

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ИТМО
ITMO University

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА/GRADUATION THESIS

Многочратное рассеяние в задачах моделирования и оптимизации оптического отклика ансамблей наноструктур с индуцированными мультипольными моментами

Автор/ Author

Устименко Никита Алексеевич

Направленность (профиль) образовательной программы/Major

Нанопотоника и квантовая оптика 2017

Квалификация/ Degree level

Бакалавр

Руководитель ВКР/ Thesis supervisor

Барышникова Ксения Владимировна, кандидат физико-математических наук, Университет ИТМО, физический факультет, старший научный сотрудник

Группа/Group

Z3443

Факультет/институт/кластер/ Faculty/Institute/Cluster

физический факультет

Направление подготовки/ Subject area

16.03.01 Техническая физика

Обучающийся/Student

Документ подписан	
Устименко Никита Алексеевич	
01.06.2021	

(эл. подпись/ signature)

Устименко
Никита
Алексеевич

(Фамилия И.О./ name
and surname)

Руководитель ВКР/
Thesis supervisor

Документ подписан	
Барышникова Ксения Владимировна	
02.06.2021	

(эл. подпись/ signature)

Барышникова
Ксения
Владимировна

(Фамилия И.О./ name
and surname)

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ИТМО
ITMO University**

**ЗАДАНИЕ НА ВЫПУСКНУЮ КВАЛИФИКАЦИОННУЮ РАБОТУ /
OBJECTIVES FOR A GRADUATION THESIS**

Обучающийся / Student Устименко Никита Алексеевич

Группа/Group Z3443

Факультет/институт/кластер/ Faculty/Institute/Cluster физический факультет

Квалификация/ Degree level Бакалавр

Направление подготовки/ Subject area 16.03.01 Техническая физика

Направленность (профиль) образовательной программы/Major Нанопотоника и квантовая оптика 2017

Специализация/ Specialization

Тема ВКР/ Thesis topic Многократное рассеяние в задачах моделирования и оптимизации оптического отклика ансамблей наноструктур с индуцированными мультипольными моментами

Руководитель ВКР/ Thesis supervisor Барышникова Ксения Владимировна, кандидат физико-математических наук, Университет ИТМО, физический факультет, старший научный сотрудник

Срок сдачи студентом законченной работы до / Deadline for submission of complete thesis 31.05.2021

Техническое задание и исходные данные к работе/ Requirements and premise for the thesis

Исследование применимости метода связанных мультиполей и борновских приближений различных порядков для моделирования резонансного оптического отклика кольца сферических наночастиц. Исследование фокусирующих свойств кольца наночастиц в нулевом борновском приближении. Получение металинз с заданным фокусным расстоянием для работы на магнитном дипольном и квадрупольном резонансах наночастицы при помощи оптимизации в нулевом борновском приближении. Проверка результатов оптимизации методом Т-матриц. Исследование сходимости борновского ряда вблизи мультипольного резонанса одиночной наночастицы

Содержание выпускной квалификационной работы (перечень подлежащих разработке вопросов)/ Content of the thesis (list of key issues)

Введение

1. Теоретическое введение

1.1. Мультипольное разложение оптического отклика сферической наночастицы

1.2. Модель связанных мультиполей

1.3. Борновский ряд и порядки рассеяния

1.4. Функции Грина для мультиполей и их производные

2. Результаты моделирования кольца наночастиц

- 2.1. Применимость мультипольной модели
 - 2.2. Фокусирующие свойства кольца наночастиц
 - 2.3. Применимость нулевого борновского приближения
 - 2.4. Борновские приближения более высокого порядка
 3. Оптимизация металинз
 - 3.1. Описание оптимизационного алгоритма
 - 3.2. Результаты оптимизации
 4. Сходимость борновского ряда
- Заключение

Перечень графического материала (с указанием обязательного материала) / List of graphic materials (with a list of required material)

Исходные материалы и пособия / Source materials and publications

1. Babicheva V., Evlyukhin A. Analytical model of resonant electromagnetic dipole-quadrupolecoupling in nanoparticle arrays // Phys. Rev. B. — 2019. — Т. 99. — С. 195444
2. Enhancement of artificial magnetism via resonant bianisotropy / D. Markovich [и др.] // Scientific Reports. — 2016. — Т. 6 — С. 22546
3. Khorasaninejad M., Capasso F. Metalenses: Versatile multifunctional photonic components // Science. — 2017. — Т. 358. — eaam8100
4. Nieto-Vesperinas M. Fundamentals of Mie scattering //Dielectric Metamaterials. – Woodhead Publishing, 2020. – С. 39-72.
5. Shifts of a Resonance Line in a Dense Atomic Sample / J. Javanainen [и др.] // Physical ReviewLetters. — 2014. — Т. 112. — С. 113603

Дата выдачи задания/ Objectives issued on 06.05.2021

СОГЛАСОВАНО / AGREED:

Руководитель ВКР/
Thesis supervisor

Документ подписан	
Барышникова Ксения Владимировна	
06.05.2021	

(эл. подпись)

Барышникова
Ксения
Владимировна

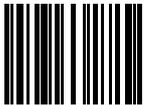
Задание принял к
исполнению/ Objectives
assumed by

Документ подписан	
Устименко Никита Алексеевич	
06.05.2021	

(эл. подпись)

Устименко
Никита
Алексеевич

Руководитель ОП/ Head
of educational program

Документ подписан	
Белов Павел Александрович	

Белов Павел

21.05.2021
(эл. подпись)

Александрович

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ИТМО
ITMO University

АННОТАЦИЯ
ВЫПУСКНОЙ КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ /
SUMMARY OF A GRADUATION THESIS

Обучающийся/ Student

Устименко Никита Алексеевич

Наименование темы ВКР / Title of the thesis

Многочастное рассеяние в задачах моделирования и оптимизации оптического отклика ансамблей наноструктур с индуцированными мультипольными моментами

Наименование организации, где выполнена ВКР/ Name of organization

Университет ИТМО

ХАРАКТЕРИСТИКА ВЫПУСКНОЙ КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ/
DESCRIPTION OF THE GRADUATION THESIS

1. Цель исследования / Research objective

Разработка метода последовательных борновских приближений и исследование его применимости для задач моделирования и оптимизации оптического отклика ансамблей наночастиц с электрическими и магнитными мультипольными резонансами

2. Задачи, решаемые в ВКР / Research tasks

1) Определение условий применимости метода связанных мультиполей и борновских приближений различных порядков, включая нулевое, для моделирования резонансного оптического отклика димера и кольца сферических наночастиц. 2) Определение критериев сходимости борновского ряда для димера и кольца наночастиц вблизи частот дипольных и квадрупольных резонансов одиночной наночастицы. 3) Исследование фокусирующих свойств кольца наночастиц в нулевом борновском приближении (НБП). 4) Оптимизация в НБП металинз, составленных из колец сферических кремниевых наночастиц, для работы на длинах волн магнитного дипольного и магнитного квадрупольного резонансов наночастицы. 5) Проверка результатов оптимизации в НБП методом Т-матриц.

