

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПАРЫ НАНОЧАСТИЦ НА ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЕ ПОЛЕ В БЛИЖНЕЙ ЗОНЕ МЕТОДОМ ВЕКТОРНЫХ КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

К.С. Курочка¹

¹Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого, Гомель, Республика Беларусь

Аннотация

В работе предлагается математическая модель на основе векторного метода конечных элементов для исследования распределения электромагнитного поля в ближней зоне пары сферических наночастиц. Данная модель позволила разработать алгоритмы и соответствующее программное обеспечение. Была проведена верификация, показавшая, что расхождение результатов исследования предлагаемой математической модели и имеющихся данных расчётов по аналитическим формулам согласно теории Ми (G. Mie) для однородных сферических наночастиц не превышает 10%. С помощью созданного программного обеспечения проведён вычислительный эксперимент с целью определения расположения пары металлических наночастиц, при котором интенсивность электромагнитного поля в ближней зоне будет достигать наибольшего значения. Достоинством предлагаемой математической модели и методики её применения является использование в качестве конечных элементов тетраэдров, позволяющих с достаточной для практических целей точностью аппроксимировать неоднородную структуру наноматериала. Кроме того, обеспечивается непрерывность во всей расчётной области тангенциальной компоненты электромагнитного поля.

Ключевые слова: математическое моделирование, рассеяние света малыми частицами, электромагнитное поле, численное решение, векторный метод конечных элементов.

Цитирование: Курочка, К.С. Численное моделирование влияния пары наночастиц на электромагнитное поле в ближней зоне методом векторных конечных элементов / К.С. Курочка // Компьютерная оптика. – 2018. – Т. 42, № 4. – С. 542-549. – DOI: 10.18287/2412-6179-2018-42-4-542-549.

Введение

Наноконкомпозиты с частицами восстановленных металлов находят широкое применение в качестве оптоэлектронных элементов, оптических сенсоров, приборов для регистрации оптических сигналов, оптических наноантенн и пр. [1]. Данные материалы представляют собой сложные структуры, содержащие огромное число диэлектрических и металлических наночастиц [2–4]. Исследование их оптических свойств представляет собой сложную и трудоёмкую задачу, решение которой целесообразно осуществлять посредством математического моделирования на основе метода декомпозиции. Такой подход позволяет рассматривать процессы взаимодействия электромагнитного излучения оптического диапазона как с отдельными наночастицами диэлектриков и восстановленных металлов, так и с их ограниченными ансамблями, а затем обобщить результаты на весь материал в целом.

В настоящее время всё большее распространение получают композиционные SiO₂-материалы, структурированные ионами металлов или наночастицами восстановленных металлов [2]. Благодаря присутствию пространственного наномасштаба вещества в этих материалах может происходить локализация и усиление оптических полей. Кроме того, по своей природе металлические наночастицы обладают собственными колебаниями с частотами в оптической области от ультрафиолетового до инфракрасного диапазонов [3, 5].

Значительную часть времени при разработке и синтезе подобных материалов занимает производство и изучение их прототипов. Натурные эксперименты

позволяют провести физические измерения оптических свойств [6, 7].

Основным объектом исследования является электромагнитное поле, по распределению которого можно судить об оптических и других важных физических свойствах конкретного тела. Использование на этой стадии компьютерного моделирования в перспективе позволит перейти к созданию новых материалов с заданными свойствами в виртуальном пространстве до проведения натурных экспериментов, что значительно снизит затраты и ускорит процесс их получения [8].

Моделирование распределения электромагнитного поля сводится к решению уравнений Максвелла (J.C. Maxwell) [3, 5]. В настоящее время для решения данной задачи существует ряд численных и аналитических методов [3–16], базирующихся на двух основных подходах. Первый основан на решении уравнений в их дифференциальной форме. Данная группа методов позволяет хорошо учитывать сложную, гетерогенную структуру композитного материала, однако при моделировании в бесконечных или частично ограниченных пространствах применение этих методов приводит к значительным вычислительным затратам. Второй подход основан на решении уравнений Максвелла в интегральной форме.

Достаточно часто используются модифицированные методы расширения теории Ми (рассеяние на единичной сфере) для множественного рассеяния на сферах [17–20].

Основными численными методами, применяемыми для решения уравнений Максвелла, являются: метод приближения дискретных диполей (DDA) [14, 21], ме-

тод нулевого поля (NFM) [10, 21], метод Т-матрицы [13, 22], метод граничных элементов (BEM) [23], метод конечных элементов (FEM) [9, 15, 16, 24], метод конечных разностей во временной области (FDTD) [8, 12]. Существует множество работ, посвящённых сравнительному анализу данных методов [8–11, 20].

В настоящее время практически все методы реализованы в виде программного продукта, причём на каждый метод имеется множество реализаций [9, 10, 25]. Например, метод DDA реализован в пакете DDSCAT [10], метод NFM – в пакете NFM-DS [10, 21], метод Т-матриц – в пакете MSTM [22], метод FDTD реализован в пакете Meep [26] и т.д.

Наибольшую популярность и распространение получил метод FDTD. Однако при исследовании распределения электромагнитных полей в композитных материалах на основе высококремнеземных стекол, синтезированных золь-гель методом, и сферических наночастиц восстановленных металлов (на примере Ag, Cu) имеется ряд сложностей, связанных с особенностями метода конечных разностей. Во-первых, размеры шага дискретной сетки должны быть значительно меньше длины волны, а расчётная область зачастую выходит из наномасштаба, что, в конечном итоге, приводит к необходимости где-то хранить, а затем и решать систему линейных алгебраических уравнений большой размерности (порядка 10^7). Процесс решения одной подобной системы на вычислительном кластере занимает несколько суток [8]. Это фактически делает невозможным одновременное исследование полей как в «ближней» зоне, так и на значительном расстоянии от источника. Во-вторых, восстановленные металлические частицы имеют сферическую форму, а также содержат выщербины, «пещеры», пустоты [2], что практически невозможно учесть, используя FDTD.

