

Моделирование поглощения и рассеяния хиральных плазмонных наноструктур

1 Состав коллектива

- 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

2 Содержание работы

Аннотация

Работа относится к области вычислительной нанофотоники (электродинамики наноструктур). Отчет содержит результаты прямого моделирования оптических откликов хиральных металлических нанобъектов, которые представляю интерес с точки зрения создания оптически-активных метаматериалов.

2.1 Постановка задачи

Цель работы состояла в численном моделировании оптического отклика винтовой наноструктуры из золота (рис. 1) в зависимости от длины волны и поляризации возбуждающего света. Для расчетов применялся метод дискретных диполей (МДД) [1, 2], состоящий в дискретизации рассеивателя на N кубических ячеек с последующим решением для них самосогласованной задачи. В результате получается следующая система уравнений на дипольные моменты \mathbf{d}_i , характеризующие i -тую ячейку:

$$\mathbf{d}_i = \alpha_i \left[\mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}_i) + \sum_{j \neq i}^N \frac{3\mathbf{n}_{ij}(\mathbf{n}_{ij} \cdot \mathbf{d}_j)\varphi_{ij} - \mathbf{d}_j\psi_{ij}}{r_{ij}^3} \right], \quad (1)$$

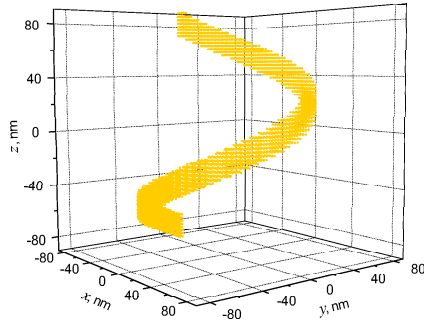


Рис. 1: Общий вид исследуемого объекта — золотой спирали квадратного поперечного сечения (10×20 нм). Показано также разбиение на кубические ячейки с шагом $a = 2.5$ нм.

где

$$\begin{aligned}
 \mathbf{r}_{ij} &\equiv \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, & r_{ij} &\equiv |\mathbf{r}_{ij}|, & \mathbf{n}_{ij} &= \mathbf{r}_{ij}/r_{ij}, \\
 \varphi_{ij} &= \left[1 - ikr_{ij} - \frac{(kr_{ij})^2}{3} \right] \exp(ikr_{ij}), \\
 \psi_{ij} &= \left[1 - ikr_{ij} - (kr_{ij})^2 \right] \exp(ikr_{ij}).
 \end{aligned} \tag{2}$$

Здесь $\mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) \equiv \mathbf{E}_0 \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$ — комплексная амплитуда электрического поля падающего монохроматического света, $\mathcal{E}_{inc}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t) + \text{к.с.}$, где $k = 2\pi/\lambda = \omega/c$ — волновой вектор; α_i и \mathbf{r}_i — соответственно, дипольная поляризуемость и координата ячейки.

Для заданного набора параметров (ω , α_i и ряд других) система (1) представляет собой $3N$ линейных алгебраических уравнений с комплексными коэффициентами. Для их решения было написано консольное приложение на языке C++.

2.2 Современное состояние проблемы

Данная работа лежит в русле исследований оптики композитных искусственных сред, так называемых метаматериалов [3, 4]. Исследуемая в нашей работе хиральная наноструктура может служить базовым элементом метаматериалов, обладающих чрезвычайно высокой оптической активностью в видимой и ближней инфракрасной области спектра.

Оптические свойства золотых спиральных элементов в более низкочастотных областях спектра исследовались в работах [5, 6, 7, 8].

Список литературы

- [1] G. N. Goedecke and S. G. O'Brien, "Scattering by irregular inhomogeneous particles via the digitized green's function algorithm," *Appl. Opt.* **27**, 2431–2438 (1988).