3. Краткая характеристика полученных результатов / Short summary of results/conclusions

Предложен достаточно быстрый и точный метод моделирования оптического отклика конечных ансамблей наночастиц, имеющих дипольные и квадрупольные резонансы электрического и магнитного типов. Метод основан на расчёте мультипольных моментов наночастиц в борновских приближениях различных порядков, включая нулевое. Определены условия применимости метода, а также критерии сходимости борновского ряда. Показана возможность фокусировки кольцом сферических наночастиц и исследованы его фокусирующие свойства в нулевом борновском приближении (НБП). При помощи оптимизации в НБП получены металинзы, составленные из колец кремниевых наносфер, для работы вблизи частот магнитного дипольного и магнитного квадрупольного резонансов

одиночной наночастицы. Плотность энергии в фокусах резонансных металинз на порядок превосходит плотность энергии падающей волны. Профили плотности энергии вблизи металинз были рассчитаны методом Т-матриц и было получено хорошее согласие с моделированием в НБП.

4. Наличие публикаций по теме выпускной работы/ Have you produced any publications on the topic of the thesis

- 1 Устименко Н.А. Оптимизация и моделирование металинзы в борновском приближении//Сборник тезисов X Всероссийского конгресса молодых учёных - 2021 (Тезисы)
- 2 Устименко Н.А., Барышникова К.В., Корнован Д.Ф., Евлюхин А.Б. Борновское разложение для задачи моделирования металинзы//Сборник трудов XVII Всероссийской школы-семинара «Волновые явления в неоднородных средах» имени А.П. Сухорукова («Волны-2020») - 2020. - С. 13-16 (Тезисы)
- 3 Ustimenko N., Baryshnikova K.V., Kornovan D.F., Beliakov M., Evlyukhin A.B. Born series using for designing of all-dielectric metalenses//AIP Conference Proceedings, 2020, Vol. 2300, pp. 020007 (Статья; Scopus, Web of Science)

5. Наличие выступлений на конференциях по теме выпускной работы/ Have you produced any conference reports on the topic of the thesis

- 1 X Всероссийский конгресс молодых ученых 2021, 14.04.2021 - 17.04.2021 (Конгресс, статус - всероссийский)
- 2 XVII Всероссийская школа-семинар «Волновые явления в неоднородных средах» имени А.П. Сухорукова («Волны-2020»), 23.08.2020 - 28.08.2020 (Конференция, статус - всероссийский)

6. Полученные гранты, при выполнении работы/ Grants received while working on the thesis

7. Дополнительные сведения/ Additional information

Обучающийся/Student

Документ подписан	
Устименко Никита Алексеевич	
01.06.2021	

(эл. подпись/ signature)

Устименко
Никита
Алексеевич

(Фамилия И.О./ name
and surname)

Руководитель ВКР/
Thesis supervisor

Документ подписан	
Барышникова Ксения Владимировна	
02.06.2021	

(эл. подпись/ signature)

Барышникова
Ксения
Владимировна

(Фамилия И.О./ name
and surname)

СОДЕРЖАНИЕ

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ	8
ВВЕДЕНИЕ	9
1 ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ВВЕДЕНИЕ.....	14
1.1 Мультипольное разложение оптического отклика сферической частицы.....	14
1.2 Модель связанных мультиполей.....	16
1.3 Борновский ряд и порядки рассеяния	19
1.4 Функции Грина мультиполей и их производные.....	21
2 РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ КОЛЬЦА	24
2.1 Применимость мультипольной модели	24
2.2 Фокусирующие свойства кольца частиц.....	26
2.3 Применимость нулевого борновского приближения.....	28
2.4 Борновские приближения более высокого порядка	30
3 ОПТИМИЗАЦИЯ МЕТАЛИНЗ	33
3.1 Описание оптимизационного алгоритма	33
3.2 Результаты оптимизации	34
4 СХОДИМОСТЬ БОРНОВСКОГО РЯДА.....	38
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	47
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	48

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ

БП – борновское приближение

МД – магнитный(ая) дипольный(ая)

МК – магнитный(ая) квадрупольный(ая)

МПБП – метод последовательных борновских приближений

МСМ – модель связанных мультиполей

НБП – нулевое борновское приближение

ЭД – электрический(ая) дипольный(ая)

ЭК – электрический(ая) квадрупольный(ая)

ВВЕДЕНИЕ

Металинза (или плоская линза) – ансамбль наноструктур для фокусировки света, а также формирования изображения [1–3]. К достоинствам металинзы относятся субволновая толщина, низкий вес, отсутствие сферических aberrаций и возможность управлять дисперсией и поляризацией света, поэтому научное и промышленное сообщества считают металинзы перспективными элементами будущих оптических устройствах, способными даже заменить обычные преломляющие линзы [4]. Металинзы уже нашли своё применение в различных оптических приборах: камере [5], очках дополненной реальности [6], спектрометре [7] и тепловизоре [8]. На рисунке 1 показаны примеры металинз для работы в различных диапазонах электромагнитного спектра, экспериментально продемонстрированные в работах [9–16].

