

АНАЛИЗ РАССЕЙВАЮЩИХ СВОЙСТВ КЛАСТЕРА НАНОЧАСТИЦ В МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛЁНКЕ МЕТОДОМ ДИСКРЕТНЫХ ИСТОЧНИКОВ

Барышев А.В., Ерёмин Ю.А.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Аннотация

На основе метода дискретных источников разработана и реализована математическая модель оптической антенны, состоящей из кластера наноразмерных частиц, которые располагаются в металлической плёнке на стеклянной подложке. Приведены результаты компьютерного моделирования рассеянной интенсивности, в том числе и в области неизлучающих волн. Показана возможность управления направлением излучения за счёт геометрии кластера.

Ключевые слова: оптическая антенна, метод дискретных источников, наноразмерные частицы, эффект экстремального просачивания энергии.

Введение

Непрерывное совершенствование в реализации и использовании металлодиэлектрических наноструктур и возможность определения их оптических свойств выдвинуло плазмонику на передний край современной нанооптики. Среди многочисленных применений плазмоники в различных отраслях науки и технологии исследование рассеивающих свойств кластеров наночастиц имеет огромный потенциал для практических применений [1 - 2].

В частности, большое внимание уделяется вопросу изучения рассеивающих свойств оптических антенн [1 - 3], зачастую представляющих собой кластер наноразмерных частиц, расположенных на подложке или в тонких плёнках, которые, в свою очередь, располагаются на поверхности подложки. Подобно антеннам радио- и микроволнового диапазона, оптические антенны преобразуют энергию свободно распространяющегося излучения в энергию локализованной волны и наоборот. Оптические антенны позволяют усилить взаимодействие света с веществом, что даёт возможность с успехом использовать их для повышения эффективности работы таких устройств, как локальные биосенсоры, солнечные батареи, переключатели излучения, светоизлучающие органические диоды и другие [2].

В последнее время особое внимание было уделено исследованию характеристик рассеяния оптической антенны типа Уда-Яги [4 - 6], представляющей собой пять наноразмерных частиц (активный вибратор, рефлектор и три директора) из благородного металла. Частицы располагались в свободном пространстве или в слоистой среде без поглощения, где индексы рефракции всех слоёв приблизительно одинаковы, что позволяет рассматривать подобную среду как однородное пространство. В работах [4, 5] было показано, что при возбуждении подобной системы в свободном пространстве квантовой точкой, расположенной вблизи активного вибратора, антенна рассеивает излучение в определённом направлении. Подобные результаты также были получены в работе [6], когда антенна располагалась в слоистой среде без поглощения с приблизительно одинаковыми индексами рефракции и возбуждалась плоской

электромагнитной волной, распространяющейся перпендикулярно оси антенны.

Чуть более десяти лет назад было открыто явление аномального просачивания энергии через наноразмерные отверстия в экране, сделанном из благородного металла [7]. Тремя годами позднее появилась работа [8], в которой было дано объяснение этому явлению, связанному с возбуждением плазмонов [9]. На основе математического моделирования было обнаружено экстремальное просачивание энергии через металлическую плёнку, нанесённую на стеклянную призму, в которой присутствовало наноразмерное отверстие [10] или неоднородность [11], причём эффект проявляется в резком (на порядок) возрастании амплитуды интенсивности рассеяния исключительно в области неизлучающих волн, за углом полного внутреннего отражения.

Современное состояние технологий разработки и создания оптических антенн требует наличия адекватных средств математического моделирования для предсказания их рассеивающих свойств. В данной работе на основе метода дискретных источников проводится анализ рассеивающих свойств оптической антенны в области неизлучающих волн. Антенна представляет собой совокупность наноразмерных частиц, имеющих те же характеристические размеры, что и частицы, рассмотренные в работе [6]. Но в отличие от приведённой работы, мы рассматриваем принципиально новую конструкцию, которая включает в себя кремниевые частицы, расположенные в тонкой плёнке из благородного металла, нанесённой на поверхность стеклянной призмы. В качестве внешнего возбуждения рассматривается плоская электромагнитная волна, распространяющаяся за углом полного внутреннего отражения, что приводит к возникновению эффекта экстремального просачивания энергии.

Математическое моделирование оптических свойств подобных антенн с использованием таких методов, как метод конечных элементов [12] или метод конечных разностей во временной области [13], может быть неточным в силу того, что эти методы не позволяют строго учесть взаимодействие между частицами и бесконечной границей раздела «подложка-плёнка-воздух». Кроме того, эти методы

не позволяют контролировать реальную сходимость приближённого решения к точному, что приводит к возникновению артефактов [14].

Метод дискретных источников лишён подобного недостатка и позволяет аналитически учитывать все возможные взаимодействия локальной структуры с интерфейсами, которые возникают благодаря преотражениям волн. В числе прочего, метод дискретных источников позволяет одновременно решать задачу для нескольких углов падения, а также для обеих базовых поляризаций P/S плоской электромагнитной волны.

1. Математическая постановка задачи рассеяния

Математическую постановку будем проводить для N частиц произвольной формы, расположенных в среде с плоско-параллельными слоями (рис. 1). Введём прямоугольную систему координат с началом на плоскости раздела «подложка-металлическая плёнка» так, что эти плоско-параллельные слои делят всё пространство R^3 на три области: D_1 ($z < 0$), которую занимает стеклянная подложка, D_f ($d > z > 0$), которую занимает металлическая плёнка толщины d , и D_0 ($z > d$), которую занимает воздух. Плоскость раздела «подложка-металлическая плёнка» обозначим через Ξ_1 ($z = 0$), а плоскость раздела «плёнка-воздух» обозначим через Ξ_0 ($z = d$). Таким образом, ось OZ направлена перпендикулярно плоскостям Ξ_1 и Ξ_0 в сторону области D_0 , которую занимает воздух. Проводящая плёнка занимает пространство между плоскостями Ξ_1 и Ξ_0 . N частиц с гладкой границей произвольной формы, внутреннюю область которых обозначим D_{i_n} ($i_n = i_1 \dots i_N$), расположены целиком внутри плёнки. Полагаем, что области D_{i_n} являются односвязными. Границы частиц обозначим через ∂D_{i_n} . В качестве внешнего возбуждения будем рассматривать поле линейно поляризованной плоской волны $\{E^0, H^0\}$, падающей из стеклянной подложки D_1 под углом θ_1 относительно нормали на плоскую границу Ξ_1 «подложка-плёнка». Тогда математическая постановка задачи рассеяния будет иметь вид

$$\text{rot } H_\zeta = jk_\zeta \epsilon_\zeta E_\zeta, \text{ rot } E_\zeta = -jk_\zeta \mu_\zeta H_\zeta,$$

