, \infty)$ . Тому для адекватного обліку наявності в ансамблі “поперечних” наночастинок таких, що  $R_{\perp} \geq R_{\parallel} \rightarrow 0$  виправдане використання в області  $\rho \in (a, \infty)$  функції Гауса:

$$P_1(\rho) = \alpha_1 \exp[-\beta_1(\rho - a)^2], \quad \rho \in (a, \infty), \quad a \geq 0. \quad (24)$$

Другим кроком побудови  $P(\rho)$  є вибір вигляду функції  $P_0(\rho)$  з областю визначення  $\rho \in [0, a]$ , в якій переважний вплив на усереднення  $K(\omega, \rho)$  надають “поздовжні” наночастинок:  $R_{\parallel} \geq R_{\perp} \rightarrow 0$ . Конкретно будемо вважати, що вираз  $P_0(\rho)$  відповідає трьом вимогам загального характеру:

1. Безперервність в точці  $\rho = a$ :  $P_0(a) = P_1(a)$ .
2. Досить високий рівень гладкості:  $P_0(\rho) \in C^{(m)}(0, a)$ ,  $m \geq 2$ , оскільки функція Гауса нескінченно диференційована.
3. Умова  $P_0(0) = 0$  за аналогією  $P_1(\rho)$ , коли  $\lim_{\rho \rightarrow \infty} P_1(\rho) = 0$ .

Перерахованим вимогам задовольняє функція “шапочка” [13]:

$$P_{\gamma}(x) = \begin{cases} C_{\gamma} \exp[-\gamma^2/(\gamma^2 - x^2)], & |x| < \gamma, \\ 0, & |x| \geq \gamma, \end{cases} \quad (25)$$

де стала  $C_{\gamma}$  вибирається так, щоб  $\int \omega_{\gamma}(x) dx = 1$ , тобто

$$C_{\gamma} = \left( 2\gamma \int_0^1 \exp[-(1 - \xi^2)^{-1}] d\xi \right)^{-1}.$$

Ця функція нескінченно диференційована ( $P_{\gamma}(x) \in C^{(\infty)}(-\gamma, \gamma)$ ), проте на відміну від функції Гауса, її носій є конечним ( $\text{supp } P_{\gamma}(x) = (-\gamma, \gamma)$ ), тобто вона фінітна. Ці властивості роблять її вельми привабливою при вирішенні багатьох конкретних задач [14]. Як приклад спільного використання функцій Гауса (24) і “шапочки” (25) побудуємо функцію

$$P_1(\rho) = P_{01}(\rho) + P_{11}(\rho), \quad (26)$$

де

$$P_{01}(\rho) = \begin{cases} 0,771606 \exp[-(\rho - 1)^2/(1 - (\rho - 1)^2)], & \rho \in [0, 1], \\ 0, & \rho \notin [0, 1], \end{cases} \quad (27)$$

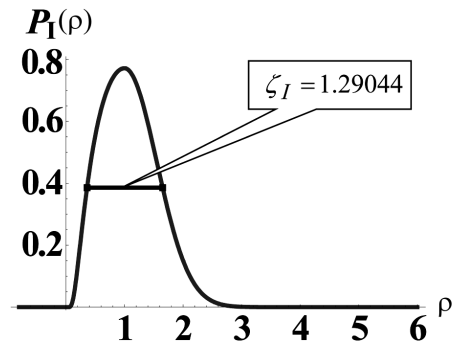


Рис. 3. Приклад вигляду функції  $P_I(\rho)$  як комбінації функції “шапочка” (27) на відрізку  $[0, 1]$  і функції Гауса (28) на піввісі  $(1, +\infty)$ . Напівширина цієї функції  $\zeta_I = 1,29044$

$$P_{11}(\rho) = \begin{cases} 0,771606 \exp[-1,63754(\rho - 1)^2], & \rho \in (1, +\infty), \\ 0, & \rho \in (-\infty, 1]. \end{cases} \quad (28)$$

