

ЗАСТОСУВАННЯ УЗАГАЛЬНЕНОГО МЕТОДУ ВЛАСНИХ КОЛИВАНЬ ДО РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧ РОЗСІЮВАННЯ НА НАНОСТРУКТУРАХ

Розглянуто задачу розсіювання електромагнітних хвиль на діелектричному тілі малого розміру за допомогою узагальненого методу власних коливань. Неоднорідну задачу сформульовано на основі одного з варіантів узагальненого методу власних коливань, у якому діелектрична проникність відіграє роль власного значення. Відповідну однорідну задачу розв'язано з використанням потенціалів Дебая. Отримано систему лінійних алгебраїчних рівнянь відносно невідомих коефіцієнтів розкладу, для розв'язання якої застосовано метод послідовних наближень. Результати числових розрахунків підтверджують ефективність запропонованого методу.

Ключові слова: узагальнений метод власних коливань, система рівнянь Максвелла, потенціали Дебая, умова неперервності, нелінійна спектральна задача, числове моделювання.

Вступ. Наноплазмоніка – один із напрямків сучасної фізики, який швидко розвивався протягом останніх десятиліть. Про це свідчить велика кількість монографій і журнальних статей (див., наприклад, монографії [10, 11, 17, 19, 21, 22] і цитовані там посилання). Праці [9, 10, 18, 20] присвячено опису фізичних властивостей наночастинок і їхнього застосування у різноманітних сферах мікро- та наноелектроніки. Постановки відповідних дифракційних задач розглянуто в них, як правило, в електростатичному наближенні. У монографії [19] розглянуто більш складні електродинамічні постановки і числові методи розв'язання відповідних дифракційних задач для простих тіл із координатними поверхнями. Однак застосування методу скінченних різниць у часовій області (FDTD) для розв'язання електродинамічних задач є обмеженим з огляду на необхідність використання великих обсягів оперативної пам'яті сучасних обчислювальних комплексів і значними часовими витратами.

Об'єкти та середовища, що вивчаються в наноплазмоніці, зазвичай мають аналоги в класичних галузях фізики, зокрема у високочастотній електродинаміці та радіотехніці. Такими об'єктами є резонатори, хвилеводи, антени тощо. Відповідно адаптовані методи, розроблені в класичній теорії хвильового поля, можуть бути використані для дослідження таких об'єктів і середовищ [13, 23, 24]. Одним із таких методів, які дають можливість отримати аналітичне представлення розв'язку задачі розсіювання для тіл складної геометрії і врахувати фізичні властивості об'єкта, на якому відбувається розсіювання, є узагальнений метод власних коливань (УМВК) [2]. Основні принципи і способи формулювання граничних умов для системи рівнянь Максвелла для діелектричних тіл були сформульовані у роботі [26]. У роботі [16] було розроблено числовий підхід до процедури врахування граничних умов на поверхні тіла, діелектрична проникність якого відрізняється від діелектричної проникності оточуючого середовища. У роботах [11, 12] було враховано специфіку формулювання і розв'язання задачі розсіювання для тіл довільної форми і нанорозмірів.

УМВК був розроблений для вивчення резонансних явищ в електродинаміці, його теоретичне обґрунтування детально описано у монографії [6]. У монографії [15] один із варіантів УМВК був використаний для вивчення резонансних ефектів у наноплазмоніці та розв'язання відповідних задач у квазістатичній постановці для плазмонів у формі сфери та еліпсоїда. Власні значення резонансних коливань у такій постановці було обчислено набли-

[✉]andr@iapmm.lviv.ua

жено, а визначення власних функцій є можливим тільки при окремих частотах. У зв'язку з цим виникає необхідність розвинути підхід, який дав би можливість визначати власні значення і власні функції з точністю, достатньою для практичних застосувань, і який би найбільш повно використовував можливості аналітично-числового методу розв'язання задачі. У розглядуваній роботі ці проблеми будуть вирішені на основі строгої електродинамічної постановки задачі розсіювання з послідовним використанням числових методів.

Одним із числових методів, який може бути використаний для розв'язання однорідних задач УМВК, є варіаційний апарат. У роботі [1] цей метод був запропонований для випадку тіл обертання. Однак застосувати його безпосередньо до однорідних задач недоцільно, оскільки в ньому використовуються похідні вищого порядку, що незручно при числових розрахунках. Існують також певні труднощі, пов'язані з тим фактом, що власні значення, які шукаються в однорідних задачах наноплазмоніки, мають від'ємні дійсні частини. У цій роботі для знаходження власних значень і власних функцій пропонується підхід на основі методу Петрова – Гальоркіна. Числові результати, отримані для модельних задач (куля, еліпсоїд обертання (див. рис. 1), порівнюються з наближеними результатами для квазістатичного формулювання [15].

1. Застосування УМВК до розв'язання неоднорідних задач. Характерною особливістю УМВК є те, що не тільки частота ω , але й інші фізичні параметри, такі як діелектрична проникність ε обмеженого тіла, імпеданс w і прозорість ρ його поверхні, а також елементи матриці розсіювання s , можуть використовуватися як спектральні параметри. УМВК, точніше, його ε -модифікацію, можна застосувати для розв'язання дифракційних задач, які формулюються в інтегральній постановці. Загальноживане формулювання такої задачі записується у вигляді

$$y(x) = \int_V \mathcal{K}(x, x')y(x') dx' + f(x), \quad (1)$$

де функція $y(x)$ – розв'язок задачі, який відповідає збудженню (падаючому полю) $f(x)$, $\mathcal{K}(x, x')$ – ядро відповідного оператора задачі. Як правило, матриця, яка відповідає ядру $\mathcal{K}(x, x')$, є погано обумовленою. Це стимулює виділити декілька перших власних функцій оператора, який відповідає ядру $\mathcal{K}(x, x')$, і розглядати задачу (1) для допоміжної функції

$$\tilde{y}(x) = \sum_n C_n y_n(x) + f(x), \quad (2)$$

де $y_n(x)$ – власні функції оператора, який визначається ядром $\mathcal{K}(x, x')$, а C_n – невідомі коефіцієнти, які визначаються з граничних умов.

