УДК 535.36

РЕАЛИЗАЦИЯ РЕЖИМА МУЛЬТИПОЛЬНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ В ЗАДАЧАХ РАССЕЯНИЯ СВЕТА НА ДВУМЕРНЫХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ НА ПРИМЕРЕ ПРОГРАММЫ MULTEM

Шалев А.Н. (Университет ИТМО)

Научный руководитель – к. физ.-мат. н., доцент Ладутенко К.С.
(Университет ИТМО)

В работе рассмотрен процесс реализации режима мультипольного разложения на примере программы с открытым исходным кодом MULTEM. Полученные результаты позволят проводить мультипольный анализ двумерных периодических структур без использования коммерческого программного обеспечения.

Введение. Задачи рассеяния света на сферических частицах решаются в разных областях науки, например, в оптике, нанотехнологиях, химии, плазмонике, антенной технике [1-5]. При разных параметрах системы можно использовать разные подходы к описанию рассеяния электромагнитных волн на частице (приближение Рэлея для малых частиц и методы геометрической оптики для больших частиц [6]). Тем не менее строгое решение такой задачи предполагает решение уравнений Максвелла с граничными условиями на поверхности частицы и называется рассеянием Ми [6,7]. Развитие вычислительной техники во второй половине 20 века позволило точно и быстро решать данную задачу, что привело к появлению нескольких обобщений данной теории на случай частиц не только сферической формы, в частности метод Т-матриц [8].

Метод Т-матриц является одним из наиболее производительных методов для описания волновых явлений в системе, состоящей из множества частиц. Вычислительная сложность данного метода растет не с увеличением расчетной области, а с увеличением числа частиц в системе, а так как рассеяние на каждой частице описано полуаналитически, то и вычислительная сложность растет не так стремительно. Это дает большое преимущество перед наиболее распространенными численными методами решения различных задач, к которым относятся метод конечных элементов [9] или метод конечных разностей во временной области [10].

MULTEM – программа с открытым исходным кодом, в основе работы которой лежит метод Т-матриц. Данная программа позволяет рассчитывать коэффициенты прохождения, отражения и поглощения от бесконечной двумерной периодической (в том числе многослойной) структуры, состоящей из рассеивателей сферической формы [11].

Мультипольный подход является мощным инструментом при анализе взаимодействия электромагнитного поля с веществом. Основное преимущество мультипольного подхода состоит в том, что он обеспечивает представление произвольного распределения поля в виде суперпозиции полей, созданных набором мультиполей. Однако в оригинальной версии программы данный подход не был предусмотрен. В связи с этим целью данной работы является реализация режима мультипольного разложения для программы MULTEM.

Основная часть. Для реализации режима мультипольного разложения необходимо понимать, что из себя представляет Т-матрица частицы сферической формы. Для этого необходимо рассмотреть падающее и рассеянное отдельной сферической частицей поле в терминах векторных сферических функций.

Падающее поле раскладывается на векторные сферические функции следующим образом:

$$\boldsymbol{E_{inc}}(\boldsymbol{r}) = \sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\left(\frac{i}{q}a_{lm}^{0E}\nabla \times j_l(qr)\boldsymbol{X}_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}}) + a_{lm}^{0H}j_l(qr)\boldsymbol{X}_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}})\right), \tag{1}$$

где индексы l и m соответствуют орбитальному числу (порядку векторной сферической функции или мультиполя) и проекции орбитального числа на заданное направление соответственно; $j_l(qr)-$ функция Бесселя порядка l; $\boldsymbol{X}_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}})-$ векторная сферическая функция, а вектор $\hat{\boldsymbol{r}}$ обозначает угловые координаты (θ,φ) вектора $\boldsymbol{r}$ в сферической системе координат; a_{lm}^{0E} и a_{lm}^{0H} – коэффициенты разложения падающего поля; $q=\sqrt{\mu\varepsilon}\omega/c$ – волновое число, где μ и $\varepsilon-$ магнитная и диэлектрическая проницаемость среды, в которой распространяется волна, соответственно; $\omega-$ угловая частота; $c-$ скорость света в вакууме.

Рассеянное сферой поле определяется следующим образом:

$$\boldsymbol{E_{sc}}(\boldsymbol{r})=\sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\left(\frac{i}{q}a_{lm}^{+E}\nabla\times h_l^{+}(qr)\boldsymbol{X}_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}})+a_{lm}^{+H}h_l^{+}(qr)\boldsymbol{X}_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}})\right) \quad (2)$$

где $h_l^{+}(qr)-$ функция Ханкеля порядка l; a_{lm}^{+E} и $a_{lm}^{+H}-$ коэффициенты разложения рассеянного поля.

Связь между коэффициентами разложения для падающего (1) и рассеянного полей (2) выражается в виде:

$$a_{lm}^{+P}=T_l^P a_{lm}^{0P} \quad (3)$$

где P – тип мультиполя ($E-$ электрический или $H-$ магнитный)

Совокупность коэффициентов T_l^P для разных порядков векторной сферической функции удобно представлять в виде Т-вектора или Т-матрицы в случае несферических частиц.

В основе работы программы MULTEM лежит решение следующей системы линейных уравнений:

$$\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}-\boldsymbol{T}^E\Omega^{EE} & \boldsymbol{T}^E\Omega^{EH}\\ \boldsymbol{T}^H\Omega^{HE} & \boldsymbol{I}-\boldsymbol{T}^H\Omega^{HH}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{b}^{+E}\\ \boldsymbol{b}^{+H}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{T}^E\boldsymbol{a}^{0E}\\ \boldsymbol{T}^H\boldsymbol{a}^{0H}\end{pmatrix} \quad (4)$$

где $\Omega^{PP}-$ матрица связи коэффициентов разложения поля, рассеянного единичной сферой, и всей двумерной периодической структурой; $\boldsymbol{b}^{+P}-$ коэффициент разложения поля, рассеянного от сферы, помещенную в двумерную периодическую структуру.