Відзначимо, що запропонований варіант вибору вигляду функції  $P(\rho)$  побудований на основі евристичного принципу, застосування якого суттєво спрощує вирішення досить складної проблеми впливу дисперсії форм металевих наночастинок на сумарний коефіцієнт поглинання. Зрозуміло, що застосування евристики аж ніяк не гарантує оптимальність потрібного варіанта вигляду функції  $P(\rho)$ . Більш того, в дійсності такий прийом взагалі не гарантує досягнення кількісного збігу очікуваного результату. Тим не менш, апріорі можна стверджувати, що цінність спільного використання функцій Гауса (24) і “шапочки” (25) полягає в тому, що запропоновано рішення, яке виявляється оптимальним при теоретичному дослідженні якісної картини усереднення по дисперсії форм. Аргументом на користь такого варіанта вибору можуть служити гістограми розподілів наночастинок за розмірами [15]. Необхідною умовою одержання адекватних кількісних результатів вирішення проблеми є наявність експериментальних даних вимірювання ефективного значення коефіцієнта  $\overline{K}(\omega)$  сумарного поглинання. Знання експериментального значення дозволяє трактувати співвідношення (22), записане у вигляді

$$\int_0^{\infty} K(\omega, \rho) P(\rho) d\rho = \overline{K}(\omega),$$

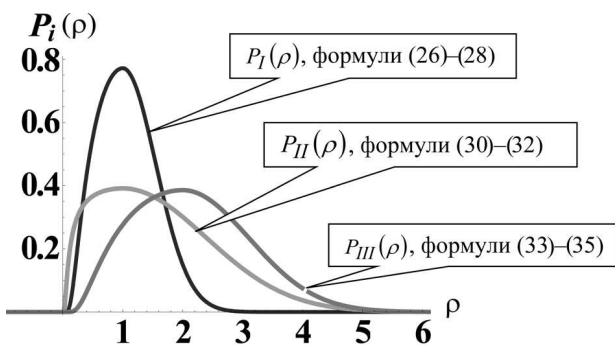


Рис. 4. Графіки функцій ймовірності  $P_i(\rho)$  наявності в ансамблі наночастинок певної форми

як інтегральне рівняння Фредгольма першого роду, в якому  $K(\omega, \rho)$  й  $\overline{K(\omega)}$  відомі, а  $P(\rho)$  – шукана функція. Рішення рівняння Фредгольма першого роду являє собою досить складну задачу, оскільки вона є некоректно поставленою за Адамаром [12]. Коротко можна сказати, що задачу поставлено коректно, якщо вона має рішення, її рішення єдино і неперервно залежить від вхідних даних. У випадку, коли не виконується одна із цих умов, задача є некоректно поставленою, або просто некоректною. Треба мати на увазі, що для коректно поставленої задачі малі помилки вихідних даних не мають істотного значення, оскільки їх вплив на рішення завдання незначно. Зовсім інша ситуація виникає за наявності малих помилок у вихідних даних для некоректно поставленої задачі – її рішення дуже чутливо до похибки. У практиці оптичних експериментальних досліджень найчастіше мова йде про невиконання третьої умови. При її аналізі можна зробити такий висновок: “Незначним змінам вхідних даних  $K(\omega, \rho)$  або  $\overline{K(\omega)}$  можуть відповідати як завгодно великі зміни даних на виході  $P(\rho)$ ”. Основним методом дослідження інтегрального рівняння першого роду є метод регуляризації. Докладний приклад його реалізації розглянуто в роботі [14].

### 5. Результати обчислювального експерименту та їх інтерпретація

При виконанні обчислювальних експериментів в ролі вихідних даних використовувалися такі значення:

$$\omega_p = 1,37 \cdot 10^{16} \text{ c}^{-1}; \quad v = 3,39 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1};$$

$$R = 2,0 \cdot 10^{-6} \text{ см}; \quad c = 3,0 \cdot 10^{10} \text{ см} \cdot \text{c}^{-1};$$