в D_ζ ($\zeta = 0, f, 1, i_1 \dots i_N$)

$$\begin{aligned} n_{p_n} \times (E_{i_n}(p) - E_f(p)) &= 0, \quad p \in \partial D_{i_n}, \\ n_{p_n} \times (H_{i_n}(p) - H_f(p)) &= 0, \quad p \in \partial D_{i_n}, \\ e_z \times (E_0(p) - E_f(p)) &= 0, \quad p \in \Xi_0, \\ e_z \times (H_0(p) - H_f(p)) &= 0, \quad p \in \Xi_0, \end{aligned} \tag{1}$$

$$e_z \times (E_f(p) - E_1(p)) = 0, \quad p \in \Xi_1,$$

$$e_z \times (H_f(p) - H_1(p)) = 0, \quad p \in \Xi_1,$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \left(\sqrt{\epsilon_\zeta} E_\zeta^s \times \frac{r}{r} - \sqrt{\mu_\zeta} H_\zeta^s \right) = 0,$$

$$r = |M| \rightarrow \infty \quad (\zeta = 0, 1),$$

$$\left(|E_f|, |H_f| \right) = o \left(\exp \{ -|\text{Im}(k_f) \rho| \} \right),$$

$$\rho = \sqrt{x^2 + y^2} \rightarrow \infty.$$

Здесь $\{E_\zeta, H_\zeta\}$ – полные, а $\{E_\zeta^s, H_\zeta^s\}$ – рассеянные поля в соответствующих областях D_ζ , e_z – орт z декартовой системы координат, n_{p_n} – вектор нормали к поверхностям $\partial D_{i_n} \in C^{(2,\alpha)}$ ($i_n = i_1 \dots i_N$). Мы также полагаем, что параметры сред удовлетворяют условиям $\text{Im}\{\epsilon_\zeta, \mu_\zeta\} \leq 0$, $\text{Im}\{\epsilon_f, \mu_f\} < 0$ (временная зависимость выбрана в виде $\exp\{j\omega t\}$). В этом случае граничная задача имеет единственное решение. Отметим, что в областях $D_{1,f}$ полное поле включает в себя падающую и отражённую плоские волны, а в области D_0 – преломлённую волну.

Прежде чем строить приближённое решение для рассеянных полей, решим задачу отражения и преломления плоской волны $\{E^0, H^0\}$ на слоистой структуре «воздух-плёнка-подложка». Это решение можно записать в явном виде [15]. Полученное поле обозначим $\{E_\zeta^0, H_\zeta^0\}$ ($\zeta = 1, f, 0$). Поле внешнего возбуждения внутри плёнки $\{E_f^0, H_f^0\}$ для P/S -поляризованного возбуждения плоской волны может быть записано как

$$E_f^0 = w_i^{P,S} E_f^+ + w_r^{P,S} E_f^-, \quad H_f^0 = w_i^{P,S} H_f^+ + w_r^{P,S} H_f^-,$$

где для P -поляризации

$$E_f^\pm = (\mp \cos \theta_f e_x + \sin \theta_f e_z) \gamma^\pm, \quad H_f^\pm = -n_f e_y \gamma^\pm$$

и для S -поляризации

$$H_f^\pm = n_f (\mp \cos \theta_f e_x + \sin \theta_f e_z) \gamma^\pm, \quad E_f^\pm = e_y \gamma^\pm,$$

$$\gamma^\pm = \exp \{ -jk_f (x \sin \theta_f \pm z \cos \theta_f) \}, \quad k_\zeta^2 = k^2 \epsilon_\zeta \mu_\zeta,$$

$$n_\zeta = \sqrt{\epsilon_\zeta \mu_\zeta}, \quad (\zeta = 1, f, 0),$$

$$w_i^{P,S} = T_{1f}^{P,S} / (1 - R_{f1}^{P,S} R_{f0}^{P,S} e_f^2), \quad w_r^{P,S} = -R_{f0}^{P,S} e_f^2,$$

$$e_f = \exp \{ -jk_f \cos \theta_f \}.$$

Здесь $R_{\alpha\beta}^{P,S}$, $T_{\alpha\beta}^{P,S}$ – соответствующие коэффициенты отражения и преломления на плоской границе, разделяющей D_α и D_β [15].

2. Метод дискретных источников

Теперь будем строить приближённое решение задачи для рассеянного поля $\{E_\zeta^s, H_\zeta^s\}$ в D_ζ ($\zeta = 1, f, 0$)

и полного поля в D_{i_n} на основе метода дискретных источников (МДИ) [16].

Суть МДИ заключается в представлении поля в виде конечной линейной комбинации полей дискретных источников, которая аналитически удовлетворяет системе уравнений Максвелла в областях $D_{1,f,0,i_1\dots i_N}$, условиям на бесконечности для рассеянного в $D_{1,f,0}$ поля, а также условиям сопряжения для тангенциальных компонент полей на $\Xi_{0,1}$. В результате чего решение граничной задачи рассеяния (1) сводится к аппроксимации поля внешнего возбуждения на поверхностях частиц ∂D_{i_n} ($i_n = i_1 \dots i_N$) полями дискретных источников. Неизвестные амплитуды ДИ определяются только из условий сопряжения на поверхностях частиц ∂D_{i_n} , которые принимают вид:

$$\begin{aligned} n_{p_n} \times (\mathbf{E}_{i_n} - \mathbf{E}_f^s) &= n_{p_n} \times \mathbf{E}_f^0, \\ n_{p_n} \times (\mathbf{H}_{i_n} - \mathbf{H}_f^s) &= n_{p_n} \times \mathbf{H}_f^0, \end{aligned} \quad (2)$$

где $i_n = i_1 \dots i_N$, $p_n = p_1 \dots p_N$. Таким образом, решение задачи (1), первоначально сформулированной в неограниченной области, сведено к задаче аппроксимации полей внешнего возбуждения на поверхностях частиц.

Приближённое решение будем строить для частиц произвольной формы. В основу для представления рассеянного поля положим систему электрических диполей, удовлетворяющих условиям сопряжения для тангенциальных компонент полей на плоскостях $\Xi_{0,1}$, что позволяет учесть аналитически всевозможные переотражения полей между частицами и плоскостями раздела сред [16]. Для q -ой частицы ($q = 1 \dots N$) диполи локализованы в точках $M_n^{q,e}$ и располагаются всюду плотно на некоторой вспомогательной поверхности $S_e^q \in C^{(2,\alpha)}$, $\overline{\{M_n^{q,e}\}}_{n=1}^\infty = S_e^q$, которая располагается строго внутри D_{i_q} . Структура полей ДИ будет определяться тензором Грина слоистой среды:

$$\mathbf{G}(M, M_n^{q,e}) = \begin{pmatrix} G_{11} & 0 & 0 \\ 0 & G_{11} & 0 \\ \partial g / \partial x_M & \partial g / \partial y_M & G_{33} \end{pmatrix}.$$