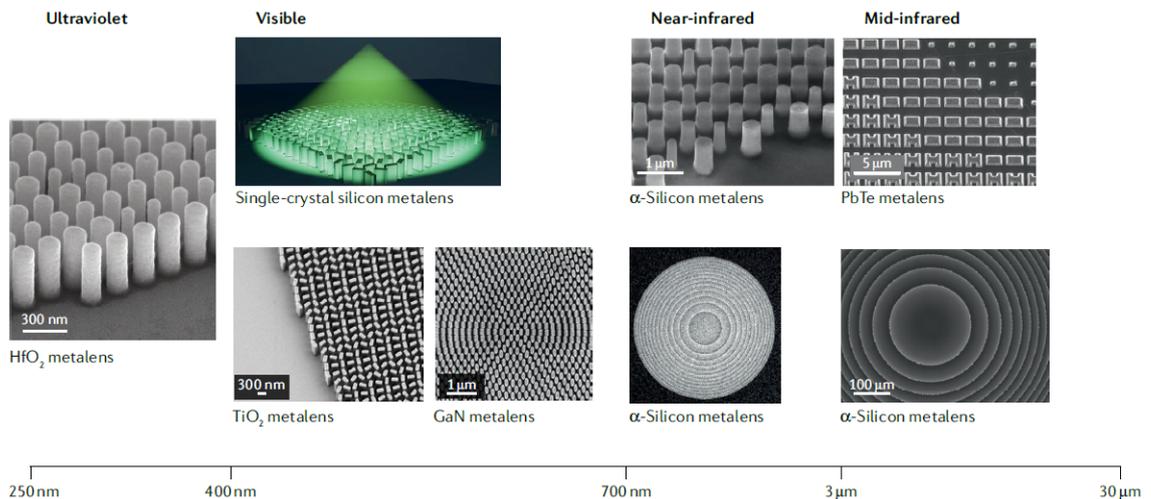


Рисунок 1 – Металинзы для работы в различных диапазонах электромагнитного спектра: от среднего инфракрасного до ультрафиолетового [3]

В обычной преломляющей линзе изменение волнового фронта падающего света и последующая его фокусировка достигаются за счёт специальной формы и хорошо преломляющего материала (например, стекла или полимера), из которого изготовлена линза. В металинзе фокусировка реализуется за счёт массива металлических или диэлектрических наноструктур, локально взаимодействующих с падающим светом. Отклик наноструктуры определяется её материалом, формой, размером, материалом окружения и влияющим на взаимодействие с другими наноструктурами пространственным положением. Традиционно металинзу рассматривают как устройство, передающее

падающему свету пространственно-зависимую фазу $\Phi(x, y)$ (где x и y – координаты вдоль поверхности устройства). Фазовый профиль $\Phi(x, y)$ подбирается с использованием метода трассировки лучей, методов Фурье-оптики либо полноволнового моделирования так, чтобы реализовать желаемые функции в разрабатываемом устройстве.

Фазовый профиль металинзы для фокусировки нормально падающего света λ в дальней зоне ($f \gg \lambda$) на оси металинзы должен быть следующим [17]

$$\Phi(r) = -\frac{2\pi}{\lambda} \left(\sqrt{r^2 + f^2} - f \right), \quad (1)$$

где $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ – радиальная координата, f – фокусное расстояние. Фазовый профиль (1) компенсирует разницу оптических путей для световых лучей, прошедших на разном расстоянии от центра линзы, чтобы лучи конструктивно интерферировали в фокусе линзы (рисунок 2(а)).

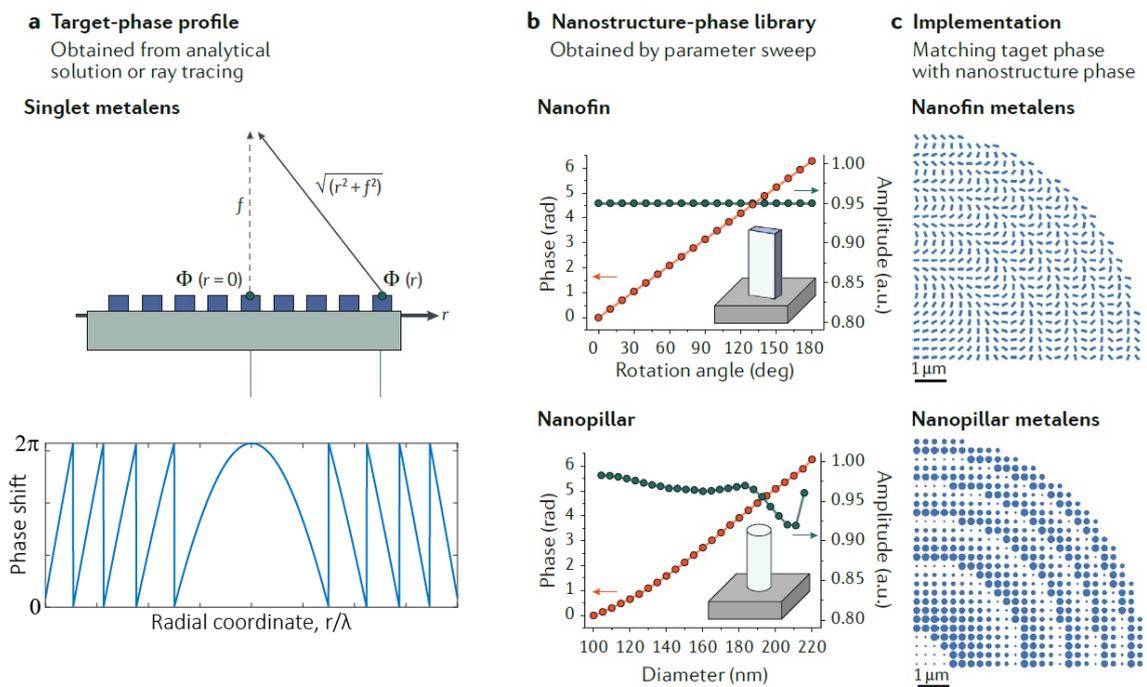


Рисунок 2 – (а) (Сверху) Геометрическая иллюстрация вывода фазового профиля металинзы (1). (Снизу) График фазового профиля металинзы (1).