Метод конечных элементов позволяет частично преодолеть указанные недостатки за счёт использования конечных элементов различного размера. Для ближней зоны и самих частиц – более мелкие (размером гораздо меньше длины падающей волны), а для дальней зоны – большего размера. Это позволяет в целом получать систему линейных алгебраических уравнений значительно меньших размерностей для тех же самых задач, чем в методе FDTD. И, в конечном итоге, значительно ускорять время нахождения решения. При использовании разнородных конечных элементов является актуальной задача обеспечения непрерывности напряжённости электрического поля на границах между элементами. Поэтому необходимо найти такие функции формы, которые обеспечивали бы непрерывность напряжённости электрического поля как в «ближней» зоне наночастицы, так и в «дальней».

1. Постановка задачи

Рассмотрим золь-гель стекло, содержащее наночастицы восстановленных металлов [2]. На материал падает плоская монохроматическая волна. Воспользуемся методом декомпозиции и будем определять распределение электромагнитного поля, возникающе-

го в ближней зоне пары наночастиц. Начало координат поместим на равном удалении от центра двух частиц. В расчётной области выделим принципиально отличающиеся элементы: частицы, «ближнюю» и «дальнюю» зоны для частиц, полностью поглощающий слой (рис. 1). В качестве граничных условий воспользуемся условиями поглощения (ABC – *absorbing boundary condition*), реализованными в виде условия излучения Зоммерфельда (A. Sommerfeld) [9, 15, 16, 27, 28].

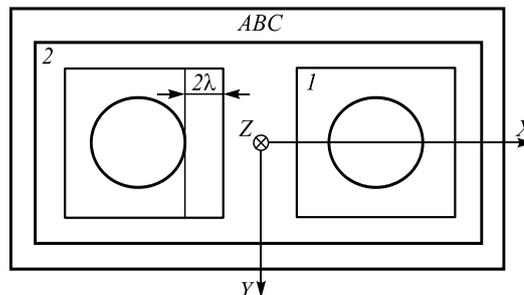


Рис. 1. Схема расчётной области (сечение расчётной 3D-области в координатной плоскости XY)

«Ближняя» зона частицы (область 1, рис. 1) представляет собой параллелепипед, описывающий сферу радиуса $R + 2\lambda$, где R – радиус наночастицы, λ – длина падающей волны. Размеры «дальней» зоны (область 2, рис. 1) определяются исходя из реализации граничных условий поглощения и представляют собой также параллелепипед с длиной ребра $7R$.

Напряжённость электрического поля, создаваемого электрическим током с амплитудой \mathbf{J}_{imp} в области Ω , которая характеризуется электрической ϵ и магнитной μ постоянными, может быть описана с помощью уравнений Максвелла [3, 5, 16]:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -i\omega\mu\mathbf{H}; \tag{1}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = i\omega\epsilon\mathbf{E} + \mathbf{J}_{\text{imp}}; \tag{2}$$

$$\nabla \cdot (\epsilon\mathbf{E}) = -\frac{1}{i\omega} \nabla \cdot \mathbf{J}_{\text{imp}}; \tag{3}$$

$$\nabla \cdot (\mu\mathbf{H}) = 0, \tag{4}$$

где \mathbf{E} – напряжённость электрического поля; \mathbf{H} – напряжённость магнитного поля; ω – частота источника; i – мнимая единица; ∇ – Гамильтонов (W.R. Hamilton) оператор.

Исследуемая область может быть как двух-, так и трёхмерной. Для определения напряжённости электрического поля \mathbf{E} необходимо решить уравнения Максвелла (1)–(4) с учётом граничных условий.

Типовые граничные условия для электрических полей включают однородные условия Дирихле (P.G.L. Dirichlet) на идеально проводящей поверхности, а также смешанные условия на границе поверхности, обладающей волновым сопротивлением. Формулировку этих граничных условий можно записать в виде [15, 16]

$$\mathbf{n} \times \mathbf{E} = \mathbf{P}; \tag{5}$$

$$\mathbf{n} \times \left(\frac{1}{\mu_r} \nabla \times \mathbf{E} \right) + \frac{ik_0}{\eta_r} \mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \mathbf{E}) = \mathbf{R}_N, \tag{6}$$

где \mathbf{n} – единичный вектор нормали к границам областей и подобластей; \mathbf{P} – установленные значения для компонент поля на Γ_D ; η_r – нормальный импеданс поверхности на Γ_N ; \mathbf{R}_N – известные функции, описанные на границе источника.

За счёт исключения напряжённости магнитного поля \mathbf{H} в (1) и преобразования (2) можно получить волновое уравнение, называемое уравнением Гельмгольца (H. Helmholtz) [15, 16]:

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\mu_r} \nabla \times \mathbf{E} \right) - k_0^2 \varepsilon_r \mathbf{E} = -ik_0 Z_0 \mathbf{J}_{\text{imp}} \text{ на } \Omega, \quad (7)$$

где $\mu_r = \mu / \mu_0$ и $\varepsilon_r = \varepsilon / \varepsilon_0$ – соответственно относительные магнитная и электрическая постоянные; $k_0 = \omega \sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}$ и $Z_0 = \sqrt{\mu_0 / \varepsilon_0}$ – волновое число и волновое сопротивление (импеданс вакуума).

Используя уравнение (7) и граничные условия (5), (6), можно получить вариационную форму волнового уравнения [15, 16]:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left[\frac{1}{\mu_r} (\nabla \times \mathbf{W}_j) \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) - k_0^2 \varepsilon_r \mathbf{W}_j \cdot \mathbf{E} \right] d\Omega = \\ & = - \int_{\Gamma_N} \left[\frac{ik_0}{\eta_r} (\mathbf{n} \times \mathbf{W}_j) \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) + \mathbf{W}_j \cdot \mathbf{R}_N \right] d\Gamma + \\ & + \int_{\Gamma_D} \frac{1}{\mu_r} (\mathbf{n} \times \mathbf{W}_j) \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) d\Gamma - ik_0 Z_0 \int_{\Omega} \mathbf{W}_j \cdot \mathbf{J}_{\text{imp}} d\Omega, \end{aligned} \quad (8)$$

где \mathbf{W}_j – весовая функция.

