Гибридная схема метода дискретных источников в задачах дифракции электромагнитных волн на плоских наноструктурах в присутствии слоистой среды

И.В. Лопушенко*

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра математики Россия,119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

На основе модифицированной гибридной схемы метода дискретных источников построено решение задачи дифракции линейно поляризованной волны на плоской наноразмерной частице в среде с подложкой. Рассматривается возможность применения развитого подхода к изучению резонансных свойств плазмонных наночастиц.

PACS: 02.60.Lj : 42.25.Fx. УДК: 519.63:535.42.
Ключевые слова: нанооптика, дифракция, метод дискретных источников, рассеиватель на подложке.

В настоящее время активно развивается перспективное направление исследований, получившее название вычислительной нанофотоники. Его актуальность обусловлена в том числе уникальными оптическими свойствами наноразмерных плазмонных структур, которые делают возможной разработку инновационных устройств в таких прикладных областях как оптоэлектроника, солнечная энергетика и спектроскопия. Поскольку существует тенденция к миниатюризации большинства современных фотонных систем, особый интерес представляют структуры с диаметром поперечного сечения, не превышающим десятка нанометров. Для изучения подобных структур требуются эффективные вычислительные методы, основанные на строгих математических моделях и позволяющие получать корректные результаты с контролем точности в присутствии слоистой среды.

Решение задач дифракции на плазмонных структурах в рамках известных прямых вычислительных методов электродинамики существенно усложняется благодаря резким перепадам интенсивности электромагнитного поля вблизи поверхности структур. Одним из способов преодоления этой трудности является использование полуаналитических подходов, в которых представление для результирующего электромагнитного поля и характеристик рассеяния может быть записано в явном виде.

Метод дискретных источников (МДИ) представляет собой один из наиболее эффективных полуаналитических подходов, отличительными особенностями которого являются гибкость при выборе аналитического представления для приближенного решения исходной задачи дифракции, высокая производительность и возможность проведения апостериорной оценки погрешности расчетов [1]. В рамках классической схемы МДИ решение задач дифракции на наноструктурах требуемой толщины оказывается затрудненным в силу возникающей линейной зависимости в используемой системе дискретных источников. В связи с этим ранее была предложена и обоснована гибридная схема МДИ, позволяющая исследовать тонкие вытянутые наночастицы и при этом сохраняющая все преимущества классической схемы [2].

В настоящей работе предлагается новая реализация гибридной схемы МДИ, позволяющая проводить анализ рассеяния световых волн плоскими и сплюснутыми наночастицами. Для примера рассмотрим классическую постановку трехмерной задачи дифракции плоской волны $\{\mathbf{E}^0,\ \mathbf{H}^0\}$ на тонком диске D_i, расположенном вблизи плоской границы раздела Σ двух однородных изотропных сред (ось z декартовой системы координат с началом на Σ направим перпендикулярно Σ в направлении диска):

$$
\begin{gathered}
\mathrm{rot}\mathbf{H}_\zeta = jk\varepsilon_\zeta\mathbf{E}_\zeta, \quad \mathrm{rot}\mathbf{E}_\zeta = -jk\mu_\zeta\mathbf{H}_\zeta \quad D_\zeta, \quad \zeta = 0,1,i, \\
\begin{array}{lll}
\mathbf{n}_p\times(\mathbf{E}_i(p)-\mathbf{E}_0(p)) = 0, & \multirow{2}{*}{$p\in\partial D_i,$} & e_z\times(\mathbf{E}_0(p)-\mathbf{E}_1(p)) = 0, \quad p\in\ \Sigma, \\
\mathbf{n}_p\times(\mathbf{H}_i(p)-\mathbf{H}_0(p)) = 0, & & e_z\times(\mathbf{H}_0(p)-\mathbf{H}_1(p)) = 0,
\end{array} \\
\lim_{r\to\infty} r\cdot\left(\sqrt{\varepsilon_0}\mathbf{E}_0^s\times\frac{r}{r}-\sqrt{\mu_0}\mathbf{H}_0^s\right) = 0, \quad r = |M|\to\infty,\ \ z>0, \\
\left(|\mathbf{E}_1^s|\,,|\mathbf{H}_1^s|\ \right) = o\left(\exp\{-|Imk_1|\,r\}\right), \quad z<0.
\end{gathered} \tag{1}
$$

Здесь $\{\mathbf{E}_\zeta,\ \mathbf{H}_\zeta\}$ — полное поле в полупространствеD_ζ, $\{\mathbf{E}_\zeta^s,\ \mathbf{H}_\zeta^s\}$ — рассеянное поле, $\mathbf{n}_p$ — единичная нормаль к гладкой поверхности границы диска ∂D_i, k — волновое число падающей волны в вакууме, $k_\zeta = k\sqrt{\varepsilon_\zeta\mu_\zeta}$,

M — некоторая точка D_ζ, а параметры сред удовлетворяют соотношениям $\mathrm{Im}\varepsilon_0, \mu_0 = 0$, $\mathrm{Im}\varepsilon_1, \mu_1 < 0$. Поставленная граничная задача (1) имеет единственное решение. Падающая волна может быть $P, S-$ поляризованной. Временная зависимость выбирается в виде $\exp(j\omega t)$.