При этом компоненты тензора могут быть записаны в виде интегральных представлений Зоммерфельда

$$G_{11}(M, M_n^{q,e}) = \int_0^\infty J_0(\lambda r) v_{11}(\lambda, z, z_n^{q,e}) \lambda d\lambda,$$

$$G_{33}(M, M_n^{q,e}) = \int_0^\infty J_0(\lambda r) v_{33}(\lambda, z, z_n^{q,e}) \lambda d\lambda,$$

$$g(M, M_n^{q,e}) = \int_0^\infty J_0(\lambda r) v_{31}(\lambda, z, z_n^{q,e}) \lambda d\lambda,$$

$$\text{где } r^2 = \rho^2 + (\rho_n^{q,e})^2 - 2\rho\rho_n^{q,e} \cos(\phi - \phi_n^{q,e}),$$

$$R_{M, M_n^{q,e}}^2 = r^2 + (z - z_n^{q,e})^2,$$

$J_0(\lambda r)$ – цилиндрическая функция Бесселя,

$(\rho_n^{q,e}, \phi_n^{q,e}, z_n^{q,e})$ – координаты точки $M_n^{q,e}$.

Явный вид спектральных функций $v_{11}(\lambda, z, z_n^{q,e})$, $v_{33}(\lambda, z, z_n^{q,e})$, $v_{31}(\lambda, z, z_n^{q,e})$, обеспечивающих выполнение условий сопряжения на границах $\Xi_{0,1}$ слоистой среды, определяется из следующих условий на границах $z = 0, d$ [17]:

$$[v_{11}] = \left[\frac{1}{\mu} \frac{\partial v_{11}}{\partial z} \right] = 0; \quad [v_{33}] = \left[\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial v_{33}}{\partial z} \right] = 0;$$

$$\left[\frac{1}{\mu} v_{31} \right] = 0; \quad \left[\frac{1}{\varepsilon \mu} \frac{\partial v_{31}}{\partial z} \right] = - \left[\frac{1}{\varepsilon \mu} \right] v_{11},$$

где $[\cdot]$ – скачок переменной при переходе через поверхность.

Явный вид спектральных функций $v_{11}(\lambda, z, z_n^{q,e})$, $v_{33}(\lambda, z, z_n^{q,e})$, $v_{31}(\lambda, z, z_n^{q,e})$ можно найти в работе [18].

Для q -ой частицы ($q = 1 \dots N$) полагаем, что в каждой точке $M_n^{q,e}$ располагаются три линейно независимых электрических диполя, ориентированных в соответствии с цилиндрической системой координат. Тогда векторные потенциалы q -ой частицы, связанные с представлением рассеянного поля и соответствующие каждому такому источнику, можно представить как:

$$\mathbf{A}_n^{1(q,e)} = G_{11}(M, M_n^{q,e}) \cos(\phi - \phi_n^{q,e}) \mathbf{e}_\rho -$$

$$-G_{11}(M, M_n^{q,e}) \sin(\phi - \phi_n^{q,e}) \mathbf{e}_\phi +$$

$$+ \left[\frac{\partial g(M, M_n^{q,e})}{\partial \rho} \cos(\phi - \phi_n^{q,e}) -$$

$$- \frac{1}{\rho} \frac{\partial g(M, M_n^{q,e})}{\partial \rho} \sin(\phi - \phi_n^{q,e}) \right] \mathbf{e}_z,$$

$$\mathbf{A}_n^{2(q,e)} = G_{11}(M, M_n^{q,e}) \sin(\phi - \phi_n^{q,e}) \mathbf{e}_\rho +$$

$$+G_{11}(M, M_n^{q,e}) \cos(\phi - \phi_n^{q,e}) \mathbf{e}_\phi +$$

$$+ \left[\frac{\partial g(M, M_n^{q,e})}{\partial \rho} \sin(\phi - \phi_n^{q,e}) +$$

$$+ \frac{1}{\rho} \frac{\partial g(M, M_n^{q,e})}{\partial \rho} \cos(\phi - \phi_n^{q,e}) \right] \mathbf{e}_z,$$

$$\mathbf{A}_n^{3(q,e)} = G_{33}(M, M_n^{q,e}) \mathbf{e}_z.$$

Для q -ой частицы ($q=1\dots N$) диполи, представляющие поле внутри частицы, локализованы в точках $M_n^{q,i}$ и располагаются всюду плотно на некоторой вспомогательной поверхности $S_i^q \in C^{(2,\alpha)}$, $\overline{\{M_n^{q,i}\}}_{n=1}^\infty = S_i^q$, которая располагается строго внутри D_{i_q} . Векторные потенциалы q -ой частицы ($q=1\dots N$), связанные с представлением полного поля внутри частицы, могут быть записаны следующим образом:

$$\begin{aligned} A_n^{1(q,i)} &= j_0(M, M_n^{q,i}) \cos(\phi - \phi_n^{q,i}) e_\rho - \\ &\quad - j_0(M, M_n^{q,i}) \sin(\phi - \phi_n^{q,i}) e_\phi, \\ A_n^{2(q,i)} &= j_0(M, M_n^{q,i}) \sin(\phi - \phi_n^{q,i}) e_\rho + \\ &\quad + j_0(M, M_n^{q,i}) \cos(\phi - \phi_n^{q,i}) e_\phi, \\ A_n^{3(q,i)} &= j_0(M, M_n^{q,i}) e_z. \end{aligned}$$

Здесь

$$j_0(M, M_n^{q,i}) = j_0(k_i R_{MM_n^{q,i}}),$$

где $j_0(\cdot)$ – сферическая функция Бесселя нулевого порядка.

Тогда для приближённого решения граничной задачи (1) справедливо следующее представление:

$$\begin{aligned} E_e^{s,N}(M) &= \sum_{q=1}^N \sum_{n=1}^{N_e} \sum_{l=1}^3 p_{nl}^{q,e} \text{rot rot } A_n^{l(q,e)}(M), \\ H_e^{s,N}(M) &= \frac{j}{k\mu_e} \text{rot } E_e^{s,N}(M), \quad M \in D_e, \\ E_{i_q}^N(M) &= \sum_{n=1}^{N_i} \sum_{l=1}^3 p_{nl}^{q,i} \text{rot rot } A_n^{l(q,i)}(M), \\ H_{i_q}^N(M) &= \frac{j}{k\mu_{i_q}} \text{rot } E_{i_q}^N(M), \quad M \in D_{i_q}, \end{aligned} \tag{3}$$

где $E_e^{s,N}$ и $H_e^{s,N}$ представляют рассеянное системой частиц поле во внешней области D_e , а $E_{i_q}^N$ и $H_{i_q}^N$ представляют полное поле внутри q -ой частицы. N_e и N_i – количество дискретных источников, выбираемых на вспомогательных поверхностях S_e^q и S_i^q и представляющих поле в соответствующих областях.