(б) Графики фазы и амплитуды прошедшей волны от угла поворота наноплавника (сверху) или диаметра наностолбика (снизу). (с) Металинзы из наноплавников (сверху) и наностолбиков (снизу) [3]

Поскольку наноструктуры с одинаковой радиальной координатой r должны вносить одинаковый сдвиг фазы (формула (1)), наноструктуры в металинзе для фокусировки нормально падающего света должны быть упоря-

дочены в кольца. В кольце наноструктуры одинаковые, но меняются от кольца к кольцу для изменения фазы от 0 до 2π вдоль поверхности металинзы. В качестве наноструктур обычно выбирают прямоугольный наноплавник или круглый наностолбик из диэлектрика с высоким показателем преломления (для лучшей локализации света) и низкими оптическими потерями (для работы металинзы в режиме пропускания). В случае столбика нужный фазовый сдвиг достигается за счёт изменения его диаметра (фаза распространения), а в случае наноплавника – за счёт поворота на угол от 0 до π (геометрическая фаза) (рисунок 2(b)). Схематичные конструкции металинз из наноплавников и наностолбиков показаны на рисунке 2(c). Например, наностолбики использовались для создания поляризационно-независимых металинз [18], а наноплавники – ахроматических металинз, фокусирующих циркулярно поляризованный свет, для работы в широкой полосе частот [19]. Стоит отметить, что наноструктуры металинзы имеют постоянную высоту, а меняются только их поперечные размеры, что, как показано в работе [4], повышает эффективность фокусировки металинзы по сравнению с линзами Френеля и дифракционной оптикой с профилем переменной высоты и позволяет избежать трудностей в изготовлении металинз методами оптической и электронной литографии.

Графики на рисунке 2(b) получены при помощи полноволнового моделирования наноструктуры с периодическими граничными условиями при нормальном падении. Такой подход предполагает, что наноструктуры в металинзе взаимодействуют также, как и в периодической структуре, что подразумевает медленное изменение фазового профиля и наноструктур. Кроме того, отклик наноструктуры зависит от угла падения; таким образом, эффективность или функциональность метаповерхности зависит от угла падения. Метод связанных мультиполей [20] позволяет учесть взаимодействие между частицами, падение внешнего поля под углом к нормали, а также векторную природу электромагнитных волн, рассеянных наноструктурами.

Металинзы обладают большим числом параметров, которые нужно точно задать в процессе разработки. Часто эти параметры определяют ручным перебором и многократным моделированием, что приводит к большим затратам вычислительных ресурсов и большому времени разработки, при этом конечная конструкция устройства может быть далеко не оптимальной.

Оптимизационные методы повышают эффективность разработки металинз и других нанофотонных устройств [21]. Эволюционные и генетические алгоритмы уже использовались для разработки фотонных кристаллов [22], волноводов [23], структур для фокусировки [24, 25] и локализации [26] света, получения структурных цветов [27]. Стоит отметить, что скорость оптимизации и качество её результата зависят от физической модели и методов, выбранных для описания отклика устройства.

В этой работе предложен подход к описанию оптического отклика диэлектрических металинз из сферических наночастиц, в частности, и конечных структур диэлектрических наночастиц, в целом. В этом подходе отклик одной частицы связывается с возбуждением нескольких мультипольных моментов, взаимодействие между которыми описывается в рамках метода последовательных борновских приближений (МПБП). Сфера является привлекательным объектом для применения этого подхода, поскольку мультипольное разложение её оптического отклика может быть сделано полностью аналитически при помощи теории Ми [28, 29].

МПБП – это классический метод теории возмущений для моделирования рассеяния света на конечном массиве наночастиц [30–34]. Этот метод основан на построении сходящегося борновского ряда и его замене на конечную сумму, которая аппроксимирует взаимодействие между частицами, причём точность аппроксимации зависит от количества слагаемых, включённых в сумму, то есть от порядка борновского приближения (порядка рассеяния). Борновские приближения различных порядков использовались для моделирования взаимодействия между зондом и подложкой [30, 31] и расчёта поляризуемости несферической частицы [32, 33]. В перечисленных задачах требуется моделировать взаимодействие в непериодических структурах из большого числа частиц, что будет долго и ресурсозатратно, если использовать методы полноволнового моделирования, поэтому в перечисленных работах использовался МПБП совместно с мультипольным разложением [20, 35]. Важно отметить, что применимость этого метода, а также сходимость борновского ряда определяются силой электромагнитного взаимодействия в системе.

Цель работы – разработка МПБП и исследование его применимости для задач моделирования и оптимизации оптического отклика конечных ан-

самблей наночастиц с электрическими и магнитными резонансами. Как было сказано выше, важными для науки и индустрии являются структуры наночастиц для фокусировки света – металинзы, поэтому их разработке посвящена бóльшая часть работы. В соответствие с поставленной целью были сформулированы следующие задачи:

- а) Определение условий применимости мультипольной модели, учитывающей взаимодействия мультиполей, и борновских приближений различных порядков, включая нулевое, для моделирования резонансного оптического отклика димера и кольца сферических наночастиц.
- б) Определение критериев сходимости борновского ряда для димера и кольца наночастиц вблизи частот дипольных и квадрупольных резонансов одиночной наночастицы.
- в) Исследование фокусирующих свойств кольца наночастиц в нулевом борновском приближении (НБП).
- г) Получение конструкций металинз, составленных из сферических кремниевых наночастиц, для работы на длинах волн магнитного дипольного и магнитного квадрупольного резонансов одиночной наночастицы при помощи оптимизации в НБП.
- д) Проверка результатов оптимизации в НБП численным методом Т-матриц.

Структура работы следующая: в разделе 1 изложена теоретическая модель описания оптического отклика диэлектрических наночастиц и их электромагнитного взаимодействия, основанная на вычислении дипольных и квадрупольных моментов частиц. В разделе 2 обсуждаются условия применимости мультипольной модели, основанной на БП различных порядков, для моделирования фокусирующих свойств колец кремниевых наносфер. Полученные результаты используются в разделе 3 для оптимизации металинз при помощи эволюционного алгоритма и нулевого борновского приближения. В результате оптимизации получены металинзы с заданным фокусным расстоянием и высоким усилением (~ 20 раз) энергии падающего поля в фокусе. В разделе 4 получены критерии сходимости борновского ряда вблизи мультипольных резонансов одиночной наночастицы.

1 ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ВВЕДЕНИЕ

1.1 Мультипольное разложение оптического отклика сферической частицы

Мультипольное разложение – метод анализа оптических свойств наночастиц и их массивов в однородном или неоднородном окружении [36, 37]. В рамках метода наночастица заменяется на набор нескольких главных мультиполей, которые могут быть резонансно возбуждены внешней электромагнитной волной. Тип и спектральное положение такого резонанса, известного как резонанс Ми [29, 35, 38, 39], определяются формой и размером частицы, а также материалами частицы и её окружения.