2. Рёберный конечный элемент в форме тетраэдра

В силу того, что рассматриваемая область состоит из подобластей (частицы, подложка) с различными значениями ε и μ , на их внутренних границах необходимо выполнение условия непрерывности тангенциальной составляющей полей.

При использовании скалярных узловых конечных элементов [16, 24] выполнить это условие весьма проблематично. Поэтому для решения задачи предлагается использовать рёберные (векторные) конечные элементы (рис. 2) [15].

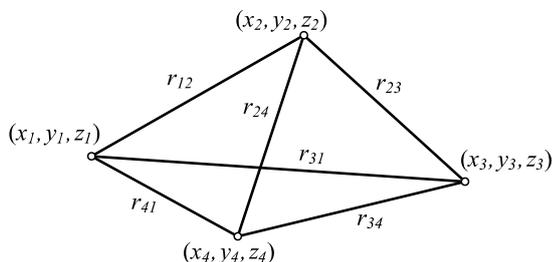


Рис. 2. Векторный конечный элемент в форме тетраэдра

Вершины конечного элемента имеют координаты (x_i, y_i, z_i) , где $i = \overline{1, 4}$, а рёбра обозначены векторами \mathbf{r}_{lm} , где l – номер вершины, из которой выходит ребро, а m – номер вершины, в которое входит ребро.

Представим напряжённость электрического поля в виде:

$$\mathbf{E} = (E_x, E_y, E_z) = E_x \mathbf{i} + E_y \mathbf{j} + E_z \mathbf{k}.$$

Будем аппроксимировать на конечном элементе компоненты напряжённости электрического поля следующими вектор-функциями:

$$\begin{aligned} E_x(\mathbf{r}) &= \alpha_0 + \alpha_1 r_x + \alpha_2 r_y + \alpha_3 r_z + \alpha_4 r_x r_y + \alpha_5 r_x r_z; \\ E_y(\mathbf{r}) &= \alpha_6 + \alpha_7 r_x + \alpha_8 r_y + \alpha_9 r_z + \alpha_{10} r_x r_y + \alpha_{11} r_y r_z; \\ E_z(\mathbf{r}) &= \alpha_{12} + \alpha_{13} r_x + \alpha_{14} r_y + \alpha_{15} r_z + \alpha_{16} r_x r_z + \alpha_{17} r_y r_z, \end{aligned} \quad (9)$$

где $\mathbf{r} = (r_x, r_y, r_z)$.

Выражения (9) можно переписать в матричной форме:

$$\mathbf{E} = [\mathbf{A}] \boldsymbol{\alpha}, \quad (10)$$

где

$$[\mathbf{A}] = \begin{bmatrix} 1 & r_x & r_y & r_z & r_x r_y & r_x r_z & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & r_x & r_y & r_z & r_x r_z & r_y r_z \\ \dots & \dots \end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{\alpha}^T = \{ \alpha_0 \quad \alpha_1 \quad \dots \quad \alpha_{17} \}.$$

Так как (10) справедливо для всего тетраэдра, то для его рёбер будем иметь:

$$\mathbf{E}^e = [\mathbf{B}] \boldsymbol{\alpha}, \quad (11)$$

где \mathbf{E}^e – напряжённость электрического поля на рёбрах конечного элемента, $[\mathbf{B}]$ – квадратная матрица размерностью 18 на 18, получаемая из матрицы $[\mathbf{A}]$ последовательной подстановкой координат рёбер (из-за громоздкости здесь не приводится).

Найдём из (11) вектор коэффициентов $\boldsymbol{\alpha}$:

$$\boldsymbol{\alpha} = [\mathbf{B}]^{-1} \mathbf{E}^e. \quad (12)$$

В локальных координатах, специально введённых для конечного элемента, матрица $[\mathbf{B}]^{-1}$ может быть вычислена аналитически. Однако чтобы избежать операции преобразования координат при ассемблировании глобальной матрицы жёсткости, матрица $[\mathbf{B}]^{-1}$ может быть легко вычислена в глобальной системе координат с достаточной для практического применения точностью.

Подставим (12) в (10):

$$\mathbf{E} = [\mathbf{N}^e] \mathbf{E}^e, \quad (13)$$

где

$$[\mathbf{N}^e] = [\mathbf{A}] [\mathbf{B}]^{-1}, \quad (14)$$

$[\mathbf{N}^e]$ – матрица размерностью 3 на 18, содержащая функции формы в глобальной системе координат конкретного конечного элемента в форме тетраэдра.

Электрическое поле \mathbf{E} в области Ω может быть найдено по формуле [15]

$$\mathbf{E} = \sum_{l=1}^{N_{\text{edge}}} \mathbf{N}_l \mathbf{E}_l + \sum_{l=1}^{N_D} \mathbf{N}_l^D \mathbf{E}_l^D, \quad (15)$$

где N_{edge} – число уникальных рёбер в дискретизованной области, исключая те рёбра, которые расположе-

ны на Γ_D ; \mathbf{E}_l – значение электрического поля на l -м ребре; \mathbf{N}_l – вектор-функция формы, состоящая из трёх элементов, для l -го ребра; N_D – количество рёбер на Γ_D ; \mathbf{N}_l^D и \mathbf{E}_l^D – соответственно векторная базисная функция и значение поля на Γ_D .