Построенное таким образом представление для приближённого решения удовлетворяет всем условиям граничной задачи (1), за исключением условий сопряжения на поверхностях частиц. Удовлетворяя условиям (2) в норме $L_2(\partial D)$, где $\partial D = \bigcup_{q=1}^N \partial D_{i_q}$, определим $p_{nl}^{q,\zeta}$. Заметим, что с помощью единого набора амплитуд мы строим представление для рассеянного поля сразу во всех трёх областях $D_{1,f,0}$.

Имеет место следующее утверждение.

Теорема. Пусть электрические диполи локализованы в точках $M_n^{q,e}$ и $M_n^{q,i}$ ($q=1\dots N$) и располагаются всюду плотно на вспомогательных нерезонансных для данного волнового числа k_q поверхностях $S_{e,i}^q \in C^{(2,\alpha)}$, $\overline{\{M_n^{q,e}\}}_{n=1}^\infty = S_e^q$, $\overline{\{M_n^{q,i}\}}_{n=1}^\infty = S_i^q$, при этом поверхности $S_{e,i}^q$ располагаются строго внутри D_{i_q} . Тогда приближённое решение вида (3) сходится равномерно к точному решению задачи (1) в любой конечной области полупространства $D_{0,1}$.

3. Вычислительный алгоритм

Следуя обобщённому методу поточечной сшивки, позволяющему получить наиболее стабильные результаты [19], неизвестные амплитуды дискретных источников будем определять как решение переопределённой системы линейных уравнений. Суть обобщённого метода поточечной сшивки заключается в том, что на поверхности каждой частицы выбирается набор точек коллокаций $\{P_{jj}\}_{j=1}^L \in \partial D_{i_q}$, равномерно покрывающих эту поверхность [19]. Затем, повторяя эту операцию для каждой частицы, а также задавая на вспомогательных поверхностях внутри частицы набор дискретных источников $\{M_n^{q,e}\}_{n=1}^{N_e}$ и $\{M_n^{q,i}\}_{n=1}^{N_i}$, представляющих рассеянное поле вне частицы и полное поле внутри частицы, мы получим переопределённую систему линейных уравнений размерности $4LN \times 3N(N_e + N_i)$. Затем неизвестные амплитуды мы определяем путём псевдообращения. Отметим, что применение подобной схемы позволяет одновременно вычислять характеристики рассеяния для обеих поляризации P - и S -типа и набора углов падения плоской волны θ_1 .

В ходе математического моделирования мы рассматривали кластер частиц сфероидальной формы. При этом дискретные источники располагались на вспомогательных поверхностях сфероидальной формы, диаметр которых был вдвое меньше диаметра рассматриваемых сфероидальных частиц, а координаты и количество источников, представляющих рассеянное поле вне частиц и полное поле внутри частиц, совпадали.

Для вычисления характеристик рассеянного поля на бесконечности необходимо вычислить диаграмму рассеяния. В области D_0 она определяется следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{E_0^s(M)}{|E^0(z=0)|} &= \frac{\exp(-jk_0 r)}{r} F(\theta, \phi) + o(r^{-1}), \\ z \geq d, \quad r &= |M| \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Для получения конкретного вида диаграммы рассеяния для приближённого решения (3) достаточно использовать асимптотические представления для интегралов Зоммерфельда. Тогда θ, ϕ – компоненты диаграммы рассеяния – записываются следующим образом:

$$F_{\theta}(\theta, \phi) = f_{amp} \sum_{q=1}^N \sum_{n=1}^{N_e} \{ p_{n1}^{q,e} f_{\theta}^p + p_{n2}^{q,e} f_{\theta}^{\phi} + p_{n3}^{q,e} f_{\theta}^z \},$$

$$F_{\phi}(\theta, \phi) = f_{amp} \sum_{q=1}^N \sum_{n=1}^{N_e} \{ p_{n1}^{q,e} f_{\phi}^p + p_{n2}^{q,e} f_{\phi}^{\phi} \},$$

$$f_{amp} = jk_0 \cos \theta \exp\{jk_0 d \cos \theta\},$$

$$f_{\theta}^p = \{ \alpha_{11}(k_0 \sin \theta, z_n, d) \cos \theta + jk_0 \alpha_{31}(k_0 \sin \theta, z_n, d) \sin^2 \theta \} \cos(\phi - \phi_n),$$

$$f_{\theta}^{\phi} = \{ \alpha_{11}(k_0 \sin \theta, z_n, d) \cos \theta + jk_0 \alpha_{31}(k_0 \sin \theta, z_n, d) \sin^2 \theta \} \sin(\phi - \phi_n),$$

$$f_{\theta}^z = -\alpha_{33}(k_0 \sin \theta, z_n, d) \sin \theta,$$

$$f_{\phi}^p = -\alpha_{11}(k_0 \sin \theta, z_n, d) \sin(\phi - \phi_n),$$

$$f_{\phi}^{\phi} = \alpha_{11}(k_0 \sin \theta, z_n, d) \cos(\phi - \phi_n).$$

4. Обсуждение результатов

Основным объектом нашего исследования является интенсивность рассеянного поля в области D_0 , которая имеет вид:

$$I(\theta, \phi) = |F_{\theta}(\theta, \phi)|^2 + |F_{\phi}(\theta, \phi)|^2.$$

В ходе численного моделирования в качестве внешнего возбуждения рассматривалась P -поляризованная плоская волна единичной амплитуды с длиной волны $\lambda = 670$ нм, волновой вектор которой лежит в плоскости $\phi = 0$. Волна распространяется из призмы, сделанной из стекла ВК-7 с индексом рефракции $n_1 = 1,51$, под углом θ_1 к оси OZ . Выбор P -поляризации плоской волны объясняется существованием эффекта экстремального просачивания энергии [11], существенно зависящим от поляризации внешнего возбуждения.

Обозначим через θ_0 угол, под которым волна проходит в D_0 . Соотношение Снеллиуса имеет вид $\sin \theta_0 = (n_1 / n_0) \sin \theta_1$. В силу того, что показатель преломления стекла превышает показатель преломления воздуха, то при изменении угла падения θ_1 в диапазоне от 0 до $\pi/2$ наступает момент, начиная с которого $|\sin \theta_0| > 1$. Тогда $\cos \theta_0 = -j\sqrt{\sin^2 \theta_0 - 1}$ и $\gamma^+ = \exp\{-jk_0 x \sin \theta_0\} \exp\{-k_0 z \sqrt{\sin^2 \theta_0 - 1}\}$. Таким образом, в верхнем полупространстве возникает неизлучающая волна, которая распространяется вдоль границы раздела (оси OX) и экспоненциально затухает по нормали к границе (вдоль оси OZ). При дли-

не волны $\lambda = 670$ нм для стекла с индексом рефракции $n_1 = 1,51$ критический угол $\theta_c = \arcsin(n_0 / n_1)$, за которым располагается область неизлучающих волн, оказывается равным $\theta_c \approx 41,47^\circ$.