$$v_F = 1,39 \cdot 10^8 \text{ см} \cdot \text{c}^{-1}; \quad n = 10^{22};$$

$$m = 10^{-27} \text{ г}; \quad \epsilon_m = 16.$$

В ролі першого результату проведених обчислень слід привести тривимірну картину коефіцієнта поглинання  $K(\omega, \rho)$  сфероїдальною металічною наночастиною довільної форми в залежності від  $\omega \in [8 \cdot 10^{14}, 8 \cdot 10^{15}]$  та  $\rho \in [0, 10]$ . Фрагмент цієї картини в околі сферичної наночастинок наведено на рис. 2. Попередньо були отримані розрахункові формули для обчислення компонент тензора оптичної провідності для сфероїдальної форми  $\sigma_{\perp}(\omega, \rho)$  і  $\sigma_{\parallel}(\omega, \rho)$  та головні значення компонент тензора деполаризації  $L_{\perp}$  і  $L_{\parallel}$ .

Основним результатом обчислювального експерименту є шукані ефективні значення коефіцієнтів сумарного поглинання:

$$\overline{K_i(\omega)} = \int_0^{\infty} K(\omega, \rho) P_i(\rho) d\rho, \quad (29)$$

для різних функцій  $P_i(\rho)$  ( $i = I, II, III$ ), що визначають ймовірність наявності в ансамблі наночастинок конкретної форми. Графіки функцій  $P_i(\rho)$  показано на рис. 4, а конкретні вирази для  $P_{II}(\rho)$  і  $P_{III}(\rho)$  визначені формулами:

$$P_{II}(\rho) = P_{0II}(\rho) + P_{1II}(\rho), \quad (30)$$

$$P_{0II}(\rho) =$$

$$= \begin{cases} 0,391277 \exp\{-0,097151[1 + (\rho - 1)^2]/[1 - (\rho - 1)^2]\}, & \rho \in (0, 1], \\ 0, & \rho \notin (0, 1], \end{cases} \quad (31)$$

$$P_{1II}(\rho) =$$

$$= \begin{cases} 0,391277 \exp[-1,63754(\rho - 1)^2], & \rho \in (1, +\infty), \\ 0, & \rho \in (-\infty, 1]. \end{cases} \quad (32)$$

$$P_{III}(\rho) = P_{0III}(\rho) + P_{1III}(\rho), \quad (33)$$

$$P_{0III}(\rho) =$$

$$= \begin{cases} 0,385803 \exp[-(\rho - 2)^2/(4 - (\rho - 2)^2)], & \rho \in [0, 2], \\ 0, & \rho \notin (0, 2], \end{cases} \quad (34)$$

$$P_{1III}(\rho) =$$

$$= \begin{cases} 0,385803 \exp[-0,409384(\rho - 2)^2], & \rho \in (2, +\infty), \\ 0, & \rho \in (-\infty, 2]. \end{cases} \quad (35)$$

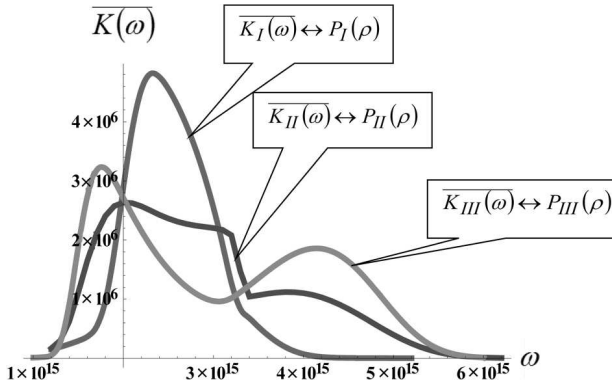


Рис. 5. Графіки усереднених значень коефіцієнтів сумарного поглинання (нормованих на  $N$  – концентрацію наночастинок)  $K_i(\omega)$  ( $i = I, II, III$ )

На рис. 5 наведені графіки ефективних значень коефіцієнтів сумарного поглинання  $K_i(\omega)$  ( $i = I, II, III$ ), які корелюють з функціями  $P_i(\rho)$  згідно з (29).