В УМВК одна з власних функцій є, як правило, домінуючою, тому є сенс виділяти тільки її з загального ядра:

$$\mathcal{K}(x, x') = \sum_n y_n(x)y_n(x') = y_1(x)y_1(x') + \sum_{n \neq 1} y_n(x)y_n(x'). \quad (3)$$

Використовуючи формули (2) і (3), отримаємо задачу для нової функції $\tilde{y}(x)$ вигляду

$$\tilde{y}(x) = y_1(x) \int_V y_1(x') \mathcal{K}'(x, x') dx' + \int_V \mathcal{K}'(x, x') \tilde{y}(x') dx' + f, \quad (4)$$

де ядро $\mathcal{K}'(x, x')$ не містить «резонансної частини» і відповідна йому матриця є добре обумовленою. У роботі [6] встановлено, що функції $y_n(x)$ можуть бути власними функціями УМВК, зокрема ε -методу. У подальшому

буде показано, як ці функції і відповідні їм власні значення можна обчислити для часткового випадку тривимірного тіла обертання з комплексним ε . Після того, як визначено власні значення і власні функції (принаймні ε_1 і y_1), розв'язання інтегрального рівняння (4) не викликає обчислювальних труднощів.

2. Постановка задачі УМВК. У роботі [2] формулювання задач відрізняються використанням різних фізичних параметрів як спектральних параметрів (k -метод, ε -метод, w -метод, ρ -метод, s -метод). У цій роботі будемо використовувати варіант УМВК, у якому за спектральний параметр вибрано діелектричну проникність тіла, тобто ε -метод.

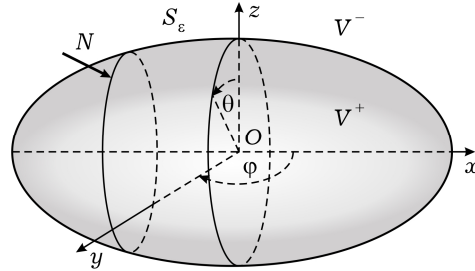


Рис. 1. Геометрія задачі для еліпса обертання.

Розглядаємо задачу дифракції монохроматичного поля на обмеженому тілі V^+ з діелектричною проникністю ε і магнітною проникністю $\mu = 1$ (рис. 1). Часову залежність приймаємо у формі $e^{i\omega t}$, де ω – частота коливань (яка у нашому випадку характеризується хвильовим числом $k = \omega\sqrt{\varepsilon\mu}$).

Шукане поле $\{\mathbf{E}, \mathbf{H}\}$ задовольняє систему рівнянь Максвелла

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} - ik\varepsilon \mathbf{E} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}^{(e)}, \quad (5)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} + ik \mathbf{H} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j}^{(m)} \quad (6)$$

в області V^+ (тут $\mathbf{j}^{(e)}$ і $\mathbf{j}^{(m)}$ – задані джерела електричного і магнітного струмів відповідно),

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} - ik \mathbf{E} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}^{(e)}, \quad (7)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} + ik \mathbf{H} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j}^{(m)} \quad (8)$$

в області V^- , а також умови неперервності

$$E_t^+ - E_t^- = 0, \quad H_t^+ - H_t^- = 0, \quad (9)$$

на границі S_ε (t – довільний напрямок, тангенціальний до поверхні S_ε), і умови випромінювання

$$E_\theta = H_\varphi = \Phi_1(\theta, \varphi) \frac{e^{-ikR}}{kR} \left[1 + O\left(\frac{1}{kR}\right) \right], \quad (10)$$

$$H_\theta = -E_\varphi = \Phi_2(\theta, \varphi) \frac{e^{-ikR}}{kR} \left[1 + O\left(\frac{1}{kR}\right) \right] \quad (11)$$

на безмежності. У випадку, коли джерела розміщені на безмежності (наприклад, плоска хвиля), умови (9)–(11) повинні виконуватися для полів $\{\mathbf{E} - \mathbf{E}^0, \mathbf{H} - \mathbf{H}^0\}$.

Падаюче поле, як поле тих самих джерел у вільному просторі, задовольняє рівняння (7), (8) в усьому просторі $V^+ \cup V^-$, умови неперервності (9) на S_ε і умови випромінювання (10), (11) на безмежності.

Розв'язок задачі (5)–(11) шукаємо у вигляді

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^0 + \sum_{n=1}^N A_n \mathbf{E}^{(n)}, \quad (12)$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}^0 + \sum_{n=1}^N A_n \mathbf{H}^{(n)}, \quad (13)$$

де $\{\mathbf{E}^{(n)}, \mathbf{H}^{(n)}\}$ – поля власних коливань, які задовольняють однорідні рівняння

$$\text{rot } \mathbf{H}^{(n)} - ik\varepsilon_n \mathbf{E}^{(n)} = 0, \quad (14)$$

$$\text{rot } \mathbf{E}^{(n)} + ik\mathbf{H}^{(n)} = 0 \quad (15)$$

в області V^+ ,

$$\text{rot } \mathbf{H}^{(n)} - ik\mathbf{E}^{(n)} = 0, \quad (16)$$

$$\text{rot } \mathbf{E}^{(n)} + ik\mathbf{H}^{(n)} = 0 \quad (17)$$

в області V^- , граничні умови

$$E_t^{+(n)} - E_t^{-(n)} = 0, \quad H_t^{+(n)} - H_t^{-(n)} = 0 \quad (18)$$

на границі S_ε , а також умови випромінювання (10), (11) на безмежності.

Поля власних коливань $\{\mathbf{E}^{(n)}, \mathbf{H}^{(n)}\}$ є біортогональними в розумінні

$$\int_{V^+} (\mathbf{E}^{(n)} \cdot \mathbf{E}^{(m)}) dV = 0 \quad \text{для} \quad n \neq m,$$

де символом « \cdot » позначено скалярний добуток першого вектора на другий, який є комплексно-спряженим (тобто без комплексного спряження).