Все результаты, приведённые ниже, являются результатами численного моделирования. Во всех случаях рассеиватели представляют собой кремниевые частицы Si сфероидальной формы. Частицы расположены внутри плёнки таким образом, что большая ось их параллельна плоскости XU . Показатели преломления веществ для рассматриваемой длины волны $\lambda = 670$ нм берутся из справочной литературы. В частности, показатель преломления кремния $n_i = (3,82; -0,015)$. Частицы целиком расположены внутри золотой плёнки Au , имеющей показатель преломления $n_f = (0,16; -3,46)$, таким образом, что они равноудалены от плоскостей $\Xi_{0,1}$.

Толщина плёнки выбрана в соответствии с условием возникновения эффекта экстремального просачивания энергии [11], наблюдаемого в случае, когда модуль коэффициента отражения $R_{01}^p(\theta)$ от интерфейса «подложка-плёнка-воздух» стремится к нулю.

$$R_{01}^p(\theta) = \frac{R_{1f}^p + R_{f0}^p \exp(-2jk_f \cos \theta_f d)}{1 + R_{1f}^p R_{f0}^p \exp(-2jk_f \cos \theta_f d)}.$$

Для рассматриваемой нами конфигурации оптической антенны эффект экстремального просачивания энергии наблюдается при угле падения волны $\theta_1 = 43,92^\circ$ и толщине золотой плёнки Au $d = 53$ нм.

Рассеянную интенсивность мы будем анализировать в плоскости падения плоской волны $\phi = 0$:

$$I(\theta) = I(\theta, \phi = 0).$$

Конечной целью исследования является установление возможности управления рассеянным оптической антенной излучением. Рассматриваемая антенна имеет те же характеристические размеры, что и антенна, рассмотренная в работе [6], и состоит из пяти сфероидальных частиц: рефлектора, активного элемента и трёх директоров. Антенна подобного типа называется оптической антенной типа Уда-Яги. Длина меньшей оси сфероидов $D = 48$ нм одинакова для всех частиц. Длина большей оси рефлектора $L_r = 120$ нм, активного элемента – $L_f = 102$ нм, директоров – $L_d = 72$ нм. Центры этих сфероидальных частиц лежат на одной прямой, параллельной оси OX , которую мы будем называть осью антенны (рис. 1). При этом большие оси рефлектора и директоров во всех рассматриваемых случаях перпендикулярны оси OX , а большая ось активного элемента образует с осью OY угол ϕ_f .

Начнём наше исследование с анализа интенсивности рассеяния плоской волны только одной частицей – активным элементом, в зависимости от угла падения плоской волны θ_1 и угла ϕ_f (рис. 2). На-

правление падения указано стрелкой. График интенсивности построен в логарифмическом масштабе.

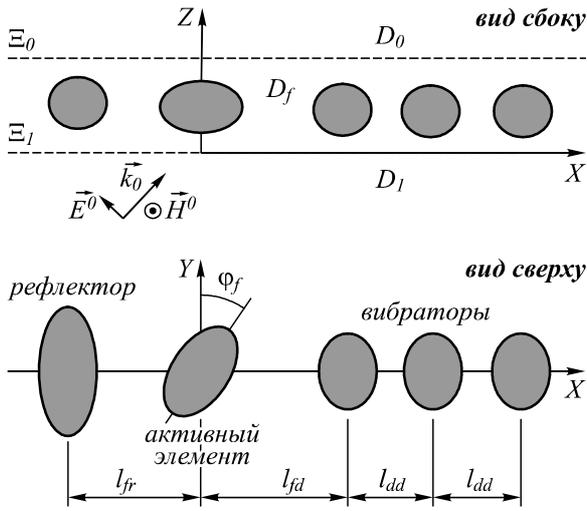


Рис. 1. Оптическая антенна

Из рис. 2 видно, что при нормальном ($\theta_1 = 0$) падении волны на границу раздела Ξ_1 расположение активного элемента вдоль оси OX ($\phi_f = \pi/2$, кривая 2) увеличивает интенсивность почти на порядок по сравнению со случаем, когда активный элемент расположен вдоль оси OY ($\phi_f = 0$, кривая 1). Падение волны под углом $\theta_1 = 43,92^\circ$, в случае возникновения эффекта экстремального просачивания, приводит к увеличению интенсивности почти на порядок в сравнении со случаем нормального падения волны на границу. В этом случае кривая 3 соответствует расположению активного элемента вдоль оси OY ($\phi_f = 0$), кривая 4 – вдоль оси OX ($\phi_f = \pi/2$).

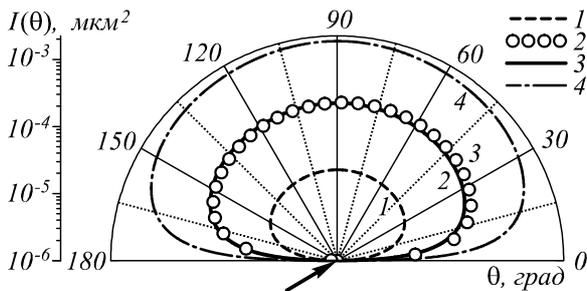


Рис. 2. Интенсивность рассеяния на активном элементе. $\phi_f = 0, \theta_1 = 0$ (1); $\phi_f = \pi/2, \theta_1 = 0$ (2); $\phi_f = 0, \theta_1 = 43,92^\circ$ (3); $\phi_f = \pi/2, \theta_1 = 43,92^\circ$ (4)

Ввиду того, что наибольшая интенсивность рассеяния активным элементом достигается при падении волны под углом $\theta_1 = 43,92^\circ$, дальнейшие расчёты будем проводить только для этого угла падения волны.

Рассмотрим теперь зависимость интенсивности рассеяния на системе из двух элементов – рефлекторе и активном элементе – в зависимости от угла ϕ_f при фиксированном расстоянии между этими частицами $l_{fr} = 80$ нм (рис. 3). Угол ϕ_f принимает сле-

дующие значения: $\phi_f = 0$ (кривая 1), $\phi_f = \pi/8$ (кривая 2), $\phi_f = \pi/4$ (кривая 3), $\phi_f = \pi/2$ (кривая 4). Как видно, по мере поворота активного элемента интенсивность рассеяния увеличивается, а направление рассеяния изменяется.

