

## **SERS pamatņu modelēšana ar galīgo elementu metodi, optimizācija un eksperimenta plānošana**

Čiro F. Tipaldi, Kaspars Vītols, Anatolijs Šarakovskis, Jevgeņijs Gabrusenoks  
*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Virsmas pastiprinātā Ramana izkliede (SERS) ir efekts, kas izpaužas vielām, kas uznestas uz nanostrukturētām virsmām. Šādi Ramana efekts var tikt pastiprināts daudzkārtīgi (pat  $\sim 10^8$  reizes). Tam ir vairāki faktori, no kuriem svarīgākais ir elektromagnētiskā lauka pastiprinājums virsmas plazmonu dēļ. Nanostrukturām bieži izmanto zeltu vai sudrabu.

SERS elektromagnētiskos pastiprinājuma efektus iespējams modelēt ar galīgo elementu metodi, risinot klasiskos Maksvella vienādojumus. Šim nolūkam darbā izmantota programmatūra COMSOL. Pētījuma mērķis ir optimizēt struktūru formas un parametrus centienos palielināt gan maksimālo EM lauka pastiprinājumu, gan arī pastiprinājuma zonu (*hot-spots*) blīvumu. Vienlaikus modeļa parametri tiek izvēlēti, vadoties pēc pamatņu izgatavošanas iespējām. Aprēķinos iegūti pastiprinājumi dažādu struktūru pamatnēm ar zelta un sudraba nanodaļiņām.

Šajā prezentācijā tiks izklāstīti līdzšinējie aprēķini, to salīdzinājums ar literatūrā publicētiem rezultātiem. Papildus tam tiks izklāstītas potenciālas pamatņu izgatavošanas un SERS mērījumu metodes.

## **Modelling of SERS substrates using the finite element method, optimisation & experimental planning**

Ciro F. Tipaldi, Kaspars Vītols, Anatolijs Sarakovskis, Jevgeņijs Gabrusenoks  
*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

Surface enhanced Raman scattering (SERS) is an effect occurring with substances on nanostructured substrates which amplifies the Raman signal of the substance considerably (even  $\sim 10^8$  times). Multiple factors account for this, the most important of which is the electromagnetic field enhancement due to surface plasmons. Often these nanostructured substrates use gold or silver.

The EM enhancement effects of SERS can be suitably modelled with the finite element method (FEM) by solving the classical Maxwell's equations. For this end the program COMSOL is used in this work. The goal of the research is to optimise the shapes and parameters of the structures in order to increase the maximal EM field enhancement, as well as the density of enhancement hot-spots. The parameters of the model are also chosen with consideration of the possibilities to create such substrates experimentally. The calculations done so far have yielded EM enhancements for structures with gold and silver nanoparticles.

In this presentation, the results of our calculations will be communicated and they will be compared to the models found in the literature. In addition, potential methods for making substrates and taking SERS measurements will be inquired into.

The financial support of the project "Strengthening of the capacity of doctoral studies at the University of Latvia within the framework of the new doctoral model", identification No. 8.2.2.0/20/I/006 is greatly acknowledged.