В качестве весовых функций \mathbf{W}_j в (8) примем \mathbf{N}_j :

$$\mathbf{W}_j = \mathbf{N}_j, j = \overline{1, N_{edge}}. \quad (16)$$

Подставив (15) и (16) в (8), получим

$$\sum_{l=0}^{N_{edge}} \mathbf{K}_{ml} \mathbf{E}_l = \mathbf{b}_m, j = \overline{1, N_{edge}}, \quad (17)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{ml} = & \int_{\Omega} \left[\frac{1}{\mu_r} (\nabla \times \mathbf{N}_m) \cdot (\nabla \times \mathbf{N}_l) - k_0^2 \varepsilon_r \mathbf{N}_m \cdot \mathbf{N}_l \right] d\Omega + \\ & + \int_{\Gamma_N} \left[\frac{ik_0}{\eta_r} (\mathbf{n} \times \mathbf{N}_m) (\nabla \times \mathbf{N}_l) \right] d\Gamma, \\ \mathbf{b}_m = & - \sum_{l=1}^{N_D} \mathbf{E}_l^D \int_{\Omega} \left[\frac{1}{\mu_r} (\nabla \times \mathbf{N}_m) \cdot (\nabla \times \mathbf{N}_l^D) - k_0^2 \varepsilon_r \mathbf{N}_m \cdot \mathbf{N}_l^D \right] d\Omega - \\ & - ik_0 Z_0 \int_{\Omega} \mathbf{N}_m \cdot \mathbf{J}_{imp} d\Omega - \int_{\Gamma_N} \mathbf{N}_m \cdot \mathbf{R}_N d\Gamma. \end{aligned}$$

После нахождения функций формы по формуле (14) соотношения (17) представляют собой систему линейных алгебраических уравнений, в общем случае сингулярную.

Для избавления от сингулярности требуется произвести учёт граничных условий (5)–(6).

3. Учёт граничных условий

Для учёта граничных условий воспользуемся изучением Зоммерфельда [3, 9, 15, 27]. Предположим, что ограничивающий слой ABC (рис. 1) располагается достаточно далеко от рассеивателя (сфер или других объектов, размещённых внутри ограниченной области), тогда рассеянное поле удовлетворяет соотношению:

$$\mathbf{n} \times \left(\frac{1}{\mu_r} \nabla \times \mathbf{E}^{sc} \right) + \frac{ik_0}{\eta_r} \mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \mathbf{E}^{sc}) \approx 0, \quad (18)$$

где \mathbf{E}^{sc} – рассеянное поле, которое является разницей между полным и падающим полями:

$$\mathbf{E}^{sc} = \mathbf{E} - \mathbf{E}^{inc}.$$

Тогда (6) примет вид:

$$\mathbf{n} \times \left(\frac{1}{\mu_r} \nabla \times \mathbf{E}^D \right) + \frac{ik_0}{\eta_r} \mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \mathbf{E}^D) = \mathbf{U}^{inc}, \quad (19)$$

где

$$\mathbf{U}^{inc} = \mathbf{n} \times \left(\frac{1}{\mu_r} \nabla \times \mathbf{E}^{inc} \right) + \frac{ik_0}{\eta_r} \mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \mathbf{E}^{inc}). \quad (20)$$

Теперь, исходя из параметров источника излучения, последовательно вычисляем \mathbf{J}_{imp} и \mathbf{E}^{inc} и подставляем в (20).

Решая задачу (19), находим \mathbf{E}^D .

Полагая $\mathbf{R}_N = \mathbf{U}^{inc}$ и используя найденные значения \mathbf{E}^D и условия Дирихле (5), исключаем из (17) известные значения вектора напряжённости \mathbf{E} , тем самым в итоге получая систему линейных алгебраических уравнений (17) меньшей размерности и уже с несингулярной матрицей.

Для решения системы уравнений (17) использовался метод сопряжённых градиентов с предобуславливанием Холецкого [29].

4. Верификация предложенной математической модели

Для верификации воспользуемся решением Ми [5] для электрического поля в ближней зоне сферической частицы и решением, полученным с помощью узловых конечных элементов [24].

Рассматривались наночастицы радиусом 40 нм, находящиеся в воздухе ($\varepsilon = 1$), их центры совпадают с центром декартовой системы координат. В качестве металлической наночастицы рассматривалась серебряная (Ag) со значением диэлектрической проницаемости материала $\varepsilon_{NP} = -3,5191 + 0,5798i$.

Для сравнения результатов введём безразмерную величину:

$$\mathbf{E}^* = \frac{|\mathbf{E}|^2}{|\mathbf{E}_0|^2},$$

где \mathbf{E}_0 – векторная амплитуда падающей на наночастицу волны.

Для диэлектрической наночастицы выбрано значение $\varepsilon_{NP} = 3,5191 + 0,5798i$.

Для расчёта параметров частиц использовалась модель Друде – Лоренца.

Расчётная область дискретизировалась тетраэдрами для каждой из зон (рис. 1). Граничные условия определялись из решения задачи (19). Результаты расчётов представлены на рис. 3, 4.

Расхождение численного решения согласно предложенной математической модели и решения Ми не превышало 10%, между интенсивностью электромагнитного поля, найденного с применением скалярных конечных элементов [24], – 15% (рис. 3, 4).

Таким образом, проведённая верификация показала возможность применения разработанной математической модели для исследования распределения электромагнитного поля в ближней зоне сферических наночастиц.

5. Исследование влияния пары наночастиц на интенсивность электромагнитного поля

Рассматривалась задача определения влияния двух серебряных наночастиц в золь-гель стекле [2] на электромагнитное поле в ближней зоне.

Возбуждение осуществлялось плоской линейно поляризованной вдоль оси X с длиной волны 405 нм.

Изначально расчётная область была выбрана в форме куба с длиной ребра 5 мкм. В результате она была дискретизирована на 162 миллиона тетраэдров, что привело к матрице системы в (17) размерностью 81812703

неизвестных, решение которой осуществлялось в вычислительном кластере [8] распределенным методом Гаусса с циклическим размещением по строкам.

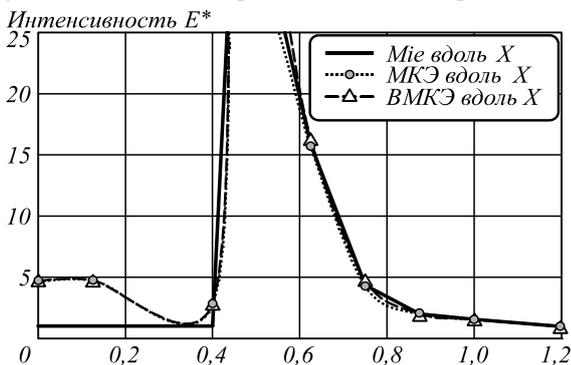


Рис. 3. Зависимость интенсивности электромагнитного поля в ближней зоне от расстояния от центра металлической наночастицы вдоль оси X (10^{-7} м)

В ходе проводимых вычислительных экспериментов размер расчётной области уменьшался до тех пор, пока получаемые результаты не отличались от первоначальных не более, чем на 10%.