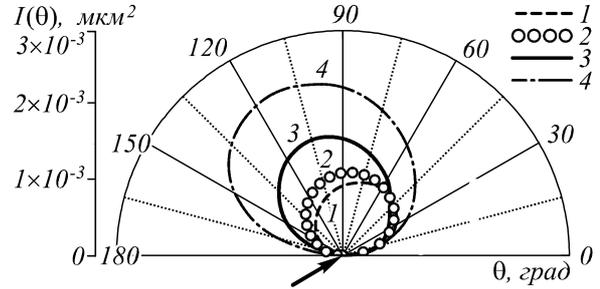


Рис. 3. Интенсивность рассеяния на системе «активный элемент – рефлектор» в зависимости от угла ϕ_f . ($l_{fr} = 80$ нм, $\theta_1 = 43,92^\circ$): $\phi_f = 0$ (1); $\phi_f = \pi/8$ (2); $\phi_f = \pi/4$ (3); $\phi_f = \pi/2$ (4)

Исследуем поведение системы «рефлектор – активный элемент» при фиксированном угле $\phi_f = \pi/2$ в зависимости от расстояния l_{fr} между этими частицами (рис. 4): $l_{fr} = 80$ нм (кривая 1), $l_{fr} = 120$ нм (кривая 2), $l_{fr} = 160$ нм (кривая 3), $l_{fr} = 200$ нм (кривая 4), $l_{fr} = 300$ нм (кривая 5), $l_{fr} = 400$ нм (кривая 6). Из рис. 4 следует, что с увеличением расстояния происходит смена направления излучения. При этом при $l_{fr} > 400$ нм появляется довольно большой побочный лепесток излучения, поэтому дальнейшее увеличение расстояния нецелесообразно.

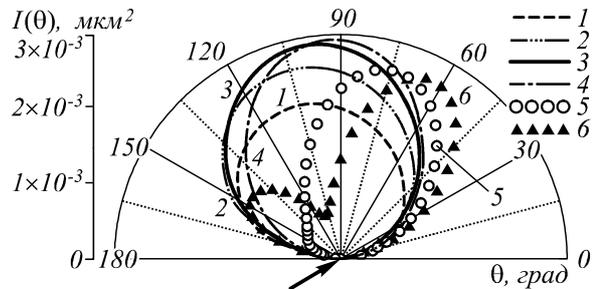


Рис. 4. Интенсивность рассеяния на системе «активный элемент – рефлектор» в зависимости от расстояния l_{fr} . ($\phi_f = \pi/2, \theta_1 = 43,92^\circ$): $l_{fr} = 80$ нм (1); $l_{fr} = 120$ нм (2); $l_{fr} = 160$ нм (3); $l_{fr} = 200$ нм (4); $l_{fr} = 300$ нм (5); $l_{fr} = 400$ нм (6)

Рассмотрим теперь зависимость интенсивности рассеяния на системе из двух элементов – директоре и активном элементе – в зависимости от угла ϕ_f при фиксированном расстоянии между этими частицами $l_{fd} = 80$ нм (рис. 5). Угол ϕ_f принимает следующие значения: $\phi_f = 0$ (кривая 1), $\phi_f = \pi/8$ (кривая 2), $\phi_f = \pi/4$ (кривая 3), $\phi_f = \pi/2$ (кривая 4). Из графика видно, что по мере поворота активного элемента интенсивность рассеяния практически не меняется.

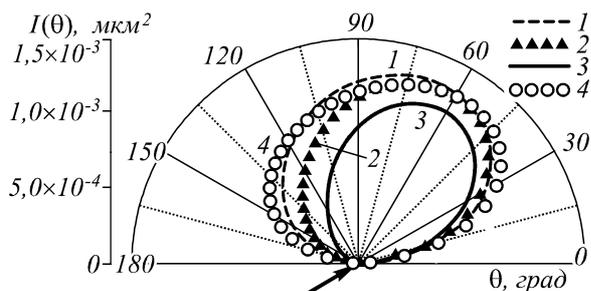


Рис. 5. Интенсивность рассеяния на системе «активный элемент – директор» в зависимости от угла ϕ_f ($l_{fd} = 80$ нм, $\theta_1 = 43,92^\circ$): $\phi_f = 0$ (1); $\phi_f = \pi/8$ (2); $\phi_f = \pi/4$ (3); $\phi_f = \pi/2$ (4)

Исследуем поведение системы директор - активный элемент при фиксированном угле $\phi_f = \pi/2$ в зависимости от расстояния l_{fr} между этими частицами (рис. 6): $l_{fd} = 80$ нм (кривая 1), $l_{fd} = 200$ нм (кривая 2), $l_{fd} = 300$ нм (кривая 3), $l_{fd} = 400$ нм (кривая 4), $l_{fd} = 500$ нм (кривая 5). Из рисунка следует, что с увеличением расстояния происходит смена направления излучения, а также увеличивается интенсивность рассеяния. При этом при $l_{fd} > 500$ нм появляется довольно большой побочный лепесток излучения, поэтому дальнейшее увеличение расстояния нецелесообразно.

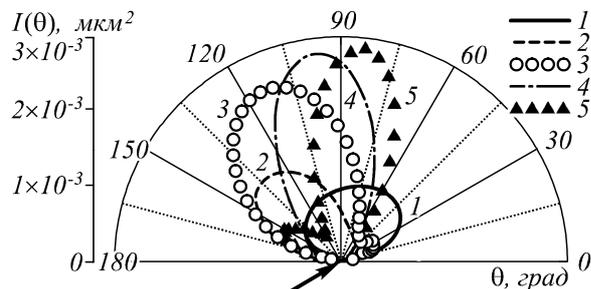


Рис. 6. Интенсивность рассеяния на системе «активный элемент – директор» в зависимости от расстояния l_{fd} ($\phi_f = \pi/2$, $\theta_1 = 43,92^\circ$): $l_{fd} = 80$ нм (1); $l_{fd} = 200$ нм (2); $l_{fd} = 300$ нм (3); $l_{fd} = 400$ нм (4); $l_{fd} = 500$ нм (5)

Из проведённого анализа интенсивности рассеяния на системах «рефлектор – активный элемент» и «директор – активный элемент» при угле $\phi_f = \pi/2$, можно прийти к умозаключению, что, располагая рефлектор вблизи от активного элемента, а директора, наоборот, вдали, интенсивность должна рассеиваться в направлении, не совпадающем с направлением падающей волны. Это умозаключение нашло подтверждение (рис. 7) в результате численного моделирования при следующих расстояниях между элементами: $l_{fr} = 88$ нм, $l_{fd} = 192$ нм, $l_{dd} = 96$ нм.

Следуя этой же логике, расположение рефлектора вдали, а директоров, наоборот, вблизи от активного элемента должно привести к рассеянию в направлении падающей волны. Что также нашло под-

тверждение (рис. 8) при значениях параметров: $l_{fr} = 300$ нм, $l_{fd} = 88$ нм, $l_{dd} = 60$ нм.

