

Метод дискретных диполей в задачах рассеяния вблизи плоской границы

Аннотация

Работа относится к области вычислительной нанофотоники. Получен 2D тензор Грина, удовлетворяющий электромагнитным граничным условиям на плоской границе раздела двух сред. На его основе построен метод дискретных диполей и впервые применён в 2D задаче рассеивания вблизи границы.

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 лабораторией фотоники ИАиЭ СО РАН

Работа выполнена в рамках проектов:

- 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 построение метода дискретных диполей, базирующегося на тензоре Грина специального вида, удовлетворяющем граничным условиям.

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 граничных задачах рассеяния было крайне ограничено; в частности, примеров применения в 2D задачах в литературе не встречались. Кроме того, представлял интерес получение общего вида 2D тензора Грина, удовлетворяющего условиям на границе раздела двух сред, что открывает возможности построения также и других (помимо МДД) эффективных вычислительных методов для моделирования рассеяния вблизи границы.

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 различные интересующие величины, в частности, распределение рассеянного поля и поглощаемую исследуемым телом мощность.

Мы решали двумерную задачу. При учёте близкорасположенной границы раздела, дипольные моменты удовлетворяют следующему уравнению:

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

где $\mathbf{E}_{i,0}$ — падающее (заданное) электрическое поле в точках \mathbf{r}_i , в которых расположены соответствующие диполи. Оператор $\hat{\mathbf{G}}^0(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ задает взаимодействие i -го и j -го дипольных моментов в свободном пространстве, в то время как оператор $\hat{\mathbf{G}}^b(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ отвечает за учёт границы. При отсутствии границы (то есть в однородном окружении) последнее слагаемое в правой части (1) отсутствует; уравнение в этом случае совпадает с приведённым 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).

Тензор Грина в свободном пространстве имеет (в двумерном случае) следующий вид:

$$\begin{aligned} G_{\beta\gamma}^0(\mathbf{R}) &= \frac{i\pi k_2}{\varepsilon_2 R} \left[A(k_2 R) \delta_{\beta\gamma} - B(k_2 R) \frac{R_\beta R_\gamma}{R^2} \right], \quad \mathbf{R} \equiv \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \\ A(x) &= xH_0(x) - H_1(x), \quad B(x) = xH_0(x) - 2H_1(x), \end{aligned} \quad (2)$$

где β, γ — декартовы индексы, $H_0(x), H_1(x)$ — функции Ганкеля первого рода, а k_2 — волновой вектор поля в среде, окружающей рассеиватель (с диэлектрической проницаемостью ε_2). 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:

$$\alpha_i = \frac{L^2 \varepsilon - \varepsilon_2}{2\pi \varepsilon + \varepsilon_2} \varepsilon_2, \quad (3)$$

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

Тензор $\widehat{\mathbf{G}}^b$ отвечает за влияние границы. Мы показали [1], что он имеет следующий вид:

$$\widehat{\mathbf{G}}^b = k_2^2 \int_{-\infty+i0}^{\infty-i0} \frac{r(q)}{\mu_2} \begin{pmatrix} 1 - q^2/k_2^2 & -iq\mu_2/k_2^2 \\ -iq\mu_2/k_2^2 & 1 + \mu_2^2/k_2^2 \end{pmatrix} dq, \quad (4)$$

где

$$r(q) = \frac{\varepsilon_1 \mu_2 - \varepsilon_2 \mu_1}{\varepsilon_1 \mu_2 + \varepsilon_2 \mu_1} e^{-\mu_2(y+y')} e^{iq(x-x')}, \quad k_{1,2}^2 = k_0^2 \varepsilon_{1,2}, \quad \mu_{1,2} = \sqrt{q^2 - k_{1,2}^2}, \quad (5)$$

k_0 — модуль волнового вектора в вакууме.

Граничным условиям, как показано в нашей работе, удовлетворяет полный тензор $\widehat{\mathbf{G}} \equiv \widehat{\mathbf{G}}^0 + \widehat{\mathbf{G}}^b$.

В работе был рассчитан спектр поглощаемой мощности цилиндром, находящимся вблизи границы раздела двух сред. Основной объём вычислений требовался на этапе решения системы линейных уравнений (1). В расчётах число дипольных моментов N составляло 5188, что даёт размер матрицы СЛАУ 10376.

2.4 Полученные результаты

На рис. 1 представлены результаты [1] для спектра поглощения цилиндра как с учётом, так и без учёта границы раздела между средами. Частота возбуждающего излучения считается фиксированной, а переменной величиной является диэлектрическая проницаемость материала цилиндра, а именно, её вещественная часть. При этом мнимая часть проницаемости материала цилиндра $\text{Im } \varepsilon$ составляла 0.2. Пунктирная кривая получена путём выбрасывания члена с $\widehat{\mathbf{G}}^b$ в правой части (1). Поскольку диаметр цилиндра был много меньше длины волны, его отклик является с хорошей точностью дипольным, и для изолированного цилиндра (то есть без учёта границы) имеет место хорошо известный плазмонный резонанс с максимумом при $\text{Re } \varepsilon = -1$. Наш расчёт (пунктирная кривая) демонстрирует соответствующий резонанс, что служит проверкой реализованного численного метода.

2.5 Эффект от использования кластера

Использование вычислительного кластера было определяющим для успешного выполнения поставленной задачи. Характерный размер матрицы СЛАУ составлял $\sim 10^4$,

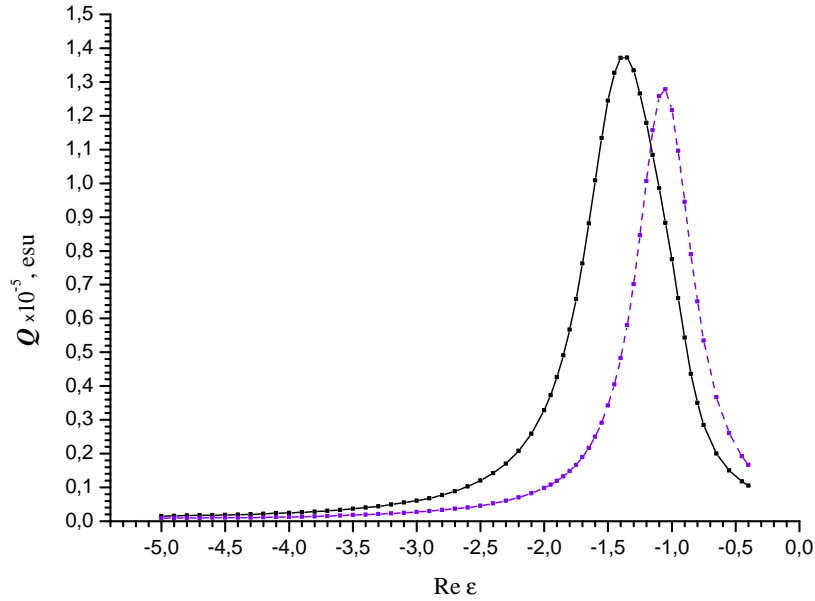


Рис. 1: Спектр поглощения тонкого цилиндра, помещённого вблизи плоской границы раздела двух сред, численно рассчитанный посредством МДД. Сплошная кривая — с учётом влияния границы; пунктирная кривая — без учёта границы.

что требует ~ 10 Гбайт для её размещения. Реально объём используемой памяти составлял до 15–17 Гбайт. 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, D. A. Shapiro, “Resonant absorption of plasmonic cylinder near boundary between dielectrics,” *Phys. Lett. A* **447**, 128295 (2022).