Оскільки від форми наночастинок залежать як головні значення компонента тензора деполаризації  $L_{\perp}$  і  $L_{\parallel}$ , так й головні значення тензора оптичної провідності  $\sigma_{\perp}$  і  $\sigma_{\parallel}$ , тому, при усередненні коефіцієнта поглинання  $K(\omega, \rho)$  по дисперсії форм має сенс, на наш погляд, у візуалізації залежностей  $\bar{\sigma}_{\perp}(\rho) = \sigma_{\perp}(\omega_0, \rho)/\sigma_0(\omega_0)$  і  $\bar{\sigma}_{\parallel}(\rho) = \sigma_{\parallel}(\omega_0, \rho)/\sigma_0(\omega_0)$  (рис. 6).

Зіставляючи картину розподілу значень коефіцієнта поглинання світла сфероїдальною металевою наночастиною від форми  $\rho_e$  і частоти світла  $\omega$  на рис. 2 з графіками середніх значень коефіцієнтів сумарного поглинання  $K_i(\omega)$  на рис. 5, приходимо до висновку, що ці значення відрізняються приблизно на два порядки. Воно носить риси досить загального характеру. Для більш конкретних висновків розглянемо докладніше графіки функцій  $K_i(\omega)$  (рис. 5). Виникає просте запитання: чому графіки мають такий саме характер залежності від частоти світла  $\omega$ . Для відповіді на це питання введемо в розгляд дві функції  $K_{\perp}^{(max)}(\rho)$  і  $K_{\parallel}^{(max)}(\rho)$ , які відповідають першій і другій складовій в (21) і являють собою проєкції максимальних значень ортогональної і паралельної складових коефіцієнта  $K(\omega, \rho)$  поглинання світла сфероїдальною металевою наночастиною на площину  $(K, \rho)$  (рис. 7). Іншими словами,  $K_{\perp}^{(max)}(\rho)$  і  $K_{\parallel}^{(max)}(\rho)$  це проєкції на площину  $(K, \rho)$  відповід-

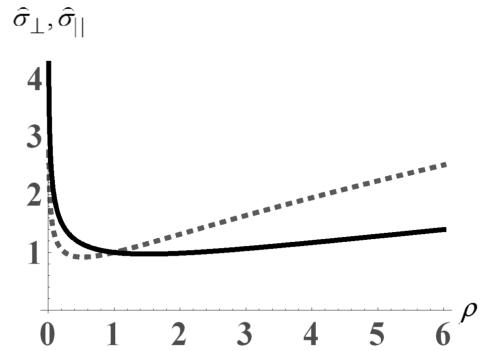


Рис. 6. Криві поперечного (суцільна лінія) та поздовжнього (штрихова лінія) значення тензора оптичної провідності

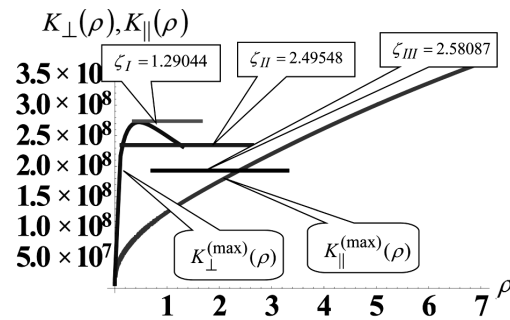


Рис. 7. Графіки функцій  $K_{\perp}^{(max)}(\rho)$  і  $K_{\parallel}^{(max)}(\rho)$  – проєкцій максимальних значень ортогональної і паралельної складових коефіцієнта  $K(\omega, \rho)$  поглинання світла сфероїдальною металевою наночастиною на площину  $(K, \rho)$ , а також відрізки напівширин функцій  $P_i(\rho)$  ( $i = I, II, III$ )

них хребтів на поверхні (рис. 2), які відповідають двом плазмовим резонансам і визначаються такими виразами:

$$K_{\perp, \parallel}^{(max)}(\rho) = \frac{\chi_{\perp, \parallel} \omega_p^2}{[\epsilon_m + L_{\perp, \parallel}(\rho)(1 - \epsilon_m)] L_{\perp, \parallel}(\rho) \sigma_{\perp, \parallel}(\omega_{\perp, \parallel}, \rho)}, \quad (36)$$

де

$$\chi_{\parallel} = \frac{\epsilon_m^{3/2}}{12\pi c}, \quad \chi_{\perp} = 2\chi_{\parallel},$$

$$\omega_{\perp, \parallel}^2(\rho) = \frac{L_{\perp, \parallel}(\rho)\omega_p^2}{\epsilon_m + L_{\perp, \parallel}(\rho)(1 - \epsilon_m)}$$

– частоти плазмових резонансів [1].

