

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ В БЛИЖНЕЙ ЗОНЕ АНСАМБЛЯ ИЗ 4 СФЕРИЧЕСКИХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ РАЗЛИЧНЫМИ ЧИСЛЕННЫМИ МЕТОДАМИ

К. С. Курочка, К. А. Панарин

Кафедра информационных технологий, Гомельский государственный технический университет имени П. О. Сухого

Гомель, Республика Беларусь

E-mail: kurochka@gstu.by, logran2@gmail.com

Проведено исследование распределения электромагнитного поля в ближней зоне ансамбля сферических наночастиц с использованием различных численных методов. Получена зависимость изменения величины электромагнитного поля от взаимного расположения наночастиц, обусловленная их взаимодействием.

ВВЕДЕНИЕ

Современные технологии позволяют создавать материалы со сложной упорядоченной микроскопической структурой, наделяя их множеством ценных свойств. Значительную часть времени при этом занимает производство и исследование прототипов. Использование компьютерного моделирования позволяет уменьшить себестоимость и значительно сократить длительность всего процесса разработки.

В настоящее время доступно немало свободных программных пакетов для решения задач моделирования распределения электромагнитных полей, реализующих различные численные методы. Наиболее популярными программными пакетами являются MEER, EMAP и DDSCAT [1].

Особенностью свойств металлических наночастиц является возникновение эффекта плазмонного резонанса [2-3], который связан с взаимодействием электромагнитного излучения с плазмой свободных электронов в металле.

Данный эффект приводит к появлению полос поглощения и рассеяния, связанных с плазмонным резонансом. Спектральное положение этих особенностей зависит от материала наночастиц, их взаимного расположения, размера, формы и энергетического состояния свободных электронов в наночастице.

Для изучения данного эффекта необходимо провести исследование по влиянию параметров и расположения частиц на электромагнитное поле.

I. ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

Объектом проводимых исследований является компьютерное моделирование распределения электромагнитного поля в ближней зоне четырех сферических металлических наночастиц (рис. 1). Для оценки взаимодействия наночастиц варьируется расстояние между ними. Моделирование осуществляется методом конечных разностей во временной области (FDTD) [4] с ис-

пользованием программного пакета MEER и методом аппроксимации дискретными диполями (DDA)[5] с использованием пакета DDSCAT.



Рис. 1 – Модель задачи для расчета распределения электромагнитного поля в ближней зоне ансамбля сферических наночастиц

Задача рассматривается в трёхмерной области. На рисунке 1 четыре серебряные наночастицы с радиусом $R=25$ нм, расположенные симметрично относительно начала координат. На наночастицы падает линейно поляризованная волна. Длина волны варьируется в диапазоне 220–660 нм.

Для моделирования используется пространственная расчетная область в форме куба с ребром 300 нм, окруженная тонким согласующим слоем (Perfectly Matched Layer, PML [6]) толщиной 50 нм.

Исследовалось распределение электромагнитного поля между наночастицами для направления вдоль оси Ox (при $y=0$). Исследование проводилось при расстоянии между наночастицами равном 75 нм, 50 нм и 25 нм.

Данные на рисунках 2-4 соответствуют распределению величины $|E^2|/|E_0^2|$ при изменении расстояния в зависимости от длины волны.

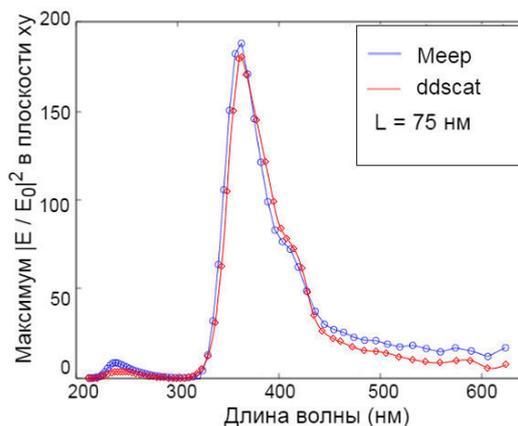


Рис. 2 – Распределение квадрата модуля амплитуды электромагнитного поля в центральном сечении наночастиц при расстоянии 75 нм