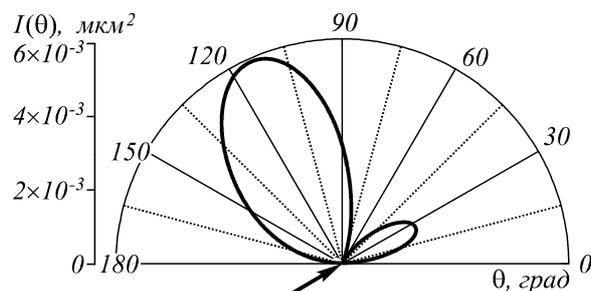


Рис. 7. Интенсивность рассеяния оптической антенной типа Уда-Яги из пяти элементов; $l_{fr} = 88$ нм, $l_{fd} = 192$ нм, $l_{dd} = 96$ нм, $\theta_1 = 43,92^\circ$, $\phi_f = \pi/2$

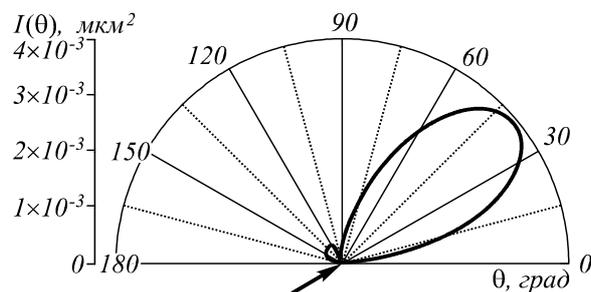


Рис. 8. Интенсивность рассеяния оптической антенной типа Уда-Яги из пяти элементов; $l_{fr} = 300$ нм, $l_{fd} = 88$ нм, $l_{dd} = 60$ нм, $\theta_1 = 43,92^\circ$, $\phi_f = \pi/2$

Стоит отметить, что значения расстояний между частицами в ходе численного моделирования рассеяния антенной типа Уда-Яги выбирались из соображений удобства и привязанности к длине меньшей оси сфероидов $D = 48$ нм. Эти значения, как и размеры самих частиц, не являются критическими, и изменение в расстояниях в пределах 5–10 нм не приводит к значительному изменению характера рассеяния. Существенным моментом в этом плане является то, что индекс рефракции частиц имеет высокую действительную и малую мнимую части. Поэтому можно выбрать любой другой материал частиц, обладающий указанными выше свойствами.

Заключение

В статье предложена альтернативная антенне Уда-Яги схема оптической антенны, основанная на эффекте экстремального просачивания энергии, существование которого слабо зависит от толщины плёнки, а также от размеров и материала расположенных в плёнке диэлектрических рассеивателей, и определяется лишь материалом плёнки и углом падения волны.

В ходе численного моделирования установлено, что, варьируя параметры антенны, можно изменять направление рассеянного оптической антенной излучения и его интенсивность.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 09-01-00318.

Литература

1. **Sarid, D.** Modern introduction to Surface Plasmons. Theory, Mathematica Modeling, and Applications / D. Sarid, W. Challener. – Cambridge, Cambridge University Press, 2010. – 386 p.
2. **Климов, В.В.** Наноплазмоника / В.В. Климов – М.: Физматлит, 2010. – 480 с.
3. **Park, Q.** Optical antennas and plasmonics / Q-Han Park // Contemporary physics. – 2009. – Vol. 50, N 2. – P. 407-423.
4. **Taminiau, T.H.** Enhanced directional excitation and emission of single emitters by a nano-optical Yagi-Uda antenna / T.H. Taminiau, F.D. Stefani, N.F. van Hulst // Optics Express. – 2008. – Vol. 16, N 14. – P. 10858-10866.
5. **Hofmann, H.F.** Design parameters for a nano-optical Yagi-Uda antenna / H.F. Hofmann, T. Kosako, Y. Kadoya // New Journal of Physics. – 2007. – Vol. 9. – P. 217.
6. **Hofmann, H.F.** Directional control of light by a nano-optical Yagi-Uda antenna / H.F. Hofmann, T. Kosako, Y. Kadoya // Nature Photonics. – 2010. – Vol. 4, N 5. – P. 312-315.
7. **Ebbesen, T.W.** Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays / T.W. Ebbesen, H.J. Lerec, H.F. Ghaemi [et al.] // Nature. – 1998. – Vol. 391, N. 6668. – P. 667-669.
8. **Wannemacher, R.** Plasmon-supported transmission of light through nanometric holes in metallic thin films / R. Wannemacher // Opt. Comm. – 2001. – Vol. 195. – P. 107-118.
9. **Raether, H.** Surface plasmon on smooth and rough surfaces and on gratings. Ch. 2 / H. Raether. – Berlin: Springer, 1988.
10. **Гришина, Н.В.** Математическая модель слоистой структуры с наноразмерным отверстием / Н.В. Гришина, Ю.А. Ерёмин, А.Г. Свешников // Вест. Моск. Ун-та. Сер. 15. Выч. Матем. и Киберн. – 2008. – № 4. – С. 11-16.
11. **Гришина, Н.В.** Эффект экстремального просачивания энергии через проводящую плёнку с наноразмерной неоднородностью в области неизлучающих волн / Н.В. Гришина, Ю.А. Ерёмин, А.Г. Свешников // ДАН, 2009. – Т. 424, № 1. – С. 1-4.
12. **Taflove, A.** Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method / A. Taflove, S. Hagness. – London: Artech House, 2005. – 1038 p.
13. **Jin, J.** The Finite Element Method in Electromagnetics / J. Jin. – Chichester: John Wiley & Sons, 2002. – 780 p.
14. **Hafner, Ch.** Boundary methods for optical nano structures / Ch. Hafner // Phys. Stat. Sol. B. – 2007. – Vol. 244, N 10. – P. 3435-3447.
15. **Chew, W.C.** Waves and fields in inhomogeneous media / W.C. Chew. – NY.: IEEE Press, 1999. – 632 p.
16. **Ерёмин, Ю.А.** Компьютерная технология анализа задач рассеяния методом дискретных источников / Ю.А. Ерёмин, А.Г. Свешников // ЖВМиМФ. – 2000. – Т. 39, № 12. – С. 1842-1856.
17. **Дмитриев, В.И.** Поля в слоистых средах / В.И. Дмитриев. – М.: Изд-во МГУ, 1963. – 131 с.
18. **Барышев, А.В.** Математическая модель оптической антенны на основе метода дискретных источников / А.В. Барышев, Ю.А. Ерёмин // Вест. Моск. Ун-та. Сер. 15. Выч. Мат. и Киберн. – 2011. – № 1. – С. 25-31.
19. **Фарафонов, В.Г.** Рассеяние света осесимметричными частицами: модификация метода поточечной шивки / В.Г. Фарафонов, В.Б. Ильин // Оптика и спектроскопия. – 2006. – Т. 100, № 3. – С. 484-494.