В конечном итоге было получено, что расчётная область может быть выбрана в форме параллелепипеда размерами $2500 \times 1250 \times 1250$ нм. Дискретизация проводилась конечными элементами различных размеров в зависимости от зоны (рис. 1). Количество уз-

лов в этом случае составило 508032. После учёта граничных условий размерность матрицы системы (17) в проводимом исследовании не превышала одного миллиона неизвестных. Для решения использовался метод сопряжённых градиентов с предобуславливанием Холецкого [29].

Результаты моделирования представлены на рис. 5. Для сравнения на графиках приведены значения интенсивности E^* , полученные для одной наночастицы согласно теории Ми.

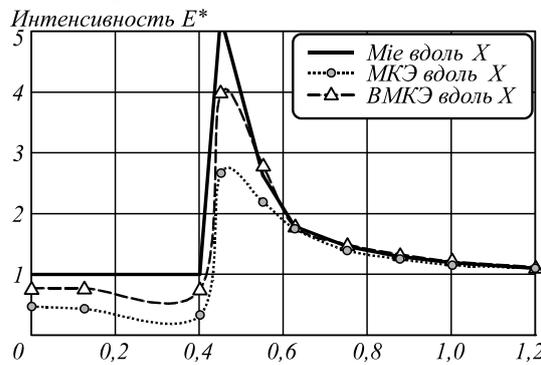


Рис. 4. Зависимость интенсивности электромагнитного поля в ближней зоне от расстояния от центра диэлектрической наночастицы вдоль оси X (10^{-7} м)

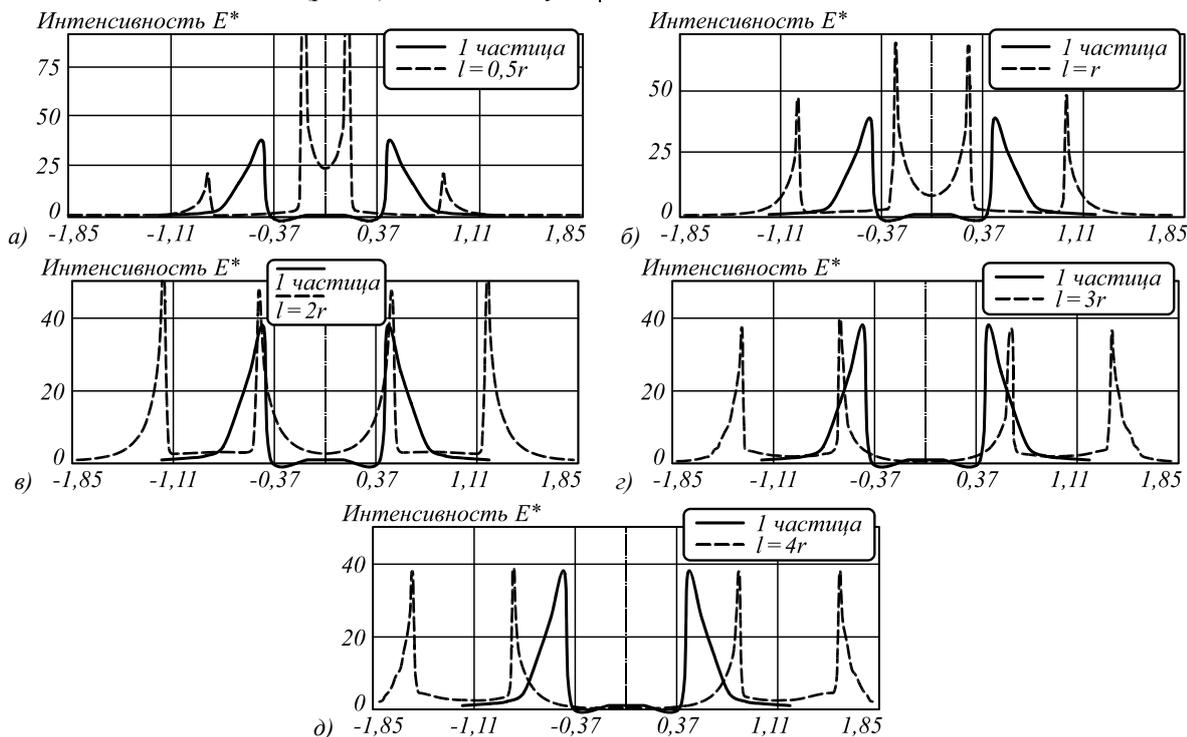


Рис. 5. Зависимость интенсивности электромагнитного поля в ближней зоне двух наночастиц в зависимости от расстояния между ними вдоль оси X (10^{-7} м): расстояние равно половине радиуса частицы (а); радиусу (б); двум радиусам (в); трём (г); четырём (д)

Заключение

Предложенные функции формы и алгоритм построения системы (17) позволяют найти распределение электромагнитного поля, обеспечивая непрерывность его тангенциальной компоненты при переходе

между границами конечных элементов. Это позволяет вычислять распределение полей в ближней зоне наночастиц, где интенсивность E^* принимает значительные значения, приводящие к переполнению вещественных типов данных при использовании других

методов. Кроме того, становится возможным использовать нерегулярный шаг сетки, увеличивая размер конечных элементов в «дальней» зоне, что приводит к снижению размерности задачи и уменьшению времени нахождения решения. При этом можно моделировать не только наночастицы сферической формы, но и любой произвольной, дискретизируя их совокупностью разноразмерных тетраэдров. Таким образом, появляется возможность учёта наличия выщербин, «пещер» и полостей у наночастиц.