Мультипольный отклик сферической частицы может быть найден полностью аналитически в рамках теории Ми [29]. Эффективность рассеяния сферической частицы с диаметром d на длине волны λ определяется следующим выражением [29]

$$Q_{\text{sca}} = \frac{2\lambda^2}{\pi^2 d^2} \sum_{l=1}^{+\infty} (2l + 1) (|a_l|^2 + |b_l|^2), \quad (2)$$

где l – порядок мультипольной моды ($l = 1$ – диполь, $l = 2$ – квадруполь и т.д.), a_l и b_l – коэффициенты рассеяния Ми. Q_{sca} для частицы с диаметром $d = 200$ нм из кристаллического кремния c-Si показана на рисунке 3. Из рисунка 3 видно, что такая частица имеет первые дипольные и квадрупольные

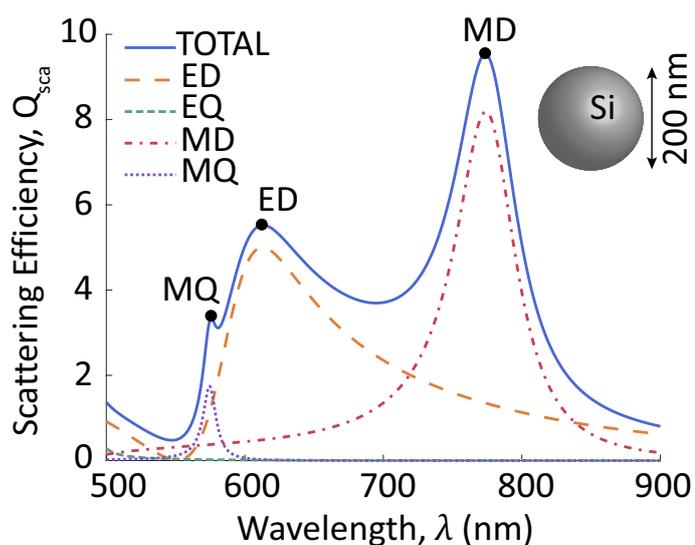


Рисунок 3 – Эффективность рассеяния сферической наночастицы из c-Si с диаметром 200 нм

польные резонансы в окне прозрачности c-Si, находящегося в ближнем ИК и видимом диапазонах. Следовательно, отклик частицы в рассматриваемом спектральном диапазоне может быть связан с возбуждением лишь четырёх мультиполей: электрического диполя, магнитного диполя, электрического квадруполья и магнитного квадруполья; вкладом мультиполей более старшего порядка можно пренебречь.

Векторы электрического \mathbf{p} и магнитного \mathbf{m} дипольных моментов и тензоры электрического \hat{Q} и магнитного \hat{M} квадрупольных моментов сферической диэлектрической частицы с центром в точке \mathbf{r}_0 определяются локальным электрическим $\mathbf{E}_{\text{loc}}(\mathbf{r}_0)$ или магнитным $\mathbf{H}_{\text{loc}}(\mathbf{r}_0)$ полем, действующим на частицу [20]

$$\mathbf{p} = \alpha_p \mathbf{E}_{\text{loc}}(\mathbf{r}_0) \quad (3)$$

$$\mathbf{m} = \alpha_m \mathbf{H}_{\text{loc}}(\mathbf{r}_0) \quad (4)$$

$$\hat{Q} = \frac{\alpha_Q}{2} [\nabla \mathbf{E}_{\text{loc}}(\mathbf{r}_0) + \mathbf{E}_{\text{loc}}(\mathbf{r}_0) \nabla] \quad (5)$$

$$\hat{M} = \frac{\alpha_M}{2} [\nabla \mathbf{H}_{\text{loc}}(\mathbf{r}_0) + \mathbf{H}_{\text{loc}}(\mathbf{r}_0) \nabla], \quad (6)$$

где ∇ – оператор набла. α_p , α_m , α_Q и α_M – ЭД, МД, ЭК и МК поляризуемости сферы, соответственно, также связанные с коэффициентами Ми [20]

$$\alpha_p = i \frac{6\pi\epsilon_0\epsilon_S}{k_S^3} a_1 \quad \alpha_m = i \frac{6\pi}{k_S^3} b_1 \quad \alpha_Q = i \frac{120\pi\epsilon_0\epsilon_S}{k_S^5} a_2 \quad \alpha_M = i \frac{40\pi}{k_S^5} b_2, \quad (7)$$

где $i = \sqrt{-1}$, $k_S = 2\pi\sqrt{\epsilon_S}/\lambda$, ϵ_0 – диэлектрическая постоянная, ϵ_S – диэлектрическая проницаемость окружения. Отметим, что для несферической частицы поляризуемости являются не скалярами, а тензорами 3×3 .

Элементы тензора $\nabla \mathbf{F} + \mathbf{F} \nabla$ в декартовой системе координат определены как

$$(\nabla \mathbf{F} + \mathbf{F} \nabla)_{\beta\gamma} = \frac{\partial F_\gamma}{\partial \beta} + \frac{\partial F_\beta}{\partial \gamma},$$

где \mathbf{F} – вектор электрического или магнитного поля, β и γ – декартовы координаты x , y или z .

В случае одиночной частицы локальное поле в формулах (3)-(6) является внешним падающим полем \mathbf{E}_{inc} или \mathbf{H}_{inc} .

1.2 Модель связанных мультиполей

В случае массива частиц локальное электрическое [магнитное] поле является суперпозицией падающего электрического $\mathbf{E}_{\text{inc}}(\mathbf{r}_j)$ [магнитного $\mathbf{H}_{\text{inc}}(\mathbf{r}_j)$] поля, электрического $\mathbf{E}'_p(\mathbf{r}_j)$ [магнитного $\mathbf{H}'_p(\mathbf{r}_j)$] поля, создаваемого всеми электрическими диполями кроме \mathbf{p}^j , поля $\mathbf{E}'_m(\mathbf{r}_j)$ [$\mathbf{H}'_m(\mathbf{r}_j)$] всех магнитными диполями кроме \mathbf{m}^j , поля $\mathbf{E}'_Q(\mathbf{r}_j)$ [$\mathbf{H}'_Q(\mathbf{r}_j)$] всех электрических квадрупольных кроме \hat{Q}^j и поля $\mathbf{E}'_M(\mathbf{r}_j)$ [$\mathbf{H}'_M(\mathbf{r}_j)$] всех магнитных квадрупольных кроме \hat{M}^j

$$\mathbf{E}_{\text{loc}}(\mathbf{r}_j) = \mathbf{E}_{\text{inc}}(\mathbf{r}_j) + \mathbf{E}'_p(\mathbf{r}_j) + \mathbf{E}'_m(\mathbf{r}_j) + \mathbf{E}'_Q(\mathbf{r}_j) + \mathbf{E}'_M(\mathbf{r}_j) \quad (8)$$

$$\mathbf{H}_{\text{loc}}(\mathbf{r}_j) = \mathbf{H}_{\text{inc}}(\mathbf{r}_j) + \mathbf{H}'_p(\mathbf{r}_j) + \mathbf{H}'_m(\mathbf{r}_j) + \mathbf{H}'_Q(\mathbf{r}_j) + \mathbf{H}'_M(\mathbf{r}_j), \quad (9)$$

где \mathbf{r}_j – координата j -ой частицы (индекс $j = 1, \dots, N$).