Власні значення ε_n в рівнянні (14) є комплексними. Їхні уявні частини є додатними і описують втрати власних полів на випромінювання. Коефіцієнти A_n в сумах (12), (13) визначаються за формулами

$$A_n = \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon_n - \varepsilon} \frac{\int_{V^+} (\mathbf{E}^0 \cdot \mathbf{E}^{(n)}) dV}{\int_{V^+} (\mathbf{E}^{(n)} \cdot \mathbf{E}^{(n)}) dV} = 0.$$

Резонанс власного коливання відбувається при умові $\text{Re } \varepsilon_n \approx \text{Re } \varepsilon$. За цієї умови, бажано в (12), (13) виділити домінуючий доданок, а решту з них розглядати як «нерезонансну компоненту». Це один із можливих шляхів визначити власні значення і власні функції відповідної однорідної задачі, але процес визначення коефіцієнтів A_n з точки зору обчислень є досить витратним. Тому підхід із використанням інтегральних рівнянь, описаний у попередньому пункті, є більш ефективним.

3. Однорідна задача УМВК для тіла обертання. Розглянемо випадок, коли границя тіла V^+ є поверхнею обертання з твірною S_ε (див. рис. 2). Компоненти поля при цьому залежать від осьової координати φ сферичної системи координат (r, θ, φ) у вигляді множника $e^{im\varphi}$, $m = 1, 2, \dots$. Однорідну

задачу (14)–(18) можна розглядати для кожного значення m окремо. У подальшому в позначенні поля власного коливання індекс n будемо опускати.

Для представлення поля в різних областях (рис. 2) використаємо потенціали Дебая $u(r, \theta, \varphi)$, $v(r, \theta, \varphi)$ [14]. Для того щоб позбутися проблеми, пов'язаної з гіпотезою Релея [14], введемо в розгляд додаткову сферичну поверхню S_0 радіуса a_0 з центром у початку координат, яка оточує тіло V^+ . Подання потенціалів Дебая в областях V_0 , V^+ , V^- мають форму

$$u^0 = \sum_{n=m}^{\infty} A_n^0 P_n^m(\theta) h_n^{(2)}(kr) e^{im\varphi}, \quad (19_1)$$

$$v^0 = \sum_{n=m}^{\infty} C_n^0 P_n^m(\theta) h_n^{(2)}(kr) e^{im\varphi}, \quad (19_2)$$

$$u^- = \sum_{n=m}^{\infty} \left[A_n^- j_n(kr) + B_n^- y_n(kr) \right] P_n^m(\theta) e^{im\varphi}, \quad (20_1)$$

$$v^- = \sum_{n=m}^{\infty} \left[C_n^- j_n(kr) + D_n^- y_n(kr) \right] P_n^m(\theta) e^{im\varphi}, \quad (20_2)$$

$$u^+ = \sum_{n=m}^{\infty} A_n^+ P_n^m(\theta) j_n(kr\sqrt{\varepsilon}) e^{im\varphi}, \quad (21_1)$$

$$v^+ = \sum_{n=m}^{\infty} C_n^+ P_n^m(\theta) j_n(kr\sqrt{\varepsilon}) e^{im\varphi}. \quad (21_2)$$

Верхні індекси «0», «-», «+» відповідають областям V^0 , V^- , V^+ ; j_n , y_n , $h_n^{(2)}$ – сферичні функції Бесселя, Неймана і Ганкеля відповідно; $P_n^m(\theta)$ – асоційовані функції Лежандра; у формулах (21) через ε позначено узагальнене власне значення задачі (5), (6).

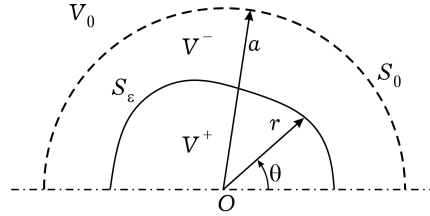


Рис. 2. Поперечний перетин тіла обертання.

Введені потенціали (19)–(21) описують поля, які задовольняють однорідні рівняння Максвелла в областях V^0 , V^- з $\varepsilon = 1$, а також умови випромінювання (10), (11) при $R \rightarrow \infty$. Припускаємо, що в усьому просторі $\mu \equiv 1$.

Власне значення і відповідні йому коефіцієнти A_n^0 , C_n^0 , A_n^- , B_n^- , C_n^- , D_n^- , A_n^+ , C_n^+ у формулах (19)–(21) визначаються з умов неперервності компонент E_φ , H_φ , E_s , H_s на границі S_ε і на допоміжній сфері S_0 . Використовуючи подання (7.53) з [14], запишемо компоненти поля на поверхні S_ε , яка описується рівнянням $r = \rho(\theta)$, у формі

$$E_\varphi = \frac{im}{\rho \sin \theta} \frac{\partial(ru)}{\partial r} + ik\rho \frac{\partial v}{\partial \theta}, \quad (22_1)$$

$$H_\varphi = \frac{im}{\rho \sin \theta} \frac{\partial(rv)}{\partial r} - ik\rho \varepsilon^\pm \frac{\partial u}{\partial \theta}, \quad (22_2)$$

$$E_S = \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + \rho'^2}} \left(\rho' \left[\frac{\partial^2(ru)}{\partial r^2} + k\rho^2 \varepsilon^\pm u \right] + \frac{\partial^2(ru)}{\partial r \partial \theta} + \frac{kmr}{\sin \theta} v \right), \quad (23_1)$$

$$H_S = \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + \rho'^2}} \left(\rho' \left[\frac{\partial^2(rv)}{\partial r^2} + k^2 \rho \varepsilon^\pm v \right] + \frac{\partial^2(rv)}{\partial r \partial \theta} + \frac{k\rho}{\sin \theta} \varepsilon^\pm u \right). \quad (23_2)$$

Знак «штрих» у формулах (23) і нижче означає диференціювання за відповідною координатою. Для сфери S_0 необхідно підставити $\rho = \text{const}$, $\rho' = 0$.

Значення ε^\pm у формулах (23) – діелектрична проникність у відповідних областях: $\varepsilon^+ = \varepsilon$ для області V^+ , $\varepsilon^- = 1$ для областей V^- і V^0 . Формули для других похідних спрощуються після підстановки формул (21) у (23₁), (23₂) для S_ε з використанням рівняння Бесселя для сферичних функцій.