В ходе вычислительного эксперимента был определён размер расчётной области, обеспечивающий минимальное число узлов конечно-элементной сетки. Выделены «ближняя» и «дальняя» зона частицы (рис. 1), представляющие собой кубы с длиной ребра соответственно $R+2\lambda$ и $8R+2\lambda$. При этом при дискретизации «дальней» зоны возможно использовать конечные элементы в 2 раза большего размера, чем при дискретизации «ближней». Это позволит значительно снизить размерность получаемой системы алгебраических уравнений (17).

При исследовании влияния расположения пары наночастиц на интенсивность электромагнитного поля расстояние между частицами варьировалось от 0,5 радиуса частицы (20 нм) до 10. Численные результаты показали, что при расстоянии между частицами свыше 4 радиусов влияние на электромагнитное поле практически отсутствует, а значение интенсивности сопоставимо с интенсивностью электромагнитного поля одной частицы.

Литература

1. **Краснок, А.Е.** Оптические наноантенны / А.Е. Краснок, И.С. Максимов, А.И. Денисюк, П.А. Белов, А.Е. Мирошниченко, К.Р. Симовский, Ю.С. Кившарь // Успехи физических наук. – 2013. – № 183. – P. 561-589. – DOI: 10.3367/UFNr.0183.201306a.0561.
2. **Алексеев, А.А.** Функциональные материалы на основе диоксида кремния, получаемые золь-гель-методом / А.А. Алексеев, А.А. Бойко, Е.Н. Подденежный. – Гомель: ГГТУ им. П.О. Сухого, 2008. – 183 с. – ISBN: 978-985-420-725-4.
3. **Климов, В.В.** Наноплазмоника / В.В. Климов. – М.: Физматлит, 2009. – 480 с. – ISBN: 978-5-9221-1205-5.
4. **Ибрагимов, И.М.** Основы компьютерного моделирования наносистем: Учебное пособие / И.М. Ибрагимов, А.Н. Ковшов, Ю.Ф. Назаров. – СПб.: Лань, 2010. – 384 с. – ISBN: 978-5-8114-1032-3.
5. **Ван де Хюлст, Г.** Рассеяние света малыми частицами / Г. ван де Хюлст. – М.: Изд-во иностранной литературы, 1961. – 537 с.
6. **Tamaru, H.** Resonant light scattering from individual Ag nanoparticles and particle pairs / H. Tamaru, H. Kuwata, H.T. Miyazaki, K. Miyano // Applied Physics Letters. – 2002. – Vol. 80, Issue 10. – P. 1826-1828. – DOI: 10.1063/1.1461072.
7. **Rechberger, W.** Optical properties of two interacting gold nanoparticles / W. Rechberger, A. Hohenau, A. Leitner, J.R. Krenn, B. Lamprecht, F.R. Aussenegg // Optics Communications. – 2002. – Vol. 220, Issues 1-3. – P. 137-141. – DOI: 10.1016/S0030-4018(03)01357-9.
8. **Курочка, К.С.** Построение программно-аппаратного комплекса для исследования распределения электромагнитного поля в ближней зоне диэлектрических и металлических наночастиц / К.С. Курочка, О.Д. Асенчик, Е.Г. Стародубцев // Доклады БГУИР. – 2013. – № 3(81). – С. 64-70.
9. **Smajic, J.** Comparison of numerical methods for the analysis of plasmonic structures / J. Smajic, C. Hafner, L. Raguin, K. Tavzarashvili, M. Mishrikey // Journal of Computational and Theoretical Nanoscience. – 2009. – Vol. 6, Number 3. – P. 763-774. – DOI: 10.1166/jctn.2009.1107.
10. **Karamehmedović, M.** Comparison of numerical methods in near-field computation for metallic nanoparticles / M. Karamehmedović, R. Schuh, V. Schmidt, Th. Wriedt, Ch. Matyssek, W. Hergert, A. Stalmashonak, G. Seifert, O. Stranik // Optic Express. – 2011. – Vol. 19, Issue 9. – P. 8939-8953. – DOI: 10.1364/OE.19.008939.
11. **Sadiku, M.N.O.** Numerical techniques in electromagnetics / M.N.O. Sadiku. – 2nd ed. – London: CRC Press, 2003.
12. **Taflove, A.** Computational electrodynamics: The finite-difference time-domain method / A. Taflove, S.C. Hagness. – 3rd ed. – Boston, London: Artech House Publishers, 2005. – ISBN: 978-1-58053-832-9.
13. **Mishchenko, M.I.** T-matrix computations of light scattering by nonspherical particles: A review / M.I. Mishchenko, L.D. Travis, D.W. Mackowski // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 1996. – Vol. 55, Issue 5. – P. 535-575. – DOI: 10.1016/0022-4073(96)00002-7.
14. **Draine, B.T.** Discrete dipole approximation for scattering calculations / B.T. Draine, P.J. Flatau // Journal of the Optical Society of America A. – 2004. – Vol. 11, Issue 4. – P. 1491-1499. – DOI: 10.1364/JOSAA.11.001491.
15. **Jin, J.-M.** Theory and computation of electromagnetic fields / J.-M. Jin. – Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, 2010. – 616 p. – ISBN: 978-0-470-53359-8.
16. **Monk, P.** Finite element methods for Maxwell's equations / P. Monk. – Oxford: Oxford University Press, 2003. – 464 p. – ISBN: 978-0-19-850888-5.
17. **Ringler, M.** Shaping emission spectra of fluorescent molecules with single plasmonic nanoresonators / M. Ringler, A. Schwemer, M. Wunderlich, A. Nichtl, K. Kürzinger, T.A. Klar, J. Feldmann // Physical Review Letters. – 2008. Vol. 100, Issue 20. – 203002. – DOI: 10.1103/PhysRevLett.100.203002.
18. **Xu, H.-X.** A new method by extending Mie theory to calculate local field in outside/inside of aggregates of arbitrary spheres / H.-X. Xu // Physics Letters A. – 2003. – Vol. 312, Issues 5-6. – P. 411-419. – DOI: 10.1016/S0375-9601(03)00687-X.
19. **Xiao, J.J.** Optical response of strongly coupled metal nanoparticles in dimer arrays / J.J. Xiao, J.P. Huang, K.W. Yu // Physical Review B. – 2005. – Vol. 71. – 045404. – DOI: 10.1103/PhysRevB.71.045404.
20. **Nordlander, P.** Plasmon hybridization in nanoparticle dimers / P. Nordlander, C. Oubre, E. Prodan, K. Li, M.I. Stockman // Nano Letters. – 2004. – Vol. 4, Issue 5. – P. 899-903. – DOI: 10.1021/nl049681c.
21. **Doicu, A.** Light scattering by systems of particles: Null-field method with discrete sources: Theory and programs / A. Doicu, T. Wriedt, Y.A. Eremin. – Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 2006. – 337 p. – ISBN: 978-3-540-33696-9.
22. **Mackowski, D.W.** A multiple sphere T-matrix Fortran code for use on parallel computer clusters / D.W. Mackowski, M.I. Mishchenko // Journal of Quantitative Spectroscopy