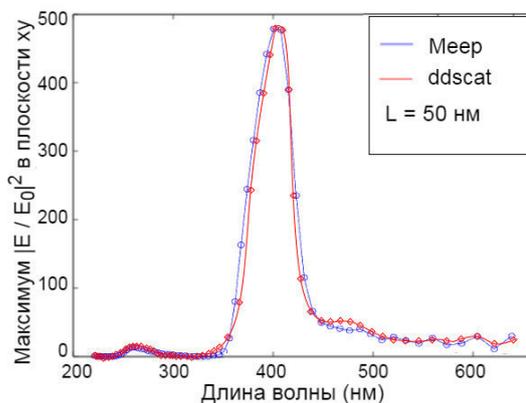


Рис. 3 – Распределение квадрата модуля амплитуды электромагнитного поля в центральном сечении наночастиц при расстоянии 50 нм

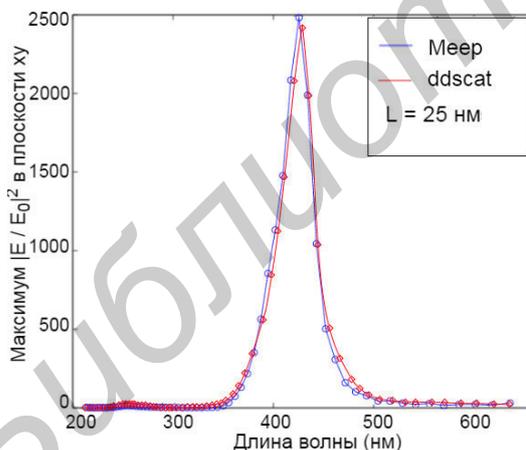


Рис. 4 – Распределение квадрата модуля амплитуды электромагнитного поля в центральном сечении наночастиц при расстоянии 25 нм

При сравнении данных рисунков 2–4 видно, что возмущения ближнего поля, существенно отличающиеся по величине от поля падающей волны, имеют место, в основном, на расстоянии порядка одного радиуса между поверхностями частиц (рис. 2).

Также можно отметить уменьшение в 2–4 раза интенсивности локального поля вне наночастицы при переходе от плоскости центрального

сечения к плоскости, касающейся наночастицы (рис. 5).

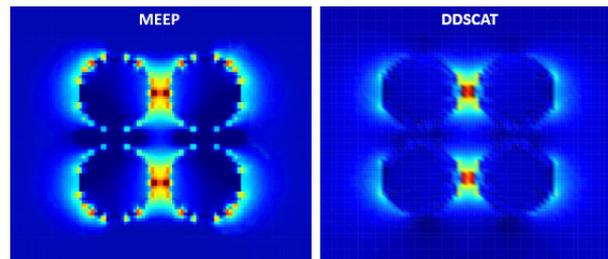


Рис. 5 – Карта распределения значений величины электромагнитного поля в центральном сечении наночастиц при расстоянии 25 нм

Установлено, что направление наибольшего изменения значений электромагнитного поля определяется направлением поляризации возбуждающей волны. Анализируя максимальное значение величины $|E^2|/|E_0^2|$ при различном расстоянии между частицами, получаем, что в случае расстояния между поверхностями сферических частиц больше, чем $3R$ (R – радиус сферической частицы) их взаимным влиянием можно пренебречь и рассматривать по отдельности.

II. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате исследования были получены следующие результаты:

- Исследовано изменение характеристик усиления ближнего поля ансамбля металлических наночастиц в воздухе, обусловленное их взаимовлиянием;
- Показано, что возмущения ближнего поля наночастиц по сравнению с полем падающей волны имеют место, в основном, на расстояниях порядка радиуса между поверхностями наночастиц и зависят от направления поляризации возбуждающей волны.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 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 (9). – P. 1176–1189.
2. Bohren, C. F. Absorption and Scattering of Light by Small Particles / C. F. Bohren, D. R. Huffman. – Wiley, N. Y., – 1998. – 544.
3. Kreibig, U. Optical Properties of Metal Clusters / U. Kreibig, M. Vollmer. – Wiley, Berlin, Heidelberg: Springer, – 1995. – 553.
4. Асенчик, О. Д. Применение метода рассеянного поля для FDTD моделирования электромагнитных полей вблизи диэлектрических и металлических наночастиц / О. Д. Асенчик, Е. Г. Стародубцев // Компьютерная оптика, – 2013, Т.37, N3, С. 316–325.
5. Draine B. T. Discrete dipole approximation for scattering calculations. / B. T. Draine, P. J. Flatau // J. Opt. Soc. Am. – 2004. – A 11 (4). – P. 1491–1499.
6. Jianming, J. Theory And Computation Of Electromagnetic Fields / J. Jianming – John Wiley Sons, – 2010. – 616.