Для того щоб отримати систему лінійних рівнянь для визначення невідомих коефіцієнтів у формулах (19)–(21), запишемо компоненти складових електромагнітного поля у термінах цих коефіцієнтів (це подання використовуватиметься для виконання граничних умов на поверхні S_ε):

$$E_\varphi = A_n \frac{im}{r \sin \theta} P_n^m \cdot (rz_n(kr\sqrt{\varepsilon^\pm}))' + C_n \frac{ik\mu}{r} P_n^{m'} \cdot (rz_n(kr\sqrt{\varepsilon^\pm})), \quad (24_1)$$

$$E_\theta = A_n \frac{1}{r} P_n^{m'} \cdot (rz_n(kr\sqrt{\varepsilon^\pm}))' + C_n \frac{k\mu}{r \sin \theta} P_n^m \cdot (rz_n(kr\sqrt{\varepsilon^\pm})), \quad (24_2)$$

$$H_\varphi = -A_n \frac{ik\varepsilon}{r} P_n^{m'} \cdot (rz_n(kr\sqrt{\varepsilon^\pm})) + C_n \frac{im}{r \sin \theta} P_n^m \cdot (rz_n(kr\sqrt{\varepsilon^\pm}))', \quad (25_1)$$

$$H_\theta = -A_n \frac{k\varepsilon}{r \sin \theta} P_n^m \cdot (rz_n(kr\sqrt{\varepsilon^\pm})) + C_n \frac{1}{r} P_n^{m'} \cdot (rz_n(kr\sqrt{\varepsilon^\pm}))', \quad (25_2)$$

$$E_r = A_n \frac{im}{r \sin \theta} P_n^m \frac{n(n+1)}{r} \cdot rz_n(kr\sqrt{\varepsilon^\pm}), \quad (26_1)$$

$$H_r = C_n \frac{im}{r \sin \theta} P_n^m \frac{n(n+1)}{r} \cdot z_n(kr\sqrt{\varepsilon^\pm}). \quad (26_2)$$

У рівностях (24)–(26) функція $z_n = j_n$ в області V^+ , $z_n = y_n$ в областях V^- , V^0 . Аналогічно коефіцієнти A_n , C_n мають верхній індекс «-» у V^- і верхній індекс «+» у V^+ . Для тіла обертання $E_\theta = E_S$ і $H_\theta = H_S$. Подібні формули отримаємо і у випадку виконання граничних умов на поверхні S_0 .

З умов неперервності на обох поверхнях S_ε і S_0 отримуємо вісім лінійних функціональних рівнянь відносно невідомих коефіцієнтів A , B , C , D . Використовуючи метод Петрова – Гальоркіна, дискретизуємо рівняння (22), (23), помноживши кожне з них на функції $\psi_q(\theta) = \sin^2 \theta \cdot P_q^m(\theta)$, $q = m, m+1, \dots$, і виконавши інтегрування по поверхнях S_ε та S_0 відповідно, отримаємо систему лінійних рівнянь для визначення невідомих коефіцієнтів. Внаслідок ортогональності функцій $P_n^m(\theta)$ частина доданків, які відповідають умовам на S_0 , перетвориться в нуль.

Враховуючи скінченну кількість членів N у розкладах (12), (13) і таку саму кількість функцій ψ_q , отримаємо $8N$ лінійних рівнянь для невідомих коефіцієнтів. Розширена блочна матриця цієї системи має вигляд

$$4N \begin{cases} \begin{array}{cccccccc} N & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & N \\ \{A_n^0\} & \{C_n^0\} & \{A_n^-\} & \{B_n^-\} & \{C_n^-\} & \{D_n^-\} & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \{A_n^0\} & \{C_n^0\} & \{A_n^-\} & \{B_n^-\} & \{C_n^-\} & \{D_n^-\} & 0 & 0 \end{array} \end{cases} N$$

$$4N \begin{cases} \begin{array}{cccccccc} N & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & N \\ 0 & 0 & \{A_n^-\} & \{A_n^-\} & \{C_n^-\} & \{D_n^-\} & \{A_n^+\} & \{C_n^+\} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \{A_n^-\} & \{A_n^-\} & \{C_n^-\} & \{D_n^-\} & \{A_n^+\} & \{C_n^+\} \end{array} \end{cases} N.$$

Розділивши коефіцієнти на дві групи

$$X_1 = [\{A_n^0\}, \{C_n^0\}, \{A_n^-\}, \{B_n^-\}, \{C_n^-\}, \{D_n^-\}]^T \quad \text{і} \quad X_2 = [\{A_n^+\}, \{C_n^+\}]^T$$

(« T » – символ транспонування матриці), отримаємо систему лінійних рівнянь зі зведеною блок-матрицею

$$\left(\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} - \varepsilon \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & C \end{pmatrix} \right) \cdot \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} = 0. \quad (27)$$

Елементи матриць A_{11} і A_{12} не містять власних значень ε , а матриці A_{21} , A_{22} і C залежать від ε нелінійно – ця залежність міститься в аргументах сферичних функцій. Множник ε у другому доданку матриці в (27) входить лінійно, оскільки він входить явно у формули (22), (23).

Матриці в системі рівнянь (27) мають складну блочну структуру. Так, матриця A_{11} складається з 6×6 ненульових матриць (блоків) розмірності $N \times N$, в якій чотири ліві нижні блоки є нульовими. Матриця A_{12} складається з 6×2 матриць такої самої розмірності $N \times N$ і її елементи у перших чотирьох рядках є нульовими. Матриця A_{21} складається з 2×6 блоків тієї самої розмірності $N \times N$ і два перших стовпчики у ній є нульовими. Матриця A_{22} складається з 2×2 блоків, перший стовпчик у якій (два блоки) є нульовим. Матриця C також складається з 2×2 блоків, і елементи першого стовпчика в ній містять залежність від ε в аргументах сферичних функцій, а елементи другого стовпчика не містять такої залежності.

