

Метод дискретных диполей в задачах рассеяния ближнего поля периодическими структурами

Аннотация

Работа относится к области вычислительной нанофотоники. Выполнен прямой расчёт рассеянного магнитного поля в ближней зоне для субволновой диэлектрической решётки.

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., профессор Шапиро Давид Абрамович, заведующий лабораторией фотоники ИАиЭ СО РАН

Работа выполнена в рамках проектов:

- грант РФФ 24-22-00087, «Рассеяние света на периодических субволновых структурах» (2024–2025 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 была реализация метода дискретных диполей для непосредственного (не используя периодические условия Блоха) расчёта локальных полей субволновой решётки диэлектрических цилиндров, возбуждаемой плоской волной.

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, см, например, обзор *M. Yurkin and A. Hoekstra, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **106**, 558 (2007). Вместе с тем, применение МДД в задачах рассеяния объектами субволновых масштабов (в нанофотонике) сравнительно ограничено, особенно это касается двумерных задач.

2.3 Описание работы (вычислительных подходов)

Суть МДД 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 интересные величины, в частности, распределение рассеянного поля и поглощаемую исследуемым телом мощность.

Мы решали двумерную задачу. Дипольные моменты удовлетворяют следующему уравнению (вывод содержится, например, в работах *S. V. Perminov, L. L. Frumin, D. A. Shapiro, Optics Letters* **44**, 3238 (2019); *O. J. F. Martin, N. B. Piller, Physical Review E* **58**, 3909 (1998)):

$$\mathbf{d}_i \hat{\alpha}_i^{-1} = \mathbf{E}_{i,0} + \sum_{j \neq i}^N \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \mathbf{d}_j, \quad (1)$$

где $\mathbf{E}_{i,0}$ — падающее (заданное) электрическое поле в точках \mathbf{r}_i , в которых расположены соответствующие диполи. Оператор $\hat{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ описывает взаимодействие i -го и j -го дипольных моментов.

Двумерный тензор Грина в свободном пространстве имеет следующий вид:

$$G_{\beta\gamma}(\mathbf{R}) = \frac{i\pi k}{\varepsilon R} \left[A(kR) \delta_{\beta\gamma} - B(kR) \frac{R_\beta R_\gamma}{R^2} \right], \quad \mathbf{R} \equiv \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \quad (2)$$

$$A(x) = xH_0(x) - H_1(x), \quad B(x) = xH_0(x) - 2H_1(x),$$

где β, γ — декартовы индексы, $H_0(x), H_1(x)$ — функции Ганкеля первого рода, а k — волновой вектор поля в среде, окружающей рассеиватель (с диэлектрической проницаемостью ε_h). 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:

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

где ε — проницаемость материала рассеивателя, L — расстояние между диполями, которые размещены в узлах квадратной сетки.

В работе были выполнены расчёты локальных полей (магнитного и электрического) в непосредственной близости цилиндров, составляющих решётку. Основной объём

вычислений требовался на этапе решения системы линейных уравнений (1). В расчётах число дипольных моментов N составляло 17248, что даёт размер матрицы СЛАУ 34496.

2.4 Полученные результаты

На рис. 1 представлены результаты [1] для интенсивности рассеянного магнитного поля.

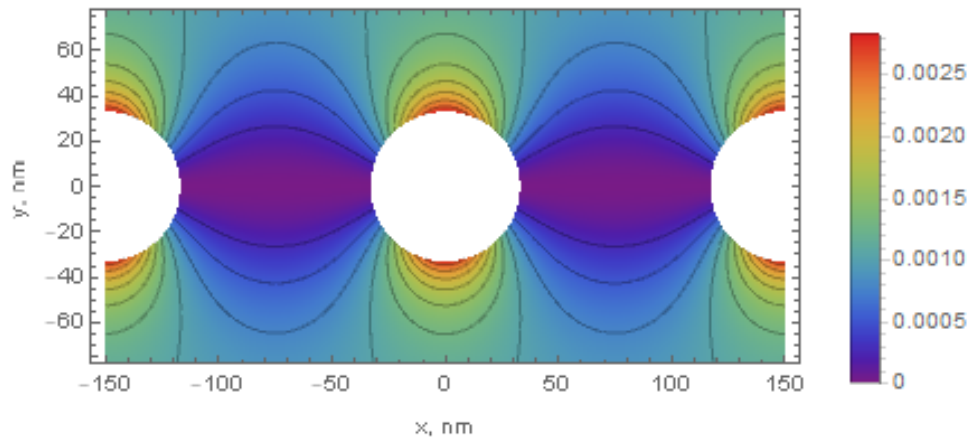


Рис. 1: Распределение интенсивности рассеянного магнитного поля $|H(x, y)|^2$, рассчитанное методом дискретных диполей. Показаны три центральных цилиндра (в сечении), полное число цилиндров в этом расчёте составляло 49.

2.5 Эффект от использования кластера

Использование вычислительного кластера было определяющим для успешного выполнения поставленной задачи. Характерный размер матрицы СЛАУ составлял $\sim 3 \cdot 10^4$, что требует ~ 20 Гбайт для её размещения. При выполнении вычислений использовалось распараллеливание описанной задачи на уровне процессов, обеспеченное взаимной независимостью расчетов для разных значений параметров.

Перечень публикаций

- [1] А.С. Берёза, А.Е. Чернявский, С.В. Перминов, Д.А. Шапиро, “Анализ распределения интенсивности ближнего поля в субволновых решетках с помощью разложения на цилиндрические волны,” *Квантовая электроника* (2024) (в печати).