Формула (36) є досить простим наслідком модифікованого представлення (21) для коефіцієнта  $K(\omega, \rho)$ , тобто

$$K(\omega, \rho) \equiv K_{\perp}(\omega, \rho) + K_{\parallel}(\omega, \rho),$$



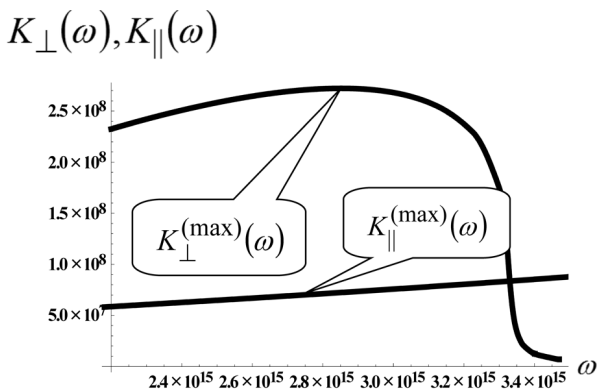


Рис. 8. Графіки функцій  $K_{\perp}^{(\max)}(\omega)$  і  $K_{\parallel}^{(\max)}(\omega)$  – проєкцій максимальних значень ортогональної і паралельної складових коефіцієнта  $K(\omega, \rho)$  поглинання світла сфероїдальною металевою наночастинкою на площину  $(K, \omega)$ ,  $\omega \in (2,2 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}, 3,47 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1})$

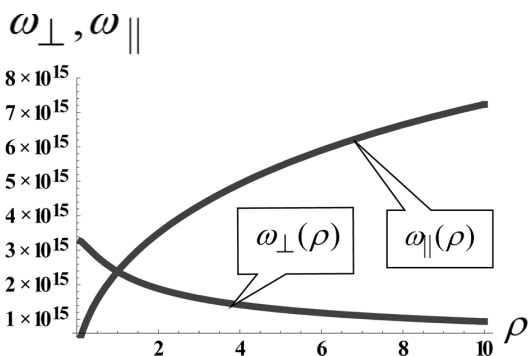


Рис. 9. Графіки функцій  $\omega_{\perp}(\rho)$  і  $\omega_{\parallel}(\rho)$  – ортогональної і паралельної резонансних частот

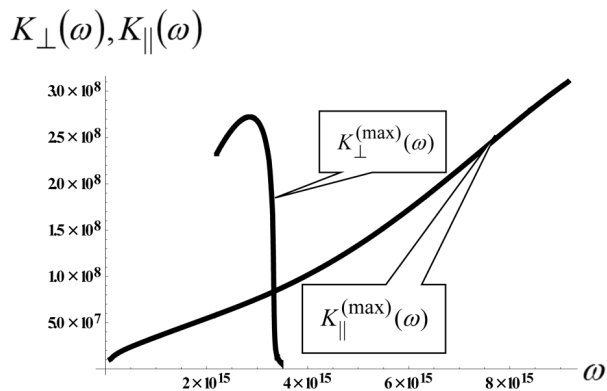


Рис. 10. Графіки функцій  $K_{\perp}^{(\max)}(\omega)$  і  $K_{\parallel}^{(\max)}(\omega)$  – проєкцій максимальних значень ортогональної і паралельної складових коефіцієнта  $K(\omega, \rho)$  поглинання світла сфероїдальною металевою наночастинкою,  $\omega \in (10^{14} \text{ c}^{-1}, 9,2 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1})$