Кожен із елементів загальних матриць A_{11} , A_{12} , A_{21} , A_{22} і C обчислюється за своїми формулами. Так, елементи першого рядка матриці A_{11} мають вигляд

$$a_{11}^{n1} = \int_0^\pi \frac{m}{a \sin \theta} P_n^m \frac{\partial}{\partial r} (r h_n^{(2)}(kr)) \cdot P_p^m \sin^2 \theta d\theta, \quad (28)$$

$$a_{11}^{n2} = k \int_0^\pi P_n^{m'} h_n^{(2)}(ka) \cdot P_p^m \sin^2 \theta d\theta, \quad (29)$$

$$a_{11}^{n3} = - \int_0^\pi \frac{m}{a \sin \theta} P_n^m \frac{\partial}{\partial r} (r j_n(kr)) \cdot P_p^m \sin^2 \theta d\theta, \quad (30)$$

$$a_{11}^{n4} = -\int_0^{\pi} \frac{m}{a \sin \theta} P_n^m \frac{\partial}{\partial r} (r y_n(kr)) \cdot P_p^m \sin^2 \theta d\theta, \quad (31)$$

$$a_{11}^{n5} = -k \int_0^{\pi} P_n^{m'} j_n(kr) \cdot P_p^m \sin^2 \theta d\theta, \quad (32)$$

$$a_{11}^{n6} = -k \int_0^{\pi} P_n^{m'} y_n(ka) \cdot P_p^m \sin^2 \theta d\theta, \quad (33)$$

вони не містять власного значення ε в аргументах сферичних функцій, а два останні елементи a_{11}^{n7} і a_{11}^{n8} (розмірності N) є нульовими. Індекси n і p у формулах (28)–(33) змінюються від 1 до N . Елементи другого стовпчика матриці C також не містять власного значення ε і мають вигляд

$$c^{12} = k \int_0^{\pi} \frac{m\varepsilon}{r \sin \theta} P_n^m j_n(kr) \cdot P_p^m \sin^2 \theta d\theta,$$

$$c^{22} = \int_0^{\pi} \frac{1}{R} P_n^m \frac{\partial}{\partial r} (r j_n(kr)) \cdot P_p^m \sin^2 \theta d\theta.$$

За аналогічними формулами обчислюємо і решту елементів загальних матриць, які не містять власного значення ε в аргументах сферичних функцій.

Елементи матриць A_{21} , A_{22} і C містять ε в аргументах сферичних функцій j_n і y_n , що і викликає необхідність використання ітераційної процедури для його знаходження. Наприклад, елементи першого стовпчика матриці C , які містять в аргументах сферичних функцій власне значення ε , обчислюються за формулами

$$c^{11} = ik \int_0^{\pi} P_n^{m'} j_n(kr\sqrt{\varepsilon}) \cdot P_p^m \sin^2 \theta d\theta,$$

$$c^{21} = k \int_0^{\pi} \frac{m}{\sin \theta} P_n^m j_n(kr\sqrt{\varepsilon}) \cdot P_p^m \sin^2 \theta d\theta.$$

Елементи матриць A_{21} і A_{22} обчислюються подібно, як елементи матриць A_{11} і A_{12} з заміною аргументу kr на $kr\sqrt{\varepsilon}$ у відповідних блоках.

Після певних перетворень система однорідних рівнянь (27) зводиться до стандартної форми задачі на власні значення

$$[F(\lambda) - \lambda I] \cdot X_2 = 0, \quad (34)$$

де

$$F(\lambda) = \{A_{22} - A_{21} \cdot (A_{11}^{-1} \cdot A_{12})\}^{-1} \cdot C,$$

$\lambda = 1/\varepsilon$, I – одинична матриця розміру $N \times N$. Таким чином, розмірність матриці системи зменшено вчетверо.

У формулі (34) підкреслено залежність матриці F від λ для того, щоб застосувати метод послідовних наближень. При цьому на кожному кроці розв'язується лінійна спектральна задача

$$[F(\lambda^{(p-1)}) - \lambda^{(p)} I] \cdot X_2 = 0, \quad (35)$$

де матриця F береться з попередньої ітерації. Незважаючи на те, що збіжність запропонованого методу послідовних наближень не доведена аналітично, вона спостерігається в процесі числових розрахунків із певним чи-

ном заданими початковими наближеннями. Слід відмітити, що перший крок ітераційного процесу (35) при початковому наближенні $\varepsilon_1^{(0)} = 0$ є еквівалентним до квазістатичного наближення, яке описано в [15].

У випадку сферичного тіла власні значення можна обчислити наближено з використанням граничних умов на його поверхні S_ε . Прирівнюючи значення компоненти E_ϕ зовні і всередині, одержимо трансцендентне рівняння для визначення власних значень [2]

$$\frac{\sqrt{\varepsilon_n} j'_n(ka\sqrt{\varepsilon_n})}{j_n(ka\sqrt{\varepsilon_n})} = \frac{y'_n(ka)}{y_n(ka)}.$$

Ця формула може бути використана як для порівняння з власними значеннями, отриманими шляхом розв'язання нелінійної системи (34) у випадку тіла сферичної форми, так і для перевірки правильності отриманих власних значень для тіла у формі еліпсоїда обертання у випадку, коли всі його координатні розміри прямують до одного значення (тіло перетворюється у сферу).

4. Числове моделювання. На першому етапі розглянуто числові результати, які стосуються дослідження збіжності ітераційного процесу (35) (рис. 3 і рис. 4). Числові розрахунки проведено для еліпсоїда обертання зі співвідношенням осей $a/b = 1.2/0.8$. У розкладах (12), (13) задавали кількість членів $N = 10$, відповідно таку саму кількість q пробних функцій задавали в методі Петрова – Гальоркіна. З аналізу графіків випливає, що ітераційний процес збігається досить швидко. Так, на 10-й ітерації різниця між шуканими власними значеннями (ε чи λ) є величиною порядку 10^{-15} . Найбільша відносна похибка спостерігається на першій ітерації і складає 0.26%, 0.22%, 9.28%, 16.97%, і 7.46% для перших п'яти власних значень $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4$ і ε_5 . (Номери кривих на рис. 3 і рис. 4 відповідають номерам власних значень.) Бачимо, що відносна похибка на першій ітерації зростає зі збільшенням номера n . Це пояснюється тим, що абсолютне значення ε (дійсна і уявна частини одночасно) зменшуються з ростом n . Звичайно, ця похибка на першій ітерації залежить також і від значення початкового наближення для ε_i . Аналіз кривих, наведених на рис. 3 і рис. 4, свідчить, що збіжність має аналогічний кількісний характер як для дійсної, так і для уявної частини ε .