Для реализации режима мультипольного разложения необходимо оставить в Т-векторе только те элементы, которые отвечают определенным порядкам векторной сферической функции (мультиполю), при этом все остальные элементы обнуляются. В таком случае в картине рассеяния будут наблюдаться только заданные пользователем мультипольные отклики.

Для верификации полученных результатов было проведено сравнение с работой [12], в которой исследовались мультипольные отклики двумерной периодической структуры, состоящей из золотых сфер. На рис. 1 приведены результаты сравнения для зависимости коэффициента отражения от угла падающего света с длиной волны 900 нм. Обозначения используемые на рисунке соответствуют мультиполям, ориентированным в пространстве определенным образом [13]. Видно, что численный расчет с применением режима мультипольного разложения полностью совпадает с результатами работы [12].

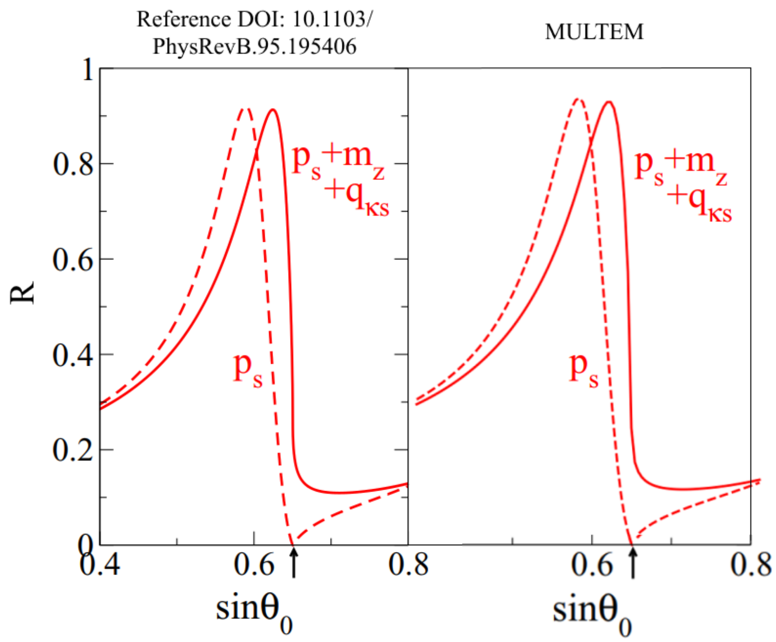

Рис. 1. Верификация режима мультипольного разложения

Выводы. Мультипольное разложение играет важную роль в любой научной области, где исследуется взаимодействие электромагнитных волн с веществом. В связи с чем режим мультипольного разложения, реализованный в программе с открытым исходным кодом MULTEM позволит выполнять моделирование двумерных периодических структур без использования коммерческих программ электромагнитного моделирования, например, COMSOL Multiphysics или CST Microwave Studio.

Литература

1. Fan, X., Zheng, W. & Singh, D. Light scattering and surface plasmons on small spherical particles. *Light Sci Appl* 3, e179 (2014). https://doi.org/10.1038/lsa.2014.60
2. Halas, N.J.; Lal, S.; Chang,W.S.; Link, S.; Nordlander, P. Plasmons in strongly coupled metallic nanostructures. Chem. Rev. 2011, 111, 3913–3961.
3. Khlebtsov, Nikolai G. "T-matrix method in plasmonics: An overview." Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 123 (2013): 184-217.
4. Shore, R.A. Scattering of an electromagnetic linearly polarized plane wave by a multilayered sphere: Obtaining a computational form of Mie coefficients for the scattered field. IEEE Antennas Propag. Mag. 2015, 57, 69–116.
5. Tzarouchis, D.; Sihvola, A. Light Scattering by a Dielectric Sphere: Perspectives on the Mie Resonances. Appl. Sci. 2018, 8, 184. https://doi.org/10.3390/app8020184.
6. Bohren, C. F., & Huffman, D. R. (1983). Absorption and scattering of light by small particles. New York: Wiley.
7. Mie, Gustav (1908). "Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen". Annalen der Physik. 330 (3): 377–445.
8. Waterman P. C. Matrix formulation of electromagnetic scattering // Proc. IEEE. 1965. Vol. 53, issue 8. P. 805–812. DOI: 10.1109/PROC.1965.4058.
9. Hrennikoff, Alexander (1941). "Solution of problems of elasticity by the framework method". Journal of Applied Mechanics. 8 (4): 169–175. doi:10.1115/1.4009129.
10. Kane Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media // IEEE Transactions on Antennas and Propagation: journal. — 1966. — Vol. 14, no. 3. — P. 302—307.
11. Stefanou N, Yannopapas V, Modinos A. Heterostructures of photonic crystals: frequency bands and transmission coefficients. Comput Phys Commun. 1998; 113(1): 49–77.

12. Swiecicki, S.D., & Sipe, J.E. (2017). Surface-lattice resonances in two-dimensional arrays of spheres: Multipolar interactions and a mode analysis. Physical Review B, 95, 195406.

13. Alaee, R., Rockstuhl, C., & Fernandez-Corbaton, I. (2018). An electromagnetic multipole expansion beyond the long-wavelength approximation. Optics Communications, 407, 17-21.