$$K_{\perp}(\omega, \rho) = \frac{4\pi \epsilon_m^{3/2}}{3c} \times \frac{2\omega^4 \sigma_{\perp}(\omega, \rho) / g_{\perp}^2(\rho)}{(\omega^2 - \omega_{\perp}^2)^2 + [4\pi L_{\perp}(\rho) \sigma_{\perp}(\omega, \rho) / g_{\perp}(\rho)]^2 \omega^2},$$

$$K_{\parallel}(\omega, \rho) = \frac{4\pi \epsilon_m^{3/2}}{3c} \times \frac{\omega^4 \sigma_{\parallel}(\omega, \rho) / g_{\parallel}^2(\rho)}{(\omega^2 - \omega_{\parallel}^2)^2 + [4\pi L_{\parallel}(\rho) \sigma_{\parallel}(\omega, \rho) / g_{\parallel}(\rho)]^2 \omega^2},$$

$$g_{\perp, \parallel}(\rho) \equiv \epsilon_m + L_{\perp, \parallel}(\rho) (1 - \epsilon_m),$$

$$K_{\perp, \parallel}^{(\max)}(\rho) = K_{\perp, \parallel}(\omega_{\perp, \parallel}(\rho), \rho).$$

На тому самому рисунку (рис. 7) помічені три відрізки – напівширини функцій  $P_i(\rho)$ , при цьому координати меж інтервалів (по осі абсцис) повністю відповідають розрахунковим величинам:

$$\rho_a^{(\zeta_I)} = 0,360169; \quad \rho_b^{(\zeta_I)} = 1,65060;$$

$$\rho_a^{(\zeta_{II})} = 0,131587; \quad \rho_b^{(\zeta_{II})} = 2,62707;$$

$$\rho_a^{(\zeta_{III})} = 0,720338; \quad \rho_b^{(\zeta_{III})} = 3,301210.$$

Тут  $\rho_a^{(\zeta_i)}$  і  $\rho_b^{(\zeta_i)}$  – початкові та кінцеві точки відрізків  $\zeta_i$  ( $i = I, II, III$ ).

За ординату ці відрізки розташовані умовно, для зручності аналізу отриманих результатів. Перше, що привертає увагу на рис. 7, 8, 10, це мала область визначення ортогональної компоненти (хребта) коефіцієнта  $K_{\perp}(\omega, \rho)$  поглинання світла. Дійсно, з розрахунків випливає, що функція  $K_{\perp}^{(\max)}(\rho)$  визначена на інтервалі  $\rho \in (0, 1,414)$  (рис. 7), а область визначення функції  $K_{\perp}^{(\max)}(\omega)$  – це інтервал  $\omega \in (2,138 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}, 3,47 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1})$  (рис. 8, 10). З іншого боку, якщо звернутися до вираження залежності частоти плазмових резонансів від форми наночастинки і провести обчислення, то отримаємо, що область значень поперечної резонансної частоти  $\omega_{\perp}(\rho)$  обмежена такими величинами:  $\omega_{\perp}(0) = 3,3227 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$  і  $\omega_{\perp}(1,41401) = 2,138 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$  (рис. 9). Ми умовно називаємо плазмові коливання в напрямку, перпендикулярному до осі сфероїда, “поперечними” резонансами і відповідно до поздовжніх коливань. Таким чином, область визначення функції  $K_{\perp}^{(\max)}(\omega)$  складається з двох частин: резонансної  $\omega_r \in (2,138 \times$

$\times 10^{15} \text{ c}^{-1}$ ,  $3,3227 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$ ) і дефляційної<sup>1</sup> області  $\omega_d \in [3,3227 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}, 3,47 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1})$ , в якій відбувається різкий спад  $K_{\perp}^{(\max)}(\omega)$  до фонових значень  $K(\omega, \rho)$ . Ще важливо відзначити, що при  $\omega > 3,47 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$  має місце один плазмовий резонанс  $K_{\parallel}(\omega, \rho)$ .

