Метод дискретных диполей в плазмонной окружающей среде

Аннотация

Работа относится к области вычислительной нанофотоники. Метод дискретных диполей развит и впервые применён в случае нахождения рассеивающего объекта в металлической окружающей среде с сильным поглощением. Вычислительный подход апробирован на решении задачи рассеяния плоской волны на полости в виде бесконечного цилиндра, имеющей аналитическое решение.

1 Состав коллектива и грантовая поддержка работы

- к.ф.-м.н. Белай Олег Владимирович, старший научный сотрудник лаборатории фотоники ИАиЭ СО РАН
- к.ф.-м.н. Перминов Сергей Вадимович, старший научный сотрудник лаборатории №31 ИФП СО РАН
- д.ф.-м.н., доцент Фрумин Леонид Лазаревич, ведущий научный сотрудник лаборатории фотоники ИАиЭ СО РАН
- д.ф.-м.н., профессор Шапиро Давид Абрамович, заведующий лабораторий фотоники ИАиЭ СО РАН

Работа выполнена в рамках проектов:

- грант РФФИ 16-02-00511, «Рассеяние электромагнитной волны наночастицами на диэлектрической подложке» (2016–2018 годы), руководитель профессор Шапиро Д.А.;
- грант РФФИ 20-02-00211, «Рассеяние на плазмонных решетках» (2020–2022 годы), руководитель профессор Шапиро Д.А.

2 Научное содержание работы

2.1 Постановка задачи

Нанофотоника — это оптика, в основном, неоднородных (эванесцентных) волн. Аналитические подходы и приближения обладают весьма ограниченной применимостью при расчете оптических процессов с неоднородными волнами, в силу чего задача разработки и совершенствования методов численного моделирования процессов фотоники имеет большое значение. Целью данной работы было выяснение вопросов применимости метода дискретных диполей для моделирования процессов рассеяния света в окружающих средах с поглощением.

2.2 Современное состояние проблемы

Метод дискретных диполей (далее — МДД) является одним из наиболее часто используемых методов в задачах численного моделирования процессов рассеяния электромагнитных волн в оптике и нанофотонике. Подробное описание можно найти в обзоре *M. Yurkin and A. Hoekstra, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **106**, *558 (2007)*. Несмотря на довольно давнюю историю, использование МДД в случае недиэлектрического (поглощающего) окружения исследуемых рассеивателей было крайне ограниченно, а примеров расчета в плазмонной (металлической) окружающей среде в литературе не встречались. Таким образом, вопрос применимости МДД для моделирования рассеяния поглощающих, а также плазмонных, окружающих средах на момент начала нашей работы оставался открытым.

2.3 Описание работы (вычислительных подходов)

Суть МДД (см., например, вышеупомянутый обзор) состоит в разбиении исследуемого рассеивателя на элементы объёма, с которыми ассоциируются дипольные моменты $\mathbf{d}_i$, с последующим решением самосогласованной задачи для ансамбля взаимодействующих диполей. Далее на основе найденных дипольных моментов можно посчитать различные интересующие величины, в частности. амплитуды рассеяния, распределение рассеянного поля.

Мы решали двумерную задачу. Дипольные моменты удовлетворяют уравнению

$$\mathbf{d}_i \alpha_i^{-1} = \mathbf{E}_{i,inc} + \sum_{j \neq i} \widehat{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\mathbf{d}_j, \tag{1}$$

где $\mathbf{E}_{i,inc}$ — падающее (заданное) электрическое поле в точках $\mathbf{r}_i$, в которых расположены соответствующие диполи. Оператор $\widehat{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ задает взаимодействие i-го и j-го дипольных моментов и имеет в двумерном случае следующий вид:

$$\begin{aligned} G_{\beta\gamma}(\mathbf{R}) &= \frac{i\pi k}{\varepsilon_h R}\left[A(kR)\delta_{\beta\gamma} - B(kR)\frac{R_\beta R_\gamma}{R^2}\right],\ \mathbf{R} \equiv \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \qquad (2) \\ A(x) &= xH_0(x) - H_1(x),\ B(x) = xH_0(x) - 2H_1(x), \end{aligned}$$

где β, γ — декартовы индексы, $H_0(x)$, $H_1(x)$ — функции Ганкеля первого рода, а k — волновой вектор поля в среде. Сами диполи наводятся действующим (локальным) полем: $\mathbf{d}_i \equiv \alpha_i \mathbf{E}_i$, при этом дипольная поляризуемость (также в двумерном случае) выражается формулой:

$$\alpha_i = \frac{L^2}{2\pi} \frac{\varepsilon - \varepsilon_h}{\varepsilon + \varepsilon_h} \varepsilon_h, \tag{3}$$

где ε_h — проницаемость окружающего пространства (металла), ε — проницаемость материала рассеивателя, L — расстояние между диполями, которые размещены в узлах квадратной сетки.

