

# Численное моделирование рассеяния неоднородных волн нано-размерными частицами

О.В. БЕЛАЙ, Л.Л. ФРУМИН, Д.А. ШАПИРО

*Институт автоматизации и электрометрии СО РАН,  
проспект академика Коптюга 1, Новосибирск, 630090, Россия.*

С.В. ПЕРМИНОВ

*Институт физики полупроводников им. академика А.В. Ржанова, СО РАН,  
проспект академика Лаврентьева 13, Новосибирск 630090, Россия*

1 марта 2011 г.

Рассматривается задача о рассеянии электромагнитной волны, падающей на плоскую границу двух сред под углом, превышающим угол полного внутреннего отражения, на диэлектрическом цилиндре, помещенном во второй среде параллельно границе. Разработана программа для расчета рассеяния неоднородной волны одним или двумя эллиптическими цилиндрами, моделирующими наноразмерную частицу и оптический зонд, методом граничных элементов. В расчетах используется функция Грина двумерного волнового уравнения Гельмгольца для двух диэлектрических сред, удовлетворяющая условиям непрерывности на границе раздела и условиям излучения на бесконечности, что позволяет ограничиться расчетной сеткой, включающей только поверхности цилиндров. Рассчитаны диаграммы рассеянного поля на поверхности цилиндра для длин волн, сравнимых с радиусом цилиндра. Обнаружена существенная роль рассеяния волн на «изображениях» цилиндров. Решение задачи рассеяния неоднородной волны наноразмерными частицами необходимо для интерпретации данных ближнепольной оптической микроскопии.

В физической оптике рассеяние неоднородных волн на диэлектрических либо металлических частицах представляет одну из тех интересных, и в то же время недостаточно исследованных задач, которые просто формулируются, но имеют значительное научное и прикладное значение, и до сих пор далеки от окончательного решения. Значительные усилия были затрачены на изучение рассеяния неоднородной волны на сферической или цилиндрической частице (см. монографию [1], обзоры [2, 3] и цитируемую в них литературу). Подходы, ранее обычно используемые авторами, были, как правило, ограничены предельными случаями малых (точечных) проводников или проводящих полупространств [4, 5], или же требовали огромных ресурсов для своего численного моделирования [6]. Таким образом, ближнепольная дифракция неоднородной световой волны представляет собой довольно сложную проблему даже в простейшем случае плоской неоднородной волны. Вместе с тем, рассеяние неоднородных волн имеет важное практическое применение в ближнепольной сканирующей микроскопии — быстро развивающейся области современной нанофотоники [1]. Рассеяние неоднородной волны на одном цилиндре исследовано авторами в работе [7]

В данной работе авторы предлагают общий подход, основанный на использовании специальной функции Грина, которая удовлетворяет граничным условиям на плоскости, разделяющей две среды. При этом сложная задача рассеяния волн на объекте, с

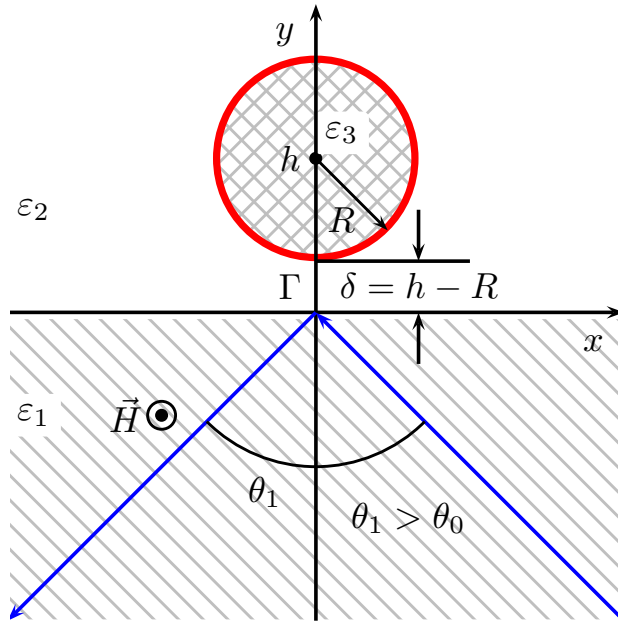


Рис. 1. Геометрия рассеяния света.

учетом близко расположенной границы, с помощью такой функции Грина, сводится к значительно более простой задаче рассеяния этим объектом, находящимся в однородном пространстве, что позволяет ограничиться расчетной сеткой, включающей только поверхности цилиндров.