Электрические \mathbf{E}' и магнитные \mathbf{H}' поля, создаваемые дипольными (квадрупольными) источниками, определяются при помощи дипольных (квадрупольных) функций Грина

$$\begin{aligned} \mathbf{E}'_p(\mathbf{r}_j) &= \frac{k^2}{\varepsilon_0} \sum_{l=1, l \neq j}^N \hat{G}_{jl}^{pp} \mathbf{p}^l & \mathbf{H}'_p(\mathbf{r}_j) &= \frac{ck}{i} \sum_{l=1, l \neq j}^N \hat{G}_{jl}^{pm} \mathbf{p}^l \\ \mathbf{E}'_m(\mathbf{r}_j) &= \frac{ik}{c\varepsilon_0} \sum_{l=1, l \neq j}^N \hat{G}_{jl}^{pm} \mathbf{m}^l & \mathbf{H}'_m(\mathbf{r}_j) &= k_S^2 \sum_{l=1, l \neq j}^N \hat{G}_{jl}^{pp} \mathbf{m}^l \\ \mathbf{E}'_Q(\mathbf{r}_j) &= \frac{k^2}{\varepsilon_0} \sum_{l=1, l \neq j}^N \hat{G}_{jl}^{QQ} (\hat{Q}^l \mathbf{n}_{lj}) & \mathbf{H}'_Q(\mathbf{r}_j) &= \frac{ck}{i} \sum_{l=1, l \neq j}^N \hat{G}_{jl}^{QM} (\hat{Q}^l \mathbf{n}_{lj}) \\ \mathbf{E}'_M(\mathbf{r}_j) &= 3 \frac{ik}{c\varepsilon_0} \sum_{l=1, l \neq j}^N \hat{G}_{jl}^{QM} (\hat{M}^l \mathbf{n}_{lj}) & \mathbf{H}'_M(\mathbf{r}_j) &= 3k_S^2 \sum_{l=1, l \neq j}^N \hat{G}_{jl}^{QQ} (\hat{M}^l \mathbf{n}_{lj}), \end{aligned}$$

где c – скорость света в вакууме, k – волновое число в вакууме; $\mathbf{n}_{lj} = (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l)/|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l|$ – единичный вектор в направлении от \mathbf{r}_l к \mathbf{r}_j (здесь \mathbf{r}_j – точка, в которой вычисляются поля, \mathbf{r}_l – положение источника поля); $\hat{G}_{jl}^{pp} \equiv \hat{G}^{pp}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_l)$, $\hat{G}_{jl}^{pm} \equiv \hat{G}^{pm}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_l)$, $\hat{G}_{jl}^{QQ} \equiv \hat{G}^{QQ}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_l)$ и $\hat{G}_{jl}^{QM} \equiv \hat{G}^{QM}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_l)$ – диадные функции Грина диполя и квадруполья, соответственно (см. подраздел 1.4).

Полное электрическое и магнитное поле в точке \mathbf{r} определяются как суперпозиции падающего внешнего поля и полей, создаваемых всеми мульт-

ТИПОЛЯМИ В СИСТЕМЕ

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_{\text{inc}}(\mathbf{r}) + \frac{k^2}{\varepsilon_0} \sum_{j=1}^N \left\{ \hat{G}^{pp}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j) \mathbf{p}^j + \frac{i}{ck} \hat{G}^{pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j) \mathbf{m}^j + \hat{G}^{QQ}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j) \left(\hat{Q}^j \mathbf{n}_j \right) + \frac{3i}{ck} \hat{G}^{QM}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j) \left(\hat{M}^j \mathbf{n}_j \right) \right\} \quad (10)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}_{\text{inc}}(\mathbf{r}) + k^2 \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{c}{ik} \hat{G}^{pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j) \mathbf{p}^j + \varepsilon_S \hat{G}^{pp}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j) \mathbf{m}^j + \frac{c}{ik} \hat{G}^{QM}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j) \left(\hat{Q}^j \mathbf{n}_j \right) + 3\varepsilon_S \hat{G}^{QQ}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j) \left(\hat{M}^j \mathbf{n}_j \right) \right\}, \quad (11)$$

где $\mathbf{n}_j = (\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)/|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|$.

После подстановки локальных полей (8),(9) в определения мультипольных моментов (3)-(6) получается система линейных уравнений для вычисления дипольных и квадрупольных моментов всех частиц в структуре, которая развернуто записана в работе [20], уравнение (25). Здесь эта система записана в матричной форме, более удобной для численных расчётов

$$\mathbf{Y} = \mathbf{Y}_0 + \hat{\mathbf{V}}\mathbf{Y}, \quad (12)$$

где \mathbf{Y} – вектор самосогласованных мультипольных моментов

$$\mathbf{Y} = [p_x^1, \dots, p_z^N, m_x^1, \dots, m_z^N, Q_{xx}^1, \dots, Q_{zz}^N, M_{xx}^1, \dots, M_{zz}^N]_{24N}^T,$$

\mathbf{Y}_0 – вектор моментов, определяемых только падающим полем

$$\mathbf{Y}_0 = [p_{0,x}^1, \dots, p_{0,z}^N, m_{0,x}^1, \dots, m_{0,z}^N, Q_{0,xx}^1, \dots, Q_{0,zz}^N, M_{0,xx}^1, \dots, M_{0,zz}^N]_{24N}^T,$$