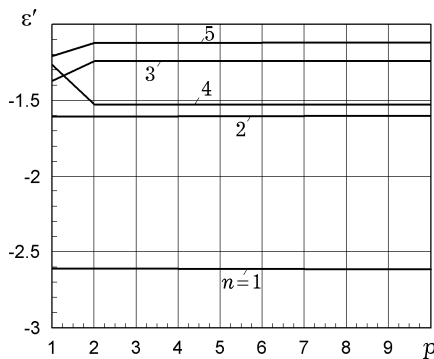


Рис. 3. Характер збіжності дійсної частини ε .

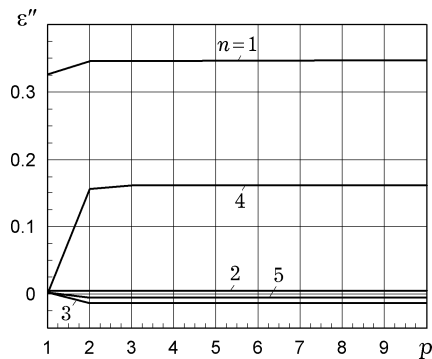


Рис. 4. Характер збіжності уявної частини ε .

На другому етапі розглянуто числові результати знаходження власних значень для тіла у вигляді еліпсоїда обертання. Числові результати для сферичного тіла було одержано в [4], а власні функції для цього випадку

було обчислено в [5]. Для еліптичного тіла значення відстані ρ від початку координат і її похідна у (22), (23) визначаються за формулами

$$\rho = \frac{ab}{\sqrt{a^2 \sin^2 \theta + b^2 \cos^2 \theta}},$$

$$\rho' = \frac{\rho^3 (b^2 - a^2)}{2 a^2 b^2} \sin(2\theta).$$

Перші два власні значення цієї задачі при співвідношенні півосей $a/b = 1.2/0.8$ показано на рис. 5 і рис. 6. Відповідні власні функції можуть бути легко порашовані з використанням стандартних функцій середовища Matlab або іншого програмного забезпечення. У наведених розрахунках розмір більшої півосі a еліпсоїда був фіксованим ($a = 150$ нм). Зміна параметра ka в межах від 0.2 до 2.0 відповідає зміні частоти ω в межах від $\omega = 63.62$ ТГц до $\omega = 636.2$ ТГц.

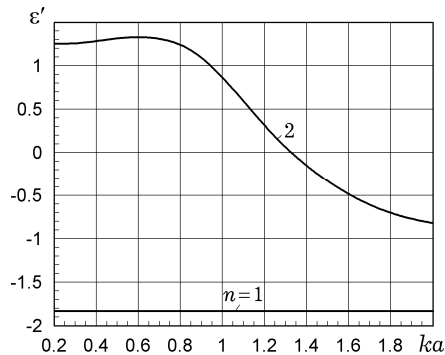


Рис. 5. Дійсні частини власних значень ε_n , $n = 1, 2$, для еліпсоїда при $a/b = 1.2/0.8$.

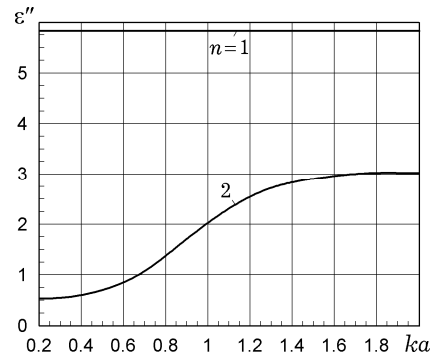


Рис. 6. Уявні частини власних значень ε_n , $n = 1, 2$, для еліпсоїда при $a/b = 1.2/0.8$.

На рис. 7 наведено значення дійсної і уявної частини перших трьох власних значень ε_1 , ε_2 і ε_3 для еліпсоїда зі значенням більшої півосі $a = 100$ нм. Поведінка власних значень при вибраних співвідношеннях a і b півосей еліпса близька до власних значень у випадку сферичної частинки [4], особливо при малих значеннях ka . Поведінка вищих власних значень, починаючи з третього, дуже близька до поведінки власних значень для сферичної частинки в усьому діапазоні значень параметра ka .

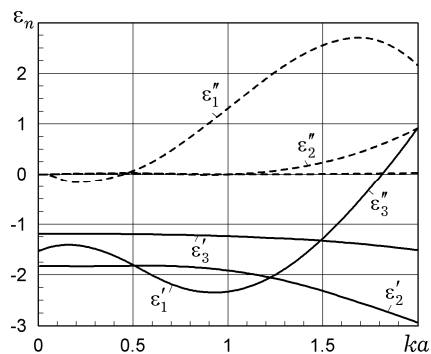


Рис. 7. Дійсна та уявна частини перших трьох власних значень ε_1 , ε_2 , ε_3 для еліпсоїда обертання.

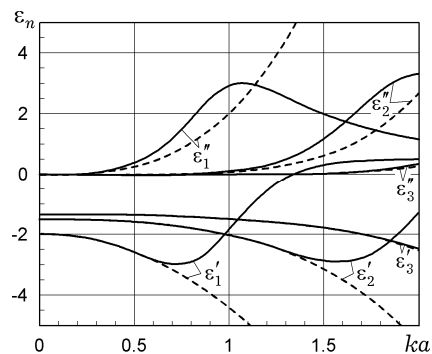


Рис. 8. Власні значення для сферичної частинки, обчислені запропонованим підходом і методом [14].