Постановка задачи рассеяния схематически представлена на Рис. 1. Плоская волна  $\mathcal{H}_{\text{inc}} \exp(-i\omega t + i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r})$  падает из диэлектрической среды с проницаемостью  $\varepsilon_1$  на границу раздела. Угол падения – угол между волновым вектором  $\mathbf{k}_1$  и нормалью к поверхности, обозначен нами как  $\theta_1$ . Если этот угол превышает  $\theta_0 = \arcsin \sqrt{\varepsilon_2/\varepsilon_1}$ , угол полного внутреннего отражения, то в верхней полуплоскости возникает неоднородная волна, описываемая выражением  $\exp(-\kappa y + ik_{2x}x)$ , где  $\kappa = \omega \sqrt{\varepsilon_1 \sin^2 \theta_1 - \varepsilon_2}/c$ ,  $k_{2x} = k_{1x} = \omega \sin \theta_1 \sqrt{\varepsilon_1}/c$ . Здесь  $\omega$ ,  $c$  – частота и скорость света,  $\mathbf{k}_2$  волновой вектор в среде 2.

Возможны две независимые поляризации падающей волны. Далее рассматривается  $p$ -волна с магнитным вектором, перпендикулярным плоскости падения. Решение для  $s$ -волны может быть получено аналогично.  $z$ -компонента магнитного поля волны удовлетворяет волновому уравнению Гельмгольца:

$$(\Delta + k^2)\mathcal{H} = 0, \quad k^2 = \varepsilon \frac{\omega^2}{c^2}, \quad (1)$$

где  $\varepsilon = \varepsilon_1$  при  $y < 0$ , при  $y > 0$   $\varepsilon = \varepsilon_2$  вне, и  $\varepsilon = \varepsilon_3$  – внутри области, ограниченной контуром  $\Gamma$ ,  $\Delta$  – двумерный оператор Лапласа,  $\mathbf{k}$  – волновой вектор. Магнитное поле должно также удовлетворять граничным условиям на поверхности  $y = 0$  и на контуре  $\Gamma$ :

$$[\mathcal{H}] = \left[ \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial n} \right] = 0, \quad (2)$$

где квадратные скобки обозначают скачок (двустороннюю разность), а  $\mathbf{n}$  – нормаль к поверхности.

Функция Грина  $G(x, y; x', y')$ , удовлетворяющая неоднородному уравнению в средах 1 и 2,

$$(\Delta + k^2)G = \delta(x - x')\delta(y - y'), \quad (3)$$

в нашем случае зависит только от разности  $x - x'$  в силу трансляционной симметрии. Граничное условие для нее при  $y = 0$  аналогично (2):

$$[G(x, y; x', y')] = \left[ \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial G((x, y; x', y'))}{\partial y} \right] = 0. \quad (4)$$

После преобразования Фурье

$$G(x, y; 0, y') = \int_{-\infty}^{\infty} G_q(y, y') e^{iqx} \frac{dq}{2\pi} \quad (5)$$

уравнение (3) сводится к обыкновенному дифференциальному уравнению, имеющему экспоненциальные решения. Используя условия (4), мы получаем функцию Грина при  $y' > 0$  в  $q$ -области

$$G_q = \begin{cases} -\frac{1+r(q)}{2\mu_2} e^{\mu_1 y - \mu_2 y'}, & y < 0 \\ -\frac{1}{2\mu_2} (e^{-\mu_2 |y - y'|} + r(q) e^{-\mu_2 (y + y')}), & y > 0. \end{cases} \quad (6)$$

Здесь

$$r(q) = \frac{\varepsilon_1 \mu_2 - \varepsilon_2 \mu_1}{\varepsilon_1 \mu_2 + \varepsilon_2 \mu_1}, \quad \mu_{1,2} = \sqrt{q^2 - k_{1,2}^2} \quad (7)$$

– коэффициент отражения Френеля для  $p$ -волны при нормальном падении [9]. Проводя преобразование Фурье (5) от функции (6) при  $y > 0$  мы получим два слагаемых  $G = G_1 + G_2$ . Здесь требуется провести разрез в комплексной  $q$ -плоскости так, чтобы квадратные корни, входящие в оба слагаемых, стали однозначными функциями своего аргумента.