Пристаюючи до зіставлення взаємного розташування графіків функцій  $K_{\perp}^{(\max)}(\rho)$ ,  $K_{\parallel}^{(\max)}(\rho)$  с напівширинами  $\zeta_i$  функцій  $P_i(\rho)$  ( $i = \text{I, II, III}$ ), приходимо до такого:

- Основним фактором впливу на функцію  $P_I(\rho)$  є ортогональна складова коефіцієнта  $K(\omega, \rho)$  поглинання світла сфероїдальною металевою наночастиною (див.  $K_{\perp}^{(\max)}(\rho)$  та  $\zeta_I$ , рис. 7). Тому в резонансній області  $\omega_r$  крива  $\overline{K_I(\omega)}$  (рис. 5), умовно кажучи, подібна до її прообразу  $P_I(\rho)$  ( $\rho < 1,414$ ). Помітна зміна характеру кривої  $\overline{K_I(\omega)}$  (рис. 5) спостерігається в дефляційній області  $\omega_d$ .

- При відображенні функції  $P_{II}(\rho)$  оператором  $K$  відбувається зменшення амплітудного значення  $\overline{K_{II}(2,0 \cdot 10^{15})}$  відповідно із зменшенням амплітуди  $P_{II}(1,0)$ . Істотну зміну на графіку  $\overline{K_{II}(\omega)}$  спостерігаємо в дефляційній області  $\omega_d$  і в її правому околі, де вже помітно вплив  $K_{\parallel}^{(\max)}(\rho)$  ( $\rho > 1,414$ ) і  $K_{\parallel}^{\max}(\omega)$  ( $\omega > 3,47 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$ ).

- Отримана функція  $\overline{K_{III}(\omega)}$  середнього значення коефіцієнта сумарного поглинання найбільшою мірою адекватна реальній ситуації. Вона в повній мірі відображає вплив на  $P_{III}(\rho)$  як поперечної  $K_{\perp}(\omega, \rho)$ , так і поздовжньої  $K_{\parallel}(\omega, \rho)$  компоненти коефіцієнта поглинання світла.

## 6. Висновки

1. В роботі викладені результати теоретичних досліджень оптичних характеристик ансамблю металевих наночастинок сфероїдальної форми, включаючи компоненти тензора оптичної провідності ( $\sigma_{\perp}$  і  $\sigma_{\parallel}$ ), головні значення компонент тензора деполяризації ( $L_{\perp}$  і  $L_{\parallel}$ ), та коефіцієнт поглинання. Отримано усереднені характеристики з урахуванням впливу форми наночастинок як на коефіцієнти деполяризації, так і на компоненти тензора оптичної провідності. Вплив форми

<sup>1</sup> Дефляція (от лат. “deflatio” – здування) – у геології це процес видування і розвіювання вітром частинок рихлих гірських порід. Дефляції піддаються дрібні частинки пелітової, алевритової і піщаної розмірності.

на провідність в процедурі усереднення враховано вперше.

2. У роботі викладені результати обчислювального експерименту. При його виконанні в ролі вихідних даних використовувалися конкретні значення. При формулюванні першого результату нагадаємо, що кількість плазмових резонансів, їхні частоти і декременти залежать від форми наночастинок (у випадку сферичної форми має місце один плазмовий резонанс, у випадку сфероїдальної форми – їх два, і в еліпсоподібних формах – три). Результатом проведених обчислень є уточнення: у випадку сфероїдальної форми має місце два плазмових резонанса на кінцевому частотному інтервалі ( $\omega \in (2,138 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}, 3,47 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1})$ , рис. 10). Поза межами цього інтервалу має місце один плазмовий резонанс  $K_{\parallel}(\omega, \rho)$ .

3. Запропоновано три варіанти функцій  $P_i(\rho)$  ( $i = \text{I, II, III}$ ), які задають розподіл наночастинок за формою. Відзначимо, що запропонований варіант вибору вигляду функції  $P_i(\rho)$  побудований на основі спільного використання функцій Гауса і “шапочки”, застосування якого суттєво спрощує вирішення досить складної проблеми впливу дисперсії форм металевих наночастинок на сумарний коефіцієнт поглинання. Можна стверджувати, що спільне використання функцій Гауса і “шапочки” виявляється, крім того, оптимальним при теоретичному дослідженні якісної картини усереднення по дисперсії форм.