Для перевірки адекватності запропонованого підходу проведено порівняння з результатами для сферичної частинки, отримані в межах квазістатичного підходу в монографії [15]. Радіус частинки $a = 100$ нм. На рис. 8 наведено результати для перших трьох власних значень ε_1 , ε_2 , ε_3 . Дійсні частини відмічені одним штрихом у верхньому індексі, уявні – двома. Суцільні криві відповідають запропонованому методу, а штрихові – квазістатичному наближенню. Із наведених результатів випливає, що квазістатичне наближення описує точно власні значення лише при невеликих частотах (малі значення ka). Хоча для вищих власних значень ε_2 і ε_3 співпадіння є набагато кращим, але з фізичної точки зору це не є визначальним, оскільки перше власне значення і належна йому власна функція дають основний вклад у розв'язок відповідної неоднорідної задачі.

За відомими власними значеннями однорідної задачі ε -методу можемо обчислити компоненти електромагнітного поля, використовуючи формули (22), (23). На основі отриманих значень легко обчислюються характеристики поглинання [21] і розсіювання [17] наночастинок. Цей підхід дозволяє обчислювати характеристики поглинання і розсіювання з набагато більшою точністю, ніж запропоновані підходи в межах квазістатичного наближення [7] та методу дискретних диполів [25] і скінченних різниць [8, 22], які для проведення розрахунків вимагають великих обсягів оперативної пам'яті.

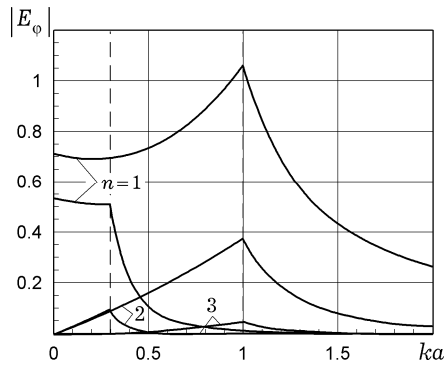


Рис. 9. Амплітуди компоненти E_φ , які відповідають першим трьом власним значенням ε_i для еліпсоїда обертання.

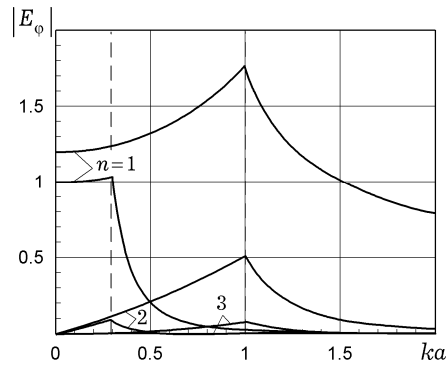


Рис. 10. Амплітуди компоненти E_φ , які відповідають першим трьом власним значенням ε_i для сфери

На рис. 9 наведено амплітуди компоненти електричного поля E_φ для еліптичної частинки у випадку двох резонансів при $ka = 0.3$ і $ka = 1.0$. Величина більшої півосі еліпса $a = 100$ нм, тобто значення $ka = 0.3$ і $ka = 1.0$ відповідають довжинам хвиль $\lambda = 2094$ нм і $\lambda = 628$ нм. Значення амплітуди компоненти E_φ наведено для $\theta = \pi/8$. Отримані результати дозволяють зробити висновок, що при заданому розмірі еліптичної частинки резонансні значення (максимуми амплітуди) досягаються при довжинах хвиль $\lambda = 2094$ нм і $\lambda = 628$ нм, причому амплітуда відповідного коливання спадає зі збільшенням n від $n = 1$ до $n = 3$. Аналогічні результати для сферичної наночастинки [5] наведено на рис. 10. Максимальні значення $|E_\varphi|$ в цьому випадку є більшими, ніж для еліптичної частинки, оскільки ефективний поперечник розсіювання [3] для еліпсоїда при заданому співвідношенні півосей еліпса a і b є меншим, ніж для сфери з таким самим радіусом a .

Висновки. Для обчислення характеристик випромінювання частинок нанорозміру використано ε -метод УМВК. Сформульовано відповідну однорідну задачу розсіювання і запропоновано метод її розв'язання з викорис-

танням УМВК. Для подання дотичних компонент електричного і магнітного полів на поверхні тіла використано потенціали Дебая. Невідомі коефіцієнти в потенціалах Дебая визначено з граничних умов неперервності електричного і магнітного поля на границі тіла шляхом розв'язання відповідної системи лінійних рівнянь. Отримані власні значення і відповідні власні функції використано для розв'язання початкової дифракційної задачі. Проведені числові розрахунки демонструють швидку збіжність запропонованого методу послідовних наближень обчислення власних значень. Кількість членів у поданні потенціалів Дебая не перевищує десяти для отримання розв'язку однорідної задачі з точністю до 1 %, що дасть можливість знаходити розв'язок відповідної неоднорідної задачі з високою точністю.