$\hat{\mathbf{V}}$ – блочная матрица взаимодействия мультиполей, размерность которой, в общем случае, $24N \times 24N$. Стоит отметить, что размерность матрицы $\hat{\mathbf{V}}$ и системы (12) может быть уменьшена, если учесть, что тензоры квадрупольных моментов симметричны и имеют нулевой след [40]. Каждый блок матрицы $\hat{\mathbf{V}}$ описывает взаимодействие мультиполя j -ой частицы с мультиполем l -ой частицы ($j \neq l$). Если $j = l$, то блок равен нулевой матрице. Ниже развёрнуто

записаны матрица $\hat{\mathbf{V}}$, а также входящие в неё блоки

$$\hat{\mathbf{V}} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\alpha_p k^2}{\varepsilon_0} \hat{G}_{12}^{pp} \dots 0 & \frac{\alpha_p ik}{c\varepsilon_0} \hat{G}_{12}^{pm} \dots 0 & \frac{\alpha_p k^2}{\varepsilon_0} \hat{H}_{12}^{QQ} \dots 0 & \frac{\alpha_p 3ik}{c\varepsilon_0} \hat{H}_{12}^{QM} \dots & \vdots \\ 0 & \frac{\alpha_m ck}{i} \hat{G}_{12}^{pm} \dots 0 & \alpha_m k_S^2 \hat{G}_{12}^{pp} \dots 0 & \frac{\alpha_m ck_0}{i} \hat{H}_{12}^{QM} \dots 0 & \alpha_m 3k_S^2 \hat{H}_{12}^{QQ} \dots & \vdots \\ 0 & \frac{\alpha_Q k^2}{2\varepsilon_0} \hat{F}_{12}^{pp} \dots 0 & \frac{\alpha_Q ik}{2c\varepsilon_0} \hat{F}_{12}^{pm} \dots 0 & \frac{\alpha_Q k_0^2}{2\varepsilon_0} \hat{F}_{12}^{QQ} \dots 0 & \frac{\alpha_Q 3ik}{2c\varepsilon_0} \hat{F}_{12}^{QM} \dots & \vdots \\ 0 & \frac{\alpha_M ck}{2i} \hat{F}_{12}^{pm} \dots 0 & \frac{\alpha_M k_S^2}{2} \hat{F}_{12}^{pp} \dots 0 & \frac{\alpha_M ck}{2i} \hat{F}_{12}^{QM} \dots 0 & \frac{\alpha_M 3k_S^2}{2} \hat{F}_{12}^{QQ} \dots & \vdots \end{pmatrix}.$$

$$\hat{H}_{jl}^{QQ} = \begin{pmatrix} \hat{G}_{jl,xx}^{QQ} n_{lj,x} & \hat{G}_{jl,xx}^{QQ} n_{lj,y} & \hat{G}_{jl,xx}^{QQ} n_{lj,z} & \hat{G}_{jl,xy}^{QQ} n_{lj,x} & \dots & \hat{G}_{jl,xz}^{QQ} n_{lj,z} \\ \hat{G}_{jl,yx}^{QQ} n_{lj,x} & \hat{G}_{jl,yx}^{QQ} n_{lj,y} & \hat{G}_{jl,yx}^{QQ} n_{lj,z} & \hat{G}_{jl,yy}^{QQ} n_{lj,x} & \dots & \hat{G}_{jl,yz}^{QQ} n_{lj,z} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \hat{G}_{jl,zx}^{QQ} n_{lj,x} & \hat{G}_{jl,zx}^{QQ} n_{lj,y} & \hat{G}_{jl,zx}^{QQ} n_{lj,z} & \hat{G}_{jl,zy}^{QQ} n_{lj,x} & \dots & \hat{G}_{jl,zz}^{QQ} n_{lj,z} \end{pmatrix},$$

где $\mathbf{n}_{lj} = [n_{lj,x}, n_{lj,y}, n_{lj,z}]^T$ – единичный вектор, проведённый от частицы с номером l к частице с номером j ($\mathbf{n}_{lj} = (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l)/|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l|$), T обозначает операцию транспонирования. Матрицу \hat{H}_{jl}^{QQ} можно записать в более компактном виде

$$\hat{H}_{jl}^{QQ} = \hat{G}_{jl}^{QQ} \otimes \mathbf{n}_{lj}^T,$$

где \otimes обозначает кронекеровское произведение. Далее

$$\begin{aligned} \hat{H}_{jl}^{QM} &= \hat{G}_{jl}^{QM} \otimes \mathbf{n}_{lj}^T \\ \hat{F}_{jl}^{pp} &= \hat{F}_{jl}^{pp(1)} + \hat{F}_{jl}^{pp(2)}, \end{aligned}$$

где

$$\hat{F}_{jl}^{pp(1)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial(G_{jl,xx}^{pp})}{\partial x} & \frac{\partial(G_{jl,xy}^{pp})}{\partial x} & \frac{\partial(G_{jl,xz}^{pp})}{\partial x} \\ \frac{\partial(G_{jl,yx}^{pp})}{\partial x} & \frac{\partial(G_{jl,yy}^{pp})}{\partial x} & \frac{\partial(G_{jl,yz}^{pp})}{\partial x} \\ \frac{\partial(G_{jl,zx}^{pp})}{\partial x} & \frac{\partial(G_{jl,zy}^{pp})}{\partial x} & \frac{\partial(G_{jl,zz}^{pp})}{\partial x} \\ \frac{\partial(G_{jl,xx}^{pp})}{\partial y} & \frac{\partial(G_{jl,xy}^{pp})}{\partial y} & \frac{\partial(G_{jl,xz}^{pp})}{\partial y} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial(G_{jl,zx}^{pp})}{\partial z} & \frac{\partial(G_{jl,zy}^{pp})}{\partial z} & \frac{\partial(G_{jl,zz}^{pp})}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (13)$$