4. Для кожного варіанта функції  $P_i(\rho)$  знайдені усереднені значення коефіцієнтів сумарного поглинання  $\overline{K_i(\omega)}$  ( $i = \text{I, II, III}$ ) (рис. 5). Отримана функція  $\overline{K_{III}(\omega)}$  середнього значення коефіцієнта сумарного поглинання найбільшою мірою адекватна реальній ситуації. Вона в повній мірі відображає вплив на  $P_{III}(\rho)$  як поперечного  $K_{\perp}(\omega, \rho)$ , так і поздовжнього компонента  $K_{\parallel}(\omega, \rho)$  коефіцієнта поглинання світла.

1. В.В. Климов. *Наноплазмоника* (Физматлит, 2010) [ISBN: 978-5-9221-1205-5].
2. P.M. Tomchuk, N.I. Grigorchuk. Shape and size effects on the energy absorption by small metallic particles. *Phys. Rev.* **73**, 155423 (2006).
3. Є.Ф. Венгер, А.В. Гончаренко, М.Л. Дмитрук. *Оптика малих частинок і дисперсійних середовищ* (Наук. думка, 1999).
4. A.V. Goncharenko, E.F.Venger, S.N. Zavadskii. Effective absorption cross section of an assembly of small ellipsoidal particles. *J. Opt. Soc. Am. B* **13** (11), 2392 (1996).

5. П.М. Томчук, Б.П. Томчук. Оптическое поглощение малых металлических частиц. *ЖЭТФ* **112** (2), 661 (1997).
6. R.D. Fedorovich, A.G. Naumovets, P.M. Tomchuk. Electron and light emission from island metal films and generation of hot electrons in nanoparticles. *Phys. Reports* **328** (2–3), 73 (2000).
7. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Электродинамика сплошных сред* (Наука, 1982).
8. D.V. Butenko, P.M. Tomchuk. The nanoparticle shape's effect on the light scattering cross-section. *Surf. Sci.* **606** (23–24), 1892 (2012).
9. S. Tretyakov. *Nanostructured Metamaterials*, *European Commission*. Eds. S. Tretyakov, P. Barois, T. Scharf *et al.* (Office of the European Union, 2010).
10. N.I. Grigorchuk, P.M. Tomchuk. Cross-sections of electric and magnetic light absorption by spherical metallic nanoparticles. The exact kinetic solution. *УФЖ* **51** (9), 921 (2006).
11. П.М. Томчук, Д.В. Бутенко. Залежність декрементів згасання дипольних плазмових резонансів від форми металевих наночастинок. *УФЖ* **60** (10), 1043 (2015).
12. В.Н. Старков. *Конструктивные методы вычислительной физики в задачах интерпретации* (Наук. думка, 2002).
13. В.С. Владимиров. *Уравнения математической физики* (Наука, 1988).
14. В.М. Старков, М.С. Бродин, П.М. Томчук, В.Я. Гайворонський, О.Ю. Боярчук. Математична інтерпретація результатів експериментальних досліджень властивостей нелінійно-оптичного матеріалу. *УФЖ* **60** (7), 602 (2015).
15. W. Haiss, N.T.K. Thanh, J. Aveyard, D.G. Fernig. Determination of size and concentration of gold nanoparticles from UV-vis spectra. *Anal. Chem.* **79**, 4215 (2007).

Одержано 15.11.18

*P.M. Tomchuk, V.N. Starkov*

INFLUENCE OF SHAPE SPREAD  
IN AN ENSEMBLE OF METAL NANOPARTICLES  
ON THEIR OPTICAL PROPERTIES

S u m m a r y

The theoretical basis of the work consists in that the dissipative processes in non-spherical nanoparticles, whose sizes are smaller than the mean free path of electrons, are characterized by a tensor quantity, whose diagonal elements together with the depolarization coefficients determine the half-widths of plasma resonances. Accordingly, the averaged characteristics are obtained for an ensemble of metal nanoparticles with regard for the influence of the nanoparticle shape on the depolarization coefficients and the components of the optical conductivity tensor. Three original variants of the nanoparticle shape distribution function are proposed on the basis of the joint application of the Gauss and “cap” functions.