- and Radiative Transfer. – 2011. – Vol. 112, Issue 13. – P. 2182-2192. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2011.02.019.
23. **Romero, I.** Plasmons in nearly touching metallic nanoparticles: Singular response in the limit of touching dimers / I. Romero, J. Aizpurua, G.W. Bryant, F.J. Garcia de Abajo // *Optics Express*. – 2016. – Vol. 14, Issue 21. – P. 9988-9999. – DOI: 10.1364/OE.14.009988.
24. **Курочка, К.С.** Конечно-элементное моделирование распределения электромагнитного поля в ближней зоне сферической наночастицы / К.С. Курочка // *Информатика*. – 2016. – № 4(52). – С. 33-41.
25. **Hellmers, J.** Classification of software for the simulation of light scattering and realization within an internet information portal / J. Hellmers, T. Wriedt // *Journal of Universal Computer Science*. – 2010. – Vol. 16, Issue 9. – P. 1176-1189. – DOI: 10.3217/jucs-016-09-1176.
26. **Oskooi, A.F.** MEEP: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method / A.F. Oskooi, D. Roundy, M. Ibanescu, P. Bermel, J.D. Joannopoulos, S.G. Johnson // *Computer Physics Communications*. – 2010. – Vol. 181. – P. 687-702. – DOI: 10.1016/j.cpc.2009.11.008.
27. **Mishchenko, M.I.** Scattering, absorption, and emission of light by small particles / M.I. Mishchenko, L.D. Travis, A.A. Lacis. – Cambridge: Cambridge University Press, 2003. – ISBN: 978-0-521-78252-4.
28. **Berenger, J.P.** An effective PML for the absorption of evanescent waves in waveguides / J.P. Berenger // *IEEE Microwave and Guided Wave Letters*. – 1988. – Vol. 8, Issue 5. – P. 188-190. – DOI: 10.1109/75.668706.
29. **Hackbusch, W.** Iterative solution of large sparse systems of equations. / W. Hackbusch. – 2nd ed. – Springer, 2016. – 509 p. – ISBN: 978-3-319-28481-1.

Сведения об авторе

Курочка Константин Сергеевич, 1976 года рождения, кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой информационных технологий УО «Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого», в 2003 году защитил кандидатскую диссертацию в Гомельском государственном университете имени Ф. Скорины. Область научных интересов: математическое моделирование физических систем, обработка и анализ цифровых изображений, нейронные сети, программирование. E-mail: kurochka@gstu.by.

ГРПТИ: 27.41.19

Поступила в редакцию 18 февраля 2018 г. Окончательный вариант – 24 апреля 2018 г.

NUMERICAL MODELING OF A INFLUENCE OF A NANOPARTICLE PAIR ON THE ELECTROMAGNETIC FIELD IN THE NEAR ZONE BY THE VECTOR FINITE ELEMENTS METHOD

*K.S. Kurachka*¹

¹ *Sukhoi State Technical University of Gomel, Gomel, Republic of Belarus*

Abstract

Here we propose a mathematical model based on a vector finite-element method for modeling the distribution of the electromagnetic field in the near zone of spherical particles. This model has allowed us to develop algorithms for the appropriate software. The verification of the model shows that the discrepancy between the research results of the proposed model and the available calculation results based on analytical formulas derived from the Mie theory for homogeneous spherical nanoparticles does not exceed 10 percent.

Calculations were carried out to determine the relative positions of a pair of metal nanoparticles at which the intensity of the electromagnetic field reaches the maximum value in the near zone. The advantage of the proposed mathematical model and approach consists in the use of tetrahedrons as finite-elements. The tetrahedron finite-elements allow one to approximate the heterogeneous structure of the nanomaterial with the accuracy sufficient for the practical use. Furthermore, in this way the continuity of the tangential component of the electromagnetic field in the entire calculation region can be achieved.

Keywords: mathematical modeling, numerical approximation and analysis, light scattering by particles, electromagnetic field, vector finite element method.

Citation: Kurachka K.S. Numerical modeling of a influence of a nanoparticle pair on the electromagnetic field in the near zone by the vector finite elements method. *Computer Optics* 2018; 42(4): 542-549. DOI: 10.18287/2412-6179-2018-42-4-542-549.

References

- [1] Krasnok AE, Maksymov IS, Denisjuk AI, Belov PA, Miroschnichenko AE, Simovskii CR, Kivshar YuS. Optical nanoantennas. *Phys Usp* 2013; 56(6): 539-564. DOI: 10.3367/UFNe.0183.201306a.0561.
- [2] Alexsenko AA, Boiko AA, Poddenezjny EN. Functional materials based on silica, obtained by sol-gel process [In Russian]. Gomel: "Sukhoi State Technical University of Gomel" Publisher; 2008. ISBN: 978-985-420-725-4.
- [3] Klimov VV. Nanoplasmonics. Singapore: Pan Stanford Publishing Pte Ltd; 2014. ISBN: 978-981-4267-16-8.
- [4] Ibragimov IM, Kovshov AN, Nazarov YF. Fundamentals of computer modeling of nanosystems [In Russian]. Saint-Petersburg: "Lan" Publisher; 2010. ISBN: 978-5-8114-1032-3.
- [5] Van de Hulst HC. Light scattering by small particles. New York: John Wiley & Sons Inc; 1957.
- [6] Tamaru H, Kuwata H, Miyazaki HT, Miyano K. Resonant light scattering from individual Ag nanoparticles and parti-