Будем искать неизвестное рассеянное поле в средах $\mathbf{D}_\zeta$ и неизвестное полное поле внутри частицы $\mathbf{D}_i$ в виде суперпозиции полей электрических дискретных источников (ДИ), расположенных внутри частицы:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\zeta,N}(M) &= \sum_{n=1}^{N}\sum_{\alpha=1}^{3} p_{\alpha,\zeta,n}\frac{j}{k\varepsilon_\zeta\mu_\zeta}\mathrm{rotrot}\mathbf{A}_{\alpha,\zeta,n}, \\ \mathbf{H}_{\zeta,N}(M) &= \frac{j}{k\mu_\zeta}\mathrm{rot}\mathbf{E}_{\zeta,N}(M), \quad \zeta = 0,1,i. \end{aligned} \tag{2}$$

Здесь $\mathbf{A}_{\alpha,\zeta,n}$ — векторные потенциалы ДИ для моделирования поля в соответствующей области ζ, направленные вдоль единичных векторов декартовой системы координат (каждое значение параметра α соответствует одному из орт); $p_{\alpha,\zeta,n}$ — амплитуды ДИ; N — число точек с дискретными источниками.

Согласно предлагаемой реализации гибридной схемы, ДИ располагаются в плоскости внутри частицы: в рассматриваемом случае диска выбирается его плоскость симметрии, параллельная границе раздела сред Σ. В качестве источников для моделирования полного внутреннего поля выбираются регулярные сферические функции Бесселя нулевого порядка:

$$\mathbf{A}_{1,i} = \{j_0(k_iR),0,0\}, \quad \mathbf{A}_{2,i} = \{0,j_0(k_iR),0\}$$
$$\mathbf{A}_{3,i} = \{0,0,j_0(k_iR)\}.$$

В качестве источников для моделирования рассеянного поля выбирается решение уравнений Максвелла в виде электрических диполей, которое аналитически учитывает наличие слоистой среды в структуре $\mathbf{A}$ с помощью тензора Грина $\overleftrightarrow{\mathbf{G}}$ [3]:

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(M,M_n) = \begin{bmatrix} G_{11} & 0 & 0 \\ 0 & G_{11} & 0 \\ \partial G_{31}/\partial x_M & \partial G_{31}/\partial y_M & G_{33} \end{bmatrix},$$

$$G_{ij}(M,M_n) = \int_0^\infty J_0(\lambda r)\, v_{ij}(\lambda,z,z_n)\lambda d\lambda,$$

$$\mathbf{A}_{1,0} = \{G_{11},0,\partial G_{31}/\partial x_M\}, \quad \mathbf{A}_{2,0} = \{0,G_{11},\partial G_{31}/\partial y_M\},$$
$$\mathbf{A}_{3,0} = \{0,0,G_{33}\}.$$

Здесь $M(x,y,z)$ — точка наблюдения в D_ζ, $M_n(x_n,y_n,z_n)$ — точка с дискретными источниками из набора N внутри D_i. Спектральные функции v_{11}, v_{31}, v_{33} обеспечивают выполнение условий сопряжения полей на границе раздела сред:

$$v_{ii}(\lambda,z,z_n) = \begin{cases} \frac{\exp\{-\eta_0|z-z_n|\}}{\eta_0} + A_{ii}(\lambda)\exp\{-\eta_0(z+z_n)\}, & z_n > 0,\ z \geq 0, \\ B_{ii}(\lambda)\exp\{\eta_1 z - \eta_0 z_n\}, & z_n > 0,\ z \leq 0, \end{cases}$$

$$v_{31}(\lambda,z,z_n) = \begin{cases} A_{31}(\lambda)\exp\{-\eta_0(z+z_n)\}, & z_n > 0,\ z \geq 0, \\ B_{31}(\lambda)\exp\{\eta_1 z - \eta_0 z_n\}, & z_n > 0,\ z \leq 0, \end{cases}$$

$$A_{11}(\lambda) = \frac{\mu_1\eta_0 - \mu_0\eta_1}{\mu_1\eta_0 + \mu_0\eta_1}\cdot\frac{1}{\eta_0}, B_{11}(\lambda) = \frac{2\mu_1}{\mu_1\eta_0 + \mu_0\eta_1}, A_{33}(\lambda) = \frac{\varepsilon_1\eta_0 - \varepsilon_0\eta_1}{\varepsilon_1\eta_0 + \varepsilon_0\eta_1}\cdot\frac{1}{\eta_0}, B_{33}(\lambda) = \frac{2\varepsilon_1}{\varepsilon_1\eta_0 + \varepsilon_0\eta_1},$$