Первое слагаемое сводится к двумерной функции Грина однородного пространства

$$G_1(x, y; x', y') = \frac{1}{4i} H_0^{(1)} \left( k_2 \sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2} \right),$$

где  $H_0^{(1)}$  обозначает функцию Ганкеля первого рода [10], удовлетворяющую условиям излучения. Второе слагаемое в функции Грина  $G_2$  описывает отраженное изображение от точечного источника. Амплитуда изображения источника для каждого  $q$  равна коэффициенту отражения  $r(q)$ . Таким образом для каждой точки источника с координатами  $(x', y')$ , имеется ее зеркальное изображение в точке  $(x', -y')$  с амплитудой  $r(q)$ . Суммарное поле в верхней полуплоскости определяется суммой полей генерируемых источником и его образом. Ранее функция Грина такого вида была найдена для сферических волн [11] (см. также [12, §71]), для цилиндрических волн [13], а также применялась при описании плазмонного резонанса для однородной волны.

Интегральная теорема Грина [8] позволяет выразить поле  $\mathcal{H}(\mathbf{r})$  при  $\mathbf{r} \notin \Gamma$  в виде контурного интеграла. Для этого нам необходимо знать  $\mathcal{H}$  и  $\partial \mathcal{H} / \partial \mathbf{n}$  на контуре  $\Gamma$ . Эти две *независимых* функции удовлетворяют следующей паре интегральных уравнений при  $r \in \Gamma$ :

$$\frac{1}{2} \mathcal{H}(\mathbf{r}) = \oint_{\Gamma} \left( \frac{\partial G}{\partial n'} \mathcal{H}' - G \frac{\partial \mathcal{H}'}{\partial n'} \right) ds' + \mathcal{H}_0(\mathbf{r}), \quad (8)$$

$$\frac{1}{2} \mathcal{H}(\mathbf{r}) = - \oint_{\Gamma} \left( \frac{\partial g}{\partial n'} \mathcal{H}' - g \frac{\varepsilon_3}{\varepsilon_2} \frac{\partial \mathcal{H}'}{\partial n'} \right) ds', \quad (9)$$

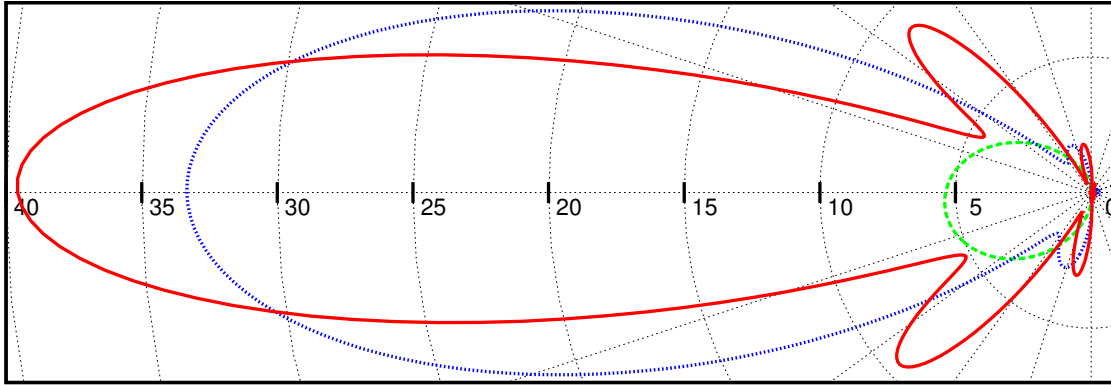


Рис. 2. Интенсивность рассеяния неоднородной волны  $|\mathcal{H}_s/\mathcal{H}_{\text{inc}}|^2$  на контуре  $\Gamma$  как функция угла в полярных координатах для цилиндра радиусом  $R = 0.25$  (штриховая кривая),  $0.5$  (пунктир),  $0.75 \mu\text{m}$  (сплошная кривая).

которые получаются при приближении к контуру  $\Gamma$  из внешней и из внутренней области. Здесь  $\mathcal{H}' \equiv \mathcal{H}(\mathbf{r}')$ ,  $\mathcal{H}_0(\mathbf{r})$  – известное решение задачи Френеля для сред 1 и 2 без цилиндра,  $\mathbf{n}'$  – внутренняя нормаль к контуру  $\Gamma$ ,  $g(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  – произвольное решение уравнения (3). После решения пары интегральных уравнений (8), (9) поле в произвольной точке можно вычислить, вновь используя теорему Грина.