Поскольку применение МДД в случае металлического (плазмонного) окружающего пространства в литературе не встречается, мы протестировали предлагаемый подход на задаче рассеяния поля на полости в виде кругового цилиндра в однородной окружающей среде (металл либо сильно поглощающий полупроводник), которая имеет известное аналитическое решение. Основной объём вычислений требовался на этапе решения системы линейных уравнений (1).

2.4 Полученные результаты

На рис. 1 представлены результаты [1] сравнения рассеянного поля как для металличе-

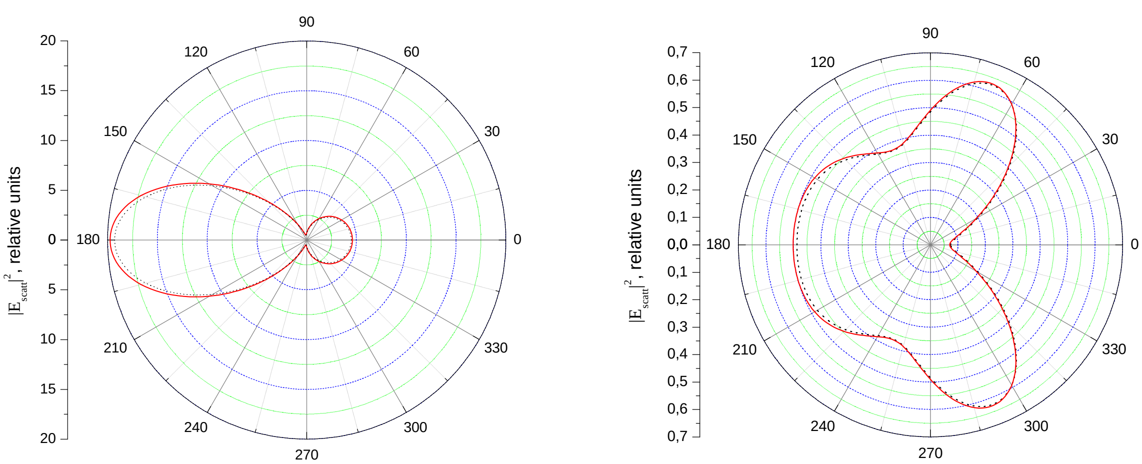

Рис. 1: Полярная диаграмма квадрата модуля рассеянного электрического поля на расстоянии, в полтора раза превышающем радиус цилиндрической полости. Слева — полость в золоте, $\varepsilon_h = -8.325 + i1.325$, длина волны 600 нм; справа — полость в поглощающем диэлектрике, $\varepsilon_h = 13.7 + i2.0$, длина волны 850 нм. Сплошная кривая — метод дискретных диполей, пунктир — аналитическое решение.

ского, так и для неметаллического поглощающего материала, окружающего полость. На рис. 2 показана зависимость сечения рассеяния цилиндрической полости в золоте от длины волны возбуждающего излучения.

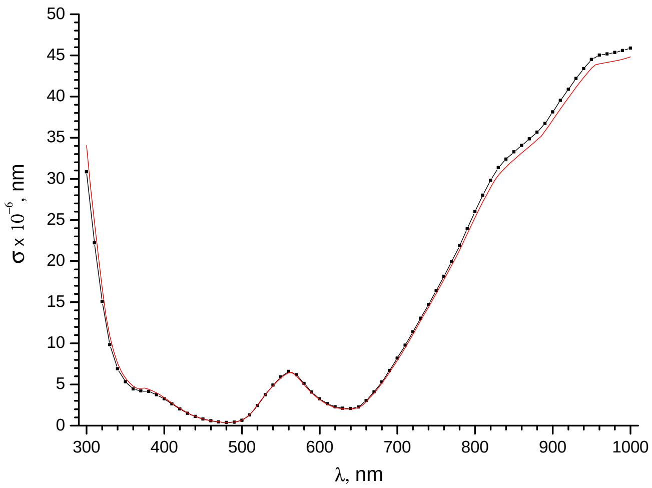

Рис. 2: Зависимость сечения рассеяния (на единицу длины вдоль цилиндра) цилиндрической полости в золоте от длины волны падающего излучения. Сплошная кривая — метод дискретных диполей, пунктир — аналитическое решение.

2.5 Эффект от использования кластера

Использование вычислительного кластера было определяющим для успешного выполнения поставленной задачи. Характерный размер матрицы СЛУ составлял 2–3 $\cdot 10^4$, что требует $\sim$ 15 Гбайт для её размещения. При выполнении вычислений использовалось как естественное распараллеливание описанной задачи (на уровне процессов), обеспеченное взаимной независимостью расчетов для разных значений параметров, так и распараллеливание на уровне потоков с использованием OpenMP.

Общее впечатление от работы на кластере полностью положительное.

Перечень публикаций

[1] S. V. Perminov, L. L. Frumin, and D. A. Shapiro, “Discrete dipole approximation for lossy plasmonic background,” Opt. Lett. **44**, 3238–3241 (2019).