1. *Войтович Н. Н.* Однородные задачи обобщенного метода собственных колебаний для тел вращения // *Радиотехника и электроника*. – 1980. – **25**, № 7. – С. 1526–1529.
2. *Войтович Н. Н., Каценеленбаум Б. З., Сивов А. Н.* Обобщенный метод собственных колебаний в теории дифракции. – Москва: Наука, 1977. – 416 с.
3. *Рытов С. М., Крауцов Ю. А., Татарский В. И.* Введение в статистическую радиофизику. – Ч. II. Случайные поля. – Москва: Наука, 1978. – 464 с.
4. *Andriychuk M. I., Katsenelenbaum B. Z., Klimov V. V., Voitovich N. N.* Application of generalized method of eigenoscillations to problems of nanoplasmonics // *Proc. of XVIth Int. Seminar/Workshop on Direct and Inverse Problems of Electromagnetic and Acoustic Wave Theory (DIPED)*, Lviv, 26-29 September 2011. – Lviv, 2011. – P. 165–169.
5. *Andriychuk M.* Investigation of radiation properties of nanoparticles by generalized eigenoscillation method // *Proc. 9th Int. Conf. on Advanced Computer Information Technologies (ACIT)*, 5–7 June 2019, Ceske Budejovice, Czech Republic. – 2019. – P. 109–112. – <https://doi.org/10.1109/ACITT.2019.8779900>.
6. *Agranovich M. S., Katsenelenbaum B. Z., Sivov A. N., Voitovich N. N.* Generalized method of eigenoscillations in diffraction theory. – Berlin: Wiley-VCH, 1999. – 377 p.
7. *Barnes W. L., Dereux A., Ebbesen T. W.* Surface plasmon subwavelength optics // *Nature*. – 2003. – **424**, No. 6950. – P. 824–830. – <https://doi.org/10.1038/nature01937>.
8. *Bertó-Roselló F., Xifré-Pérez E., Ferré-Borrull J., Marsal L. F.* 3D-FDTD modelling of optical biosensing based on gold-coated nanoporous anodic alumina // *Results in Physics*. – 2018. – **11**. – P. 1008–1014. – <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2018.10.067>.
9. *Bozhevolnyi S. I.* (Ed.) Plasmonic nanoguides and circuits. – Rochester etc.: Pan Stanford Publishing, 2008. – viii+441 p.
10. *Brongersma M. L., Kik P. G.* (Eds.) Surface plasmon nanophotonics. – Springer Ser. in Optical Sci. – Vol. 131. – New York: Springer, 2007. – viii+268 p.
11. *García M. A.* Surface plasmons in metallic nanoparticles: fundamentals and applications // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2011. – **44**, No. 28. – Article 283001. – 20 p. – <https://doi.org/10.1088/0022-3727/44/28/283001>.
12. *Hage J. I., Greenberg J. M., Wang R. T.* Scattering from arbitrarily shaped particles: Theory and experiment // *Appl. Optics*. – 1991. – **30**, No. 9. – P. 1141–1152. – <https://doi.org/10.1364/AO.30.001141>.
13. *Inan U. S., Marshall R. A.* Numerical electromagnetics: The FDTD Method. – New York: Cambridge Univ. Press, 2011. – xix+390 p.
14. *Katsenelenbaum B. Z.* High-frequency electrodynamics. – Berlin: Wiley-VCH, 2006. – 329 p.
15. *Klimov V.* Nanoplasmonics. – Boca Raton: CRC Press, 2014. – 598 p.
16. *Lakhtakia A.* Strong and weak forms of the method of moments and the coupled dipole method for scattering of time-harmonic electromagnetic-fields // *Int. J. Modern Phys. C*. – 1992. – **3**, No. 3. – P. 583–603. – <https://doi.org/10.1142/S0129183192000385>.
17. *Luther J. M., Jain P. K., Ewers T., Alivisatos P. A.* Localized surface plasmon resonances arising from free carriers in doped quantum dots // *Nature Mater.* – 2011. – **10**, No. 5. – P. 361–366. – <https://doi.org/10.1038/nmat3004>.
18. *Maier S. A.* Plasmonics: Fundamentals and applications. – New York: Springer, 2007. – xv+223 p.

19. Sarid D., Challener W. Modern introduction to surface plasmons: Theory, mathematica modeling, and applications. – Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2010. – 386 p.
20. Shalaev V. M., Kawata S. (Eds.) Nanophotonics with surface plasmons. – Elsevier, 2007. – 340 p.
21. Sheikholeslami S., Jun Y., Jain P. K., Alivisatos A. P. Coupling of optical resonances in a compositionally asymmetric plasmonic nanoparticle dimer // Nano Letters. – 2010. – **10**, No. 7. – P. 2655–2660. – <https://doi.org/10.1021/nl101380f>.
22. Sun W., Loeb N. G., Videen G., Fu Q. Examination of surface roughness on light scattering by long ice columns by use of a two-dimensional finite-difference time-domain algorithm // Appl. Optics. – 2004. – **43**, No. 9. – P. 1957–1964. – <https://doi.org/10.1364/AO.43.001957>.
23. Taflove A., Oskooi A., Johnson S. G. Advances in FDTD computational electrodynamics: Photonics and nanotechnology. – Boston etc.: Artech House, 2013. – 623 p.
24. Tretyakov S. Analytical modeling in applied electromagnetics. – Boston etc.: Artech House, 2003. – 272 p.
25. Wahbeh M. Discrete-Dipole-Approximation (DDA) study of the plasmon resonance in single and coupled spherical silver nanoparticles in various configurations. – Master thesis. – Montreal: Concordia Univ., 2011. – 178 p.
26. Yee K. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media // IEEE Trans. Antenn. Propag. – 1966. – **14**, No. 3. – P. 302–307.

ПРИМЕНЕНИЕ ОБОБЩЕННОГО МЕТОДА СОБСТВЕННЫХ КОЛЕБАНИЙ К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧ РАССЕЙЯНИЯ НА НАНОСТРУКТУРАХ

Рассмотрена задача рассеяния электромагнитных волн на диэлектрическом теле малого размера с помощью обобщенного метода собственных колебаний. Неоднородная задача сформулирована на основании одного из вариантов обобщенного метода собственных колебаний, в котором диэлектрическая проницаемость является собственным значением. Соответствующая однородная задача решена с использованием потенциалов Дебая. Получена система линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов разложения, для решения которой применен метод последовательных приближений. Приведенные численные результаты иллюстрируют эффективность предложенного метода.

Ключевые слова: обобщенный метод собственных колебаний, система уравнений Максвелла, потенциалы Дебая, условие непрерывности, нелинейная спектральная задача, численное моделирование.

APPLICATION OF THE GENERALIZED EIGENOSCILLATION METHOD FOR SOLVING THE SCATTERING PROBLEMS ON THE NANOSTRUCTURES

The problem of the scattering electromagnetic waves on the small dielectric body using the generalized method of eigenoscillation is considered. The non-homogeneous problem is formulated based on one variant of generalized method of eigenoscillation, in which the dielectric permittivity plays a role of an eigenvalue. The corresponding homogeneous problem is solved using the Debay potentials. The system of linear algebraic equations for unknown expansion coefficients is obtained and solved by the method of successive approximations. The presented computational results confirm the effectiveness of the proposed approach.

Key words: generalized method of eigenoscillations, system of the Maxwell equations, Debay's potentials, continuity condition, nonlinear spectral problem, numerical modeling.