Численная реализация данного подхода, основанного на граничных интегральных уравнениях, известна как метод граничных элементов (МГЭ). Он возник первоначально для решения прикладных задач теории упругости, электростатики и других инженерных задач: [14]. МГЭ используется и для решения задач рассеяния для уравнения Гельмгольца (для случая однородных волн), см., например, [15]. Преимуществом метода интегральных уравнений и, соответственно, МГЭ, является уменьшение размерности решаемой задачи. Например, в двумерной геометрии этот метод сводится к интегралам только по одномерным контурам. Поэтому МГЭ является эффективным методом для задач со сложной геометрией. При численной реализации пара интегральных уравнений (8), (9) заменяется системой линейных уравнений, а искомые функции  $\mathcal{H}$  и  $\partial\mathcal{H}/\partial\mathbf{n}$  – векторами на дискретной сетке на поверхности контура.

Разработанный авторами численный алгоритм расчета рассеяния неоднородной волны на цилиндре сначала тестировался на известном аналитическом решении для случая рассеяния однородной волны на цилиндре [16]. Результаты расчетов рассеяния однородной волны на диэлектрическом цилиндре для различных отношений длины волны к радиусу цилиндра, в пределах точности расчетов совпадают с аналитическим решением. Расчеты также хорошо согласуются с дипольной аппроксимацией решения для случая больших длин волн  $kR \ll 1$  при  $\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$ .

В нашем рассмотрении мы полагали  $\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = 2.25$ ,  $\varepsilon_2 = 1$ . Длина волны  $\lambda = 1 \mu\text{m}$ , а угол падения был выбран  $\theta_1 = 0.7298 > \theta_0$ . При падении под таким углом неоднородная волна становится «почти» однородной – глубина затухания в 10 раз превышает длину волны. В этом случае диаграмма рассеяния должна походить на диаграмму рассеяния однородной волны. Зазор между цилиндром и плоскостью составлял  $\delta = 0.01 \mu\text{m}$ , а расстояние между центром цилиндра и плоскостью, соответственно,  $h = \delta + R$ . Радиус изменялся от  $R = 0.25$  до  $0.75 \mu\text{m}$ . Некоторые результаты расчетов представлены на Рис. 2. Рассеяние оказалось сильно анизотропным. Для «толстого цилиндра» диаграмма рассеяния содержит несколько пиков обусловленных эффектом интерференции волн. На

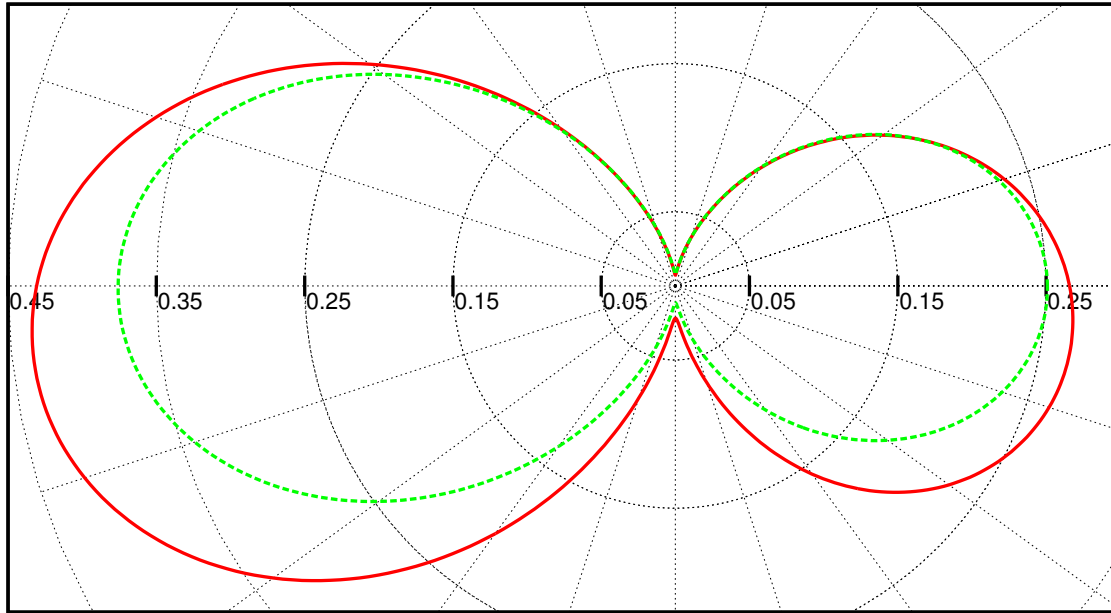


Рис. 3. Интенсивность рассеяния неоднородной волны на цилиндре радиуса  $R = 0.1 \mu\text{m}$  (сплошная кривая). Расчет без учета отражения –  $G_2 = 0$  представлен штриховой кривой.