- [2] A. Lakhtakia, “Strong and weak forms of the method of moments and the coupled dipole method for scattering of time-harmonic electromagnetic fields,” *International Journal of Modern Physics C* **3**, 583–603 (1992).
- [3] V. M. Shalaev, W. Cai, U. K. Chettiar, H.-K. Yuan, A. K. Sarychev, V. P. Drachev, and A. V. Kildishev, “Negative index of refraction in optical metamaterials,” *Opt. Lett.* **30**, 3356–3358 (2005).
- [4] P. A. Belov, C. R. Simovski, and S. A. Tretyakov, “Example of bianisotropic electromagnetic crystals: The spiral medium,” *Phys. Rev. E* **67**, 056622 (2003).
- [5] J. K. Gansel, M. Thiel, M. S. Rill, M. Decker, K. Bade, V. Saile, G. von Freymann, S. Linden, and M. Wegener, “Gold helix photonic metamaterial as broadband circular polarizer,” *Science* **325**, 1513–1515 (2009).
- [6] J. K. Gansel, M. Wegener, S. Burger, and S. Linden, “Gold helix photonic metamaterials: A numerical parameter study,” *Opt. Express* **18**, 1059–1069 (2010).
- [7] E. V. Naumova, V. Y. Prinz, S. V. Golod, V. A. Seleznev, R. A. Soots, and V. V. Kubarev, “Manufacturing chiral electromagnetic metamaterials by directional rolling of strained heterofilms,” *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics* **11**, 074010 (2009).
- [8] I. V. Semchenko, S. A. Khakhomov, E. V. Naumova, V. Y. Prinz, S. V. Golod, and V. V. Kubarev, “Study of the properties of artificial anisotropic structures with high chirality,” *Crystallography Reports* **56**, 366–373 (2011).

2.3 Полученные результаты

В результате расчетов были получены величины дипольных моментов всего массива ячеек, \mathbf{d}_i в зависимости от частоты и поляризации падающего излучения, на основе которых можно вычислить различные характеристики исследуемой наноструктуры, в частности, поглощаемую мощность и интенсивность упругого рассеяния. В данной работе мы интересовались величиной циркулярного дихроизма, CD, и дифференциального рассеяния, DS, золотой наноспирали, определяемыми следующими выражениями:

$$CD = 2 \frac{P_L - P_R}{P_L + P_R}, \quad DS = 2 \frac{S_L - S_R}{S_L + S_R}, \quad (3)$$

где P_L и P_R (S_L и S_R) — поглощенная (либо рассеянная) мощность при возбуждении светом с левой и правой круговой поляризацией соответственно.

2.4 Эффект от использования кластера

При выполнении вычислений использовалось естественное распараллеливание описанной задачи (на уровне процессов), обеспеченное взаимной независимостью расче-

тов для разных значений параметров — частоты и поляризации. При этом максимальное значение требуемой оперативной памяти на один процесс достигало ~ 15 Гбайт. Таким образом, использование вычислительного кластера было определяющим для успешного выполнения поставленной задачи.

2.5 Иллюстрации

На рис. 2, а) и б), представлены зависимости циркулярного дихроизма и дифференциального рассеяния от длины волны падающего света для трех наноструктур, отличающихся размером.

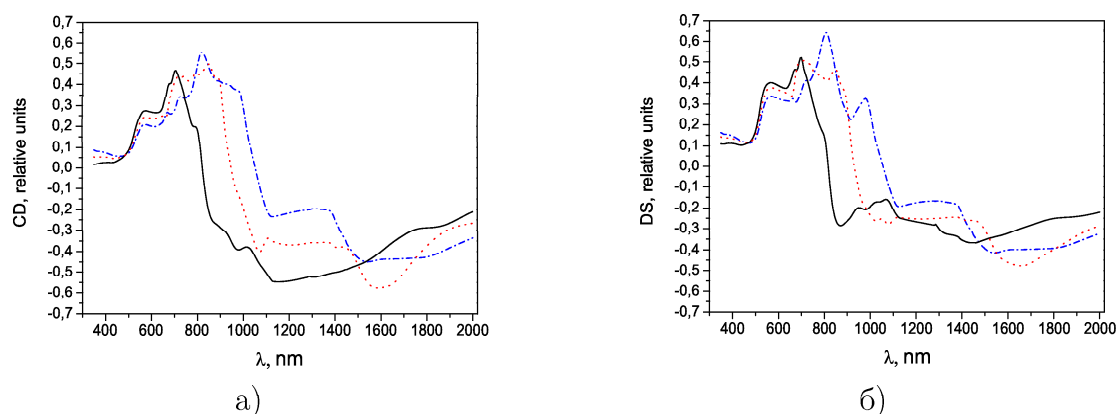


Рис. 2: Циркулярный дихроизм, CD (а) и дифференциальное рассеяние, DS (б). Диаметр спирали: 90 нм (сплошная линия), 130 нм (пунктир), 180 нм (штриховая линия).

3 Впечатления от работы вычислительной системы

Работа вычислительной системы устраивает полностью. Пожеланий по улучшению пока нет.