- cle pairs. *Appl Phys Lett* 2002; 80(10): 1826-1828. DOI: 10.1063/1.1461072.
- [7] Rechberger W, Hohenau A, Leitner A, Krenn JR, Lamprecht B, Aussenegg FR. Optical properties of two interacting gold nanoparticles. *Opt Commun* 2003; 220(1-3): 137-141. DOI: 10.1016/S0030-4018(03)01357-9.
- [8] Kurochka KS, Asenchik OD, Starodubtsev EG. Program-software complex for calculations of the electromagnetic field distribution in the near field of dielectric and metal nanoparticles [In Russian]. *Doklady BGUIR* 2013; 3(81): 64-70.
- [9] Smajic J, Hafner C, Raguin L, Tavzarashvili K, Mishrikey M. Comparison of numerical methods for the analysis of plasmonic structures. *J Comp Theor Nanosci* 2009; 6(3): 763-774. DOI: 10.1166/jctn.2009.1107.
- [10] Karamehmedovic M, Schuh R, Schmidt V, Wriedt Th, Matyssek Ch, Hergert W, Stalmashonak A, Seifert G, Stranik O. Comparison of numerical methods in near-field computation for metallic nanoparticles. *Opt Express* 2011; 19(9): 8939-8953. DOI: 10.1364/OE.19.008939.
- [11] Sadiku MNO. *Numerical techniques in electromagnetics*. 2nd ed. London: CRC Press; 2003.
- [12] Taflove A, Hagness SC. *Computational electrodynamics: The finite-difference time-domain method*. 3rd ed. Boston, London: Artech House Publishers; 2005. ISBN: 978-1-58053-832-9.
- [13] Mishchenko MI, Travis LD, Mackowski DW. T-matrix computations of light scattering by nonspherical particles: A review. *J Quant Spectrosc Radiat Transfer* 1996; 55(5): 535-575. DOI: 10.1016/0022-4073(96)00002-7.
- [14] Draine BT, Flatau PJ. Discrete dipole approximation for scattering calculations. *J Opt Soc Am A* 2004; 11(4): 1491-1499. DOI: 10.1364/JOSAA.11.001491.
- [15] Jin J-M. *Theory and computation of electromagnetic fields*. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons; 2010. ISBN: 978-0-470-53359-8.
- [16] Monk P. *Finite element methods for Maxwell's equations*. Oxford: Oxford University Press; 2003. ISBN: 978-0-19-850888-5.
- [17] Ringler M, Schwemer A, Wunderlich M, Nichtl A, Kürzinger K, Klar TA, Feldmann J. Shaping emission spectra of fluorescent molecules with single plasmonic nanoresonators. *Phys Rev Lett* 2008; 100(20): 203002. DOI: 10.1103/PhysRevLett.100.203002.
- [18] Xu H-X. A new method by extending Mie theory to calculate local field in outside/inside of aggregates of arbitrary spheres. *Phys Lett A* 2003; 312(5-6): 411-419. DOI: 10.1016/S0375-9601(03)00687-X.
- [19] Xiao JJ, Huang JP, Yu KW. Optical response of strongly coupled metal nanoparticles in dimer arrays. *Phys Rev B* 2005; 71: 045404. DOI: 10.1103/PhysRevB.71.045404.
- [20] Nordlander P, Oubre C, Prodan E, Li K, Stockman MI. Plasmon hybridization in nanoparticle dimers. *Nano Lett* 2004; 4(5): 899-903. DOI: 10.1021/nl049681c.
- [21] Doicu A, Wriedt T, Eremin YA. *Light scattering by systems of particles: Null-field method with discrete sources: Theory and programs*. Berlin, Heidelberg, New York: Springer; 2006. ISBN: 978-3-540-33696-9.
- [22] Mackowski DW, Mishchenko MI. A multiple sphere T-matrix Fortran code for use on parallel computer clusters. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 2011; 112(13): 2182-2192. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2011.02.019.
- [23] Romero I, Aizpurua J, Bryant GW, García de Abajo FJ. Plasmons in nearly touching metallic nanoparticles: Singular response in the limit of touching dimers. *Opt Express* 2016; 14(21): 9988-9999. DOI: 10.1364/OE.14.009988.
- [24] Kurochka KS. Finite-element modeling of electromagnetic field distribution in the nearest zone of a spherical nanoparticle [In Russian]. *Informatics* 2016; 4(52): 33-41.
- [25] Hellmers J, Wriedt T. Classification of software for the simulation of light scattering and realization within an internet information portal. *Journal of Universal Computer Science* 2010; 16(9): 1176-1189. DOI: 10.3217/jucs-016-09-1176.
- [26] Oskooi AF, Roundy D, Ibanescu M, Bermel P, Joannopoulos JD, Johnson SG. MEEP: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method. *Computer Physics Communications* 2010; 181: 687-702. DOI: 10.1016/j.cpc.2009.11.008.
- [27] Mishchenko MI, Travis LD, Lasis AA. *Scattering, absorption, and emission of light by small particles*. Cambridge: Cambridge University Press; 2003. ISBN: 978-0-521-78252-4.
- [28] Berenger JP. An effective PML for the absorption of evanescent waves in waveguides. *IEEE Microwave and Guided Wave Letters* 1988; 8(5): 188-190. DOI: 10.1109/75.668706.
- [29] Hackbusch W. *Iterative solution of large sparse systems of equations*. 2nd ed. Springer; 2016. ISBN: 978-3-319-28481-1.

Author's information

Kanstantsin Kurachka (b. 1976) is the head of Information Technologies department of Sukhoi State Technical University of Gomel. He graduated from Francisk Skorina Gomel State University in 1998. He received his PhD in the field of Mathematical Modeling of Physical Systems in 2003. His scientific interests include mathematical modeling of complex physical systems, image and video processing, object recognition, intelligent systems. E-mail: kurochka@gstu.by.

Received February 18, 2018. The final version – April 24, 2018.