Рис. 3 представлена диаграмма рассеяния для  $R = 0.1 \mu\text{m}$ . Для сравнения мы также представили штриховой кривой расчет полученный без учета отражений ( $G_2 = 0$ ). Истинная диаграмма оказалась значительно более асимметрична, как результат вклада от изображения. Отметим, что с увеличением угла падения, когда неоднородность волны возрастает и она начинает затухать на расстояниях, сравнимых с диаметром цилиндра, асимметрия еще более возрастает.

На первый взгляд может показаться, что если взять решение для рассеяния на цилиндре плоской однородной монохроматической волны [16]  $\mathcal{H}(\mathbf{r}) = \mathcal{H}_0 \exp(-i\omega t +iky)$ ,  $-\infty < y < \infty$ , то можно получить решение для неоднородной волны просто с помощью аналитического продолжения, путем замены  $k \rightarrow ik$ . Однако полученное таким образом «решение» не является ограниченным решением волнового уравнения во всем пространстве при  $-\infty < y < \infty$ . Это решение необходимо рассматривать в области, ограниченной некоторой границей, например, в полупространстве. В этом случае становится очевидной необходимость учета граничных условий на этой границе.

Метод граничных интегральных уравнений был применен для описания рассеяния неоднородной волны на наноразмерной частице, моделируемой диэлектрическим цилиндром. Методом граничных элементов были рассчитаны диаграммы рассеянного поля на поверхности цилиндра для длин волн, сравнимых с радиусом цилиндра. Обнаружена существенная роль рассеяния волн на «изображениях» цилиндров. Использовалась специальная функция Грина, применимая для описания рассеяния на цилиндрическом теле (или нескольких телах). Эта функция Грина может быть обобщена на трехмерный случай и может найти применение в других численных подходах, таких как метод дискретных диполей, а также для построения борновских приближений.

Авторы благодарят Е.В. Подивилова за полезные обсуждения. Работа поддержана госпрограммой НШ-4339.2010.2, Программой Президиума РАН # 21 и междисциплинарным грантом СО РАН #42 .

## Список литературы

- [1] Novotny L., Hecht B. Principles of Nano-Optics. Cambridge University Press, Cambridge — New York. 2006.
- [2] Girard C., Dereux A. Near-field optics theories. Reports on Progress in Physics. V.59. 1996. P.657–699.
- [3] Girard C. Near fields in nanostructures. Reports on Progress in Physics. V.68. N.8. 2005. P.1883-1933.
- [4] Madrazo A., Nieto-Vesperinas M. Scattering of electromagnetic waves from a cylinder in front of a conducting plane. J. Opt. Soc. Am. A. V.12, N.6. 1995. P.1298-1309.
- [5] Lindell I., Sihvola A. H., Muinonen K. O., Barber P. W. Scattering by a small object close to an interface. I. Exact-image theory formulation. J. Opt. Soc. Am. A. V.8, N.3. 1991. P.472–476.
- [6] Videen G. Light scattering from a sphere on or near a surface. J. Opt. Soc. Am. A. V.8, N.3. 1991. P.483–489.
- [7] Belay O. V., Frumin L. L., Perminov S. V., Shapiro D. A. Scattering of evanescent electromagnetic waves by cylinder near flat boundary: the Green function and fast numerical method. Opt. Lett. V.36. 2011 (в печати).
- [8] Колтон Д., Кресс Р. Методы интегральных уравнений в теории рассеяния. М.:Мир. 1987.
- [9] Раутиан С. Г. Введение в физическую оптику. УРСС, Москва. 2009.
- [10] Olver F. W. J., Lozier D. W., Boisvert R. F., Clark C. W. NIST Handbook of Mathematical Functions. Cambridge — New York: Cambridge University Press. 2010.
- [11] Бреховских Л. М. Отражение и преломление сферических волн. УФН. Т.38, N.1. 1949. С.1-42.
- [12] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Гидродинамика (Курс теоретической физики . Т. 6). Изд. 4-е, Наука. Москва. 1988.
- [13] Pincemin François, Sentenac Anne, Greffet Jean-Jacques Near field scattered by a dielectric rod below a metallic surface//J. Opt. Soc. Am. A. V.11, N.3. 1994. P.1117-1127.
- [14] Brebbia C. A., Telles J. C. F., Wrobel L. C. Boundary element techniques. Springer, Berlin. 1984.
- [15] Зимовец С. В., Гешев П. И. Метод граничных интегральных уравнений для расчета рассеяния света на двумерных наночастицах. ЖТФ, Т.76. 2006. С.291–296.
- [16] Harrington R. F. Time-Harmonic Electromagnetic Fields. McGraw-Hill, NewYork. 1961.