References

1. **Sarid, D.** Modern introduction to Surface Plasmons. Theory, Mathematica Modeling, and Applications / D. Sarid, W. Challener. – Cambridge, Cambridge University Press, 2010. – 386 p.
2. **Klimov, V.V.** Nanoplasmonics / V.V. Klimov. – Moscow: "Fizmatlit" Publisher, 2010. – 480 p. – (in Russian).
3. **Park, Q.** Optical antennas and plasmonics / Q-Han Park // Contemporary physics. – 2009. – Vol. 50, N 2. – P. 407-423.
4. **Taminiau, T.H.** Enhanced directional excitation and emission of single emitters by a nano-optical Yagi-Uda antenna / T.H. Taminiau, F.D. Stefani, N.F. van Hulst // Optics Express. – 2008. – Vol. 16, N 14. – P. 10858-10866.
5. **Hofmann, H.F.** Design parameters for a nano-optical Yagi-Uda antenna / H.F. Hofmann, T. Kosako, Y. Kadoya // New Journal of Physics. – 2007. – Vol. 9. – P. 217.
6. **Hofmann, H.F.** Directional control of light by a nano-optical Yagi-Uda antenna / H.F. Hofmann, T. Kosako, Y. Kadoya // Nature Photonics. – 2010. – Vol. 4, N 5. – P. 312-315.
7. **Ebbesen, T.W.** Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays / T.W. Ebbesen, H.J. Lerec, H.F. Ghaemi [et al.] // Nature. – 1998. – Vol. 391, N. 6668. – P. 667-669.
8. **Wannemacher, R.** Plasmon-supported transmission of light through nanometric holes in metallic thin films / R. Wannemacher // Opt. Comm. – 2001. – Vol. 195. – P. 107-118.
9. **Raether, H.** Surface plasmon on smooth and rough surfaces and on gratings. Ch. 2 / H. Raether. – Berlin: Springer, 1988.
10. **Grishina, N.V.** A mathematical model of a layered structure with a nanodimensional hole / N.V. Grishina, Yu.A. Eremin, A.G. Sveshnikov // Moscow Univ. Comp. Math. And Cybern., – 2008. – Vol. 32, N 4. – P. 194-200. – (in Russian).
11. **Grishina, N.V.** Extraordinary optical transmission through a conducting film with a nanometric inhomogeneity in the evanescent wave region / N.V. Grishina, Yu.A. Eremin, A.G. Sveshnikov // Doklady Mathematics. – 2009. – Vol. 79, N 1. – P. 128-131. – (in Russian).
12. **Taflove, A.** Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method / A. Taflove, S. Hagness. – London: Artech House, 2005. – 1038 p.
13. **Jin, J.** The Finite Element Method in Electromagnetics / J. Jin. – Chichester: John Wiley & Sons, 2002. – 780 p.
14. **Hafner, Ch.** Boundary methods for optical nano structures / Ch. Hafner // Phys. Stat. Sol. B. – 2007. – Vol. 244, N 10. – P. 3435-3447.
15. **Chew, W.C.** Waves and fields in inhomogeneous media / W.C. Chew. – NY.: IEEE Press, 1999. – 632 p.
16. **Eremin, Yu.A.** Computer Technology for Analysis of Light Scattering Problems via the Discrete Sources Method / Yu.A. Eremin, A.G. Sveshnikov // Computational Mathematics and Mathematical Physics. – 2000. – Vol. 39, N 12. – P. 1842-1856. – (in Russian).
17. **Dmitriev, V.I.** Fields in Layered Media / V.I. Dmitriev. – Moscow: Moscow State University Publisher, 1963. – 131 p. – (in Russian).
18. **Baryshev, A.V.** Mathematical Model of an Optical Antenna Based on the Discrete Sources Method / A.V. Baryshev, Yu.A. Eremin // Moscow Univ. Comp. Math. And Cybern. – 2011. – Vol. 35, N 1. – P. 22-29. – (in Russian).
19. **Farafonov, V.G.** Scattering of light by axially symmetric particles: Modification of the point-matching method / V.G. Farafonov, V.B. Il'in // Optics and Spectroscopy. – 2006. – Vol. 100, N 3. – P. 437-447. – (in Russian).

**ANALYZING THE SCATTERING OF LIGHT BY A CLUSTER OF NANOPARTICLES
IN THIN METAL FILM WITH DISCRETE SOURCES METHOD**

*A.V. Baryshev, Yu.A. Eremin
Lomonosov Moscow State University*

Abstract

Based on the Discrete Sources Method mathematical model of an optical antenna has been considered and realized. The considered antenna consisted of a nanoparticles cluster located inside a thin metal film which was disposed on a glass substrate. Scattered intensity obtained via computer modeling is presented, including the case of evanescent waves. It has been established that by varying the cluster geometry the scattered light could be concentrated in a wide range of directions.

Key words: optical antenna, discrete sources method, nanoparticles, extreme transmission effect.

Сведения об авторах

Ерёмин Юрий Александрович, 1947 года рождения. В 1972 году окончил физический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова. Доктор физико-математических наук (1989 год). Работает в должности ведущего научного сотрудника лаборатории вычислительной электродинамики факультета вычислительной математики и кибернетики МГУ им. М.В. Ломоносова. Область научных интересов: прямые и обратные задачи рассеяния волн, математические модели нанооптики и биофотоники. Автор трёх монографий, более 300 научных работ, в том числе более 150 статей в реферируемых научных журналах и ряда крупных обзоров по прямым и обратным задачам теории рассеяния.

E-mail: eremin@cs.msu.su .

Yuri Alexandrovich Eremin (b. 1947) graduated from Lomonosov Moscow State University in 1972. He received his Candidate in Physics & Math (1973) and Doctor in Physics & Math (1989) from Lomonosov Moscow State University. He holds a position of Principal Research Scientist at the Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics in Lomonosov Moscow State University. His research interests are focused on direct and inverse boundary-value scattering problems, mathematical models of nanophotonics and biophotonics. He is a co-author of more than 150 scientific papers, 3 monographs, and several large surveys on direct and inverse boundary-value scattering problems.



Барышев Александр Вячеславович, 1985 года рождения. В 2008 году окончил физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова по специальности «Физика». Кандидат физико-математических наук (2011 год). Работает в должности ведущего программиста кафедры математики физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова. Область научных интересов: математическое моделирование, численные методы, теория дифракции.

E-mail: alexandr.baryshev@gmail.com .

Alexandr Vyacheslavovich Baryshev (b. 1985) graduated from Lomonosov Moscow State University in 2008. He received his Candidate in Physics & Math (2011) from Lomonosov Moscow State University. He holds a position of Senior Programmer at the Faculty of Physics. His research interests are focused on mathematical modeling, numerical methods and scattering theory.

Поступила в редакцию 28 июня 2011 г.