$$A_{31}(\lambda) = 2\frac{\varepsilon_1\mu_1 - \varepsilon_0\mu_0}{(\mu_1\eta_0 + \mu_0\eta_1)(\varepsilon_1\eta_0 + \varepsilon_0\eta_1)}, B_{31}(\lambda) = \frac{\mu_1}{\mu_0}A_{31}(\lambda),$$

$$r^2 = (x-x_n)^2 + (y-y_n)^2, R^2_{MM_n} = r^2 + (z-z_n)^2, \eta_\zeta = \sqrt{\lambda^2 - k_\zeta^2}.$$

Выбранное представление обеспечивает автоматическое выполнение условий на бесконечности и линейную независимость ДИ при уменьшении толщины структуры.

Решение задачи дифракции (1) сводится к численному определению набора неизвестных амплитуд ДИ $p_{\alpha,\zeta,n}$ из аппроксимации условий сопряжения полей на поверхности наночастицы в соответствии с обобщенным методом коллокаций [2]. Возникающая при этом переопределенная система линейных уравнений решается методами минимизации невязки в норме $l2$ на поверхности частицы. Вычисление значения поверхностной невязки выполнения граничных условий на другом наборе точек коллокаций дает апостериорную оценку погрешности результата.

С помощью найденных амплитуд ДИ строятся такие характеристики рассеянного поля, как диаграмма рассеяния $\mathbf{F}$, которая определяется из соотношения

$$\mathbf{E}_\zeta(\mathbf{r}) / \left|E^0_\zeta(r)\right| = \frac{\exp\{-jk_\zeta R\}}{R}\mathbf{F}(\theta,\phi) + O(1/R^2),$$
$$R = |M| \to \infty, \quad M \in D_\zeta, \ \zeta = 0, 1,$$

дифференциальное сечение рассеяния в верхнем полупространстве

$$DSC(\theta_0,\theta,\phi) = |F_\theta(\theta_0,\theta,\phi)|^2 + \left|F_\phi(\theta_0,\theta,\phi)\right|^2$$

и индикатриса рассеяния в подложке. Отметим, что благодаря представлению (2) и известным асимптотикам интегралов Зоммерфельда на бесконечности в рамках МДИ данные характеристики представляют собой линейные комбинации элементарных функций, что приводит к существенному снижению вычислительных затрат.

Кроме того, могут быть получены и другие характеристики рассеяния, такие как полное сечение рассеяния в верхнем полупространстве:

$$\sigma(\theta_0) = \int_\Omega DSC(\theta_0,\theta,\phi) d\Omega.$$

Здесь Ω — единичная полусфера. Последнее позволяет исследовать зависимость полной интенсивности рассеяния на наночастице от длины волны внешнего возбуждения и, следовательно, изучать резонансные свойства плазмонных частиц.

Апробация предложенной схемы проведена для случая дифракции плоской волны на тонком диске, расположенном на подложке при варьировании геометрических характеристик диска и материальных характеристик диска и подложки. В настоящее время ведётся работа по расширению области применимости гибридной схемы МДИ на более широкий класс наноструктур, состоящих из кластеров наночастиц.

Работа выполнена при финансовой поддержке Немецко–Российского Междисциплинарного Научного Центра (German–Russian Interdisciplinary Science Center, G-RISC), проект М-2015b-2.

[1] *Еремин Ю. А., Свешников А. Г.* Метод дискретных источников в задачах электромагнитной дифракции. М.: МГУ, 1992.
[2] *Еремин Ю. А., Лопушенко И. В.* Вестник МГУ. Сер. 15: Выч. Матем. и Киберн. №1. С. 3. (2016).
[3] *Дмитриев В. И., Захаров Е. В.* Метод интегральных уравнений в вычислительной электродинамике. М.: МАКС Пресс, 2008.

Hybrid scheme of the discrete sources method in the problems of electromagnetic wave diffraction by flat nanostructures in the presence of the layered medium

I. V. Lopushenko
Chair of Mathematics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University. Moscow 119991, Russia
E-mail: lopushenko.ivan@physics.msu.ru

The solution to a diffraction problem of the linearly polarized wave by the flat nanoscaled particle in the medium with a substrate is constructed on the basis of the modified discrete sources method hybrid scheme. The possibility of applying the developed approach to study resonant properties of plasmonic nanoparticles is considered.

PACS: 02.60.Lj : 42.25.Fx
Keywords: nano–optics, diffraction, discrete sources method, scatterer on a substrate.

Сведения об авторе

Лопушенко Иван Владимирович — аспирант; тел.: (495) 939-10-33, e-mail: lopushenko.ivan@physics.msu.ru.