$$\hat{F}_{jl}^{pp(2)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial(G_{jl,xx}^{pp})}{\partial x} & \frac{\partial(G_{jl,xy}^{pp})}{\partial x} & \frac{\partial(G_{jl,xz}^{pp})}{\partial x} \\ \frac{\partial(G_{jl,xx}^{pp})}{\partial y} & \frac{\partial(G_{jl,xy}^{pp})}{\partial y} & \frac{\partial(G_{jl,xz}^{pp})}{\partial y} \\ \frac{\partial(G_{jl,xx}^{pp})}{\partial z} & \frac{\partial(G_{jl,xy}^{pp})}{\partial z} & \frac{\partial(G_{jl,xz}^{pp})}{\partial z} \\ \frac{\partial(G_{jl,yx}^{pp})}{\partial x} & \frac{\partial(G_{jl,yy}^{pp})}{\partial x} & \frac{\partial(G_{jl,yz}^{pp})}{\partial x} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial(G_{jl,zx}^{pp})}{\partial z} & \frac{\partial(G_{jl,zy}^{pp})}{\partial z} & \frac{\partial(G_{jl,zz}^{pp})}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \hat{F}_{jl}^{pm} &= \hat{F}_{jl}^{pm(1)} + \hat{F}_{jl}^{pm(2)} \\ \hat{F}_{jl}^{QQ} &= \left[\hat{F}_{jl}^{QQ(1)} + \hat{F}_{jl}^{QQ(2)} \right] \otimes \mathbf{n}_{lj}^T + \hat{G}_{jl}^{QQ} \otimes \hat{N}_{lj} + \left(\hat{G}_{jl}^{QQ} \otimes \hat{N}_{lj} \right)^T \\ \hat{F}_{jl}^{QM} &= \left[\hat{F}_{jl}^{QM(1)} + \hat{F}_{jl}^{QM(2)} \right] \otimes \mathbf{n}_{lj}^T + \hat{G}_{jl}^{QM} \otimes \hat{N}_{lj} + \left(\hat{G}_{jl}^{QM} \otimes \hat{N}_{lj} \right)^T, \end{aligned}$$

где $\hat{F}_{jl}^{pm(1)}$, $\hat{F}_{jl}^{QQ(1)}$, $\hat{F}_{jl}^{QM(1)}$ и $\hat{F}_{jl}^{pm(2)}$, $\hat{F}_{jl}^{QQ(2)}$, $\hat{F}_{jl}^{QM(2)}$ определены аналогично (13) и (14), соответственно. Матрица \hat{N}_{lj} определена как

$$\hat{N}_{lj} = \begin{pmatrix} \frac{\partial n_{lj,x}}{\partial x} & \frac{\partial n_{lj,x}}{\partial y} & \frac{\partial n_{lj,x}}{\partial z} \\ \frac{\partial n_{lj,y}}{\partial x} & \frac{\partial n_{lj,y}}{\partial y} & \frac{\partial n_{lj,y}}{\partial z} \\ \frac{\partial n_{lj,z}}{\partial x} & \frac{\partial n_{lj,z}}{\partial y} & \frac{\partial n_{lj,z}}{\partial z} \end{pmatrix}.$$

Выражения для функций Грина, а также их производных написаны в подразделе 1.4.

Решение системы (12) в рамках модели связанных мультиполей (от англ., «coupled multipole model»), полностью учитывающей взаимодействие между мультиполями, можно записать как

$$\mathbf{Y} = (\hat{\mathbf{U}} - \hat{\mathbf{V}})^{-1} \mathbf{Y}_0, \quad (15)$$

где $\hat{\mathbf{U}}$ – единичная матрица соответствующего размера.

1.3 Борновский ряд и порядки рассеяния

Заметим, что матрицу $(\hat{\mathbf{U}} - \hat{\mathbf{V}})^{-1}$ можно разложить в ряд по степеням матрицы $\hat{\mathbf{V}}$, тогда решение системы (12) можно записать в виде ряда, назы-

ваемого борновским рядом

$$\mathbf{Y} = \hat{\mathbf{U}}\mathbf{Y}_0 + \hat{\mathbf{V}}\mathbf{Y}_0 + \hat{\mathbf{V}}^2\mathbf{Y}_0 + \hat{\mathbf{V}}^3\mathbf{Y}_0 + \dots \quad (16)$$

Отставив лишь конечное число членов ряда, можно получить последовательные приближения (борновские приближения) решения системы (12)

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}^{(0)} &= \hat{\mathbf{U}}\mathbf{Y}_0 \\ \mathbf{Y}^{(1)} &= \mathbf{Y}_0 + \hat{\mathbf{V}}\mathbf{Y}^{(0)} \\ &\dots \\ \mathbf{Y}^{(n)} &= \mathbf{Y}_0 + \hat{\mathbf{V}}\mathbf{Y}^{(n-1)}, \end{aligned} \quad (17)$$

где n – порядок борновского приближения или порядок рассеяния, а $\mathbf{Y}^{(n)}$ – решение в борновском приближении n -ого порядка. В нулевом борновском приближении мультипольные моменты определяются только падающим полем, а взаимодействие между частицами не учитывается; в первом борновском приближении мультипольные моменты частицы определяются суперпозицией падающего поля и полей мультипольных моментов, возбужденных во всех остальных частицах и посчитанных в нулевом приближении; во втором приближении берутся мультипольные моменты, посчитанные в первом приближении, и так далее. Борновскому ряду можно сопоставить процесс взаимных перерассеяний между частицами, что для двух частиц проиллюстрировано рисунком 4. Более наглядно эта связь с рисунка 4 объясняется в разделе 4.

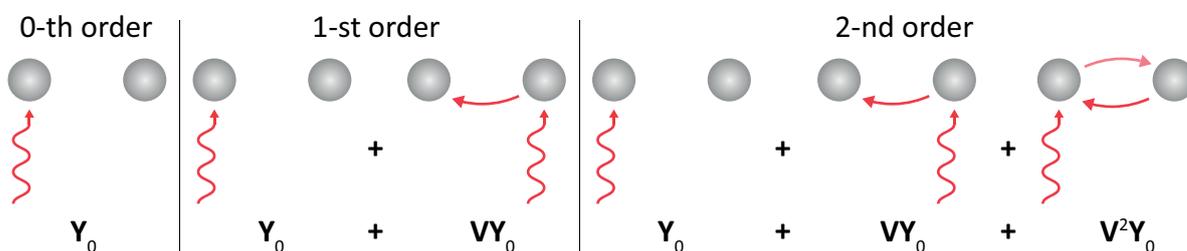


Рисунок 4 – Схематичное представление порядков рассеяния (порядков борновских приближений) для двух частиц

Преимуществом итерационного метода решения (17) – метода последовательных борновских приближений – перед точным решением (15) системы уравнений (12) являются более низкое потребление ресурсов компью-

тера и более низкое время расчёта при достаточно высокой точности расчёта, что показано в подразделе 2.4. Однако МПБП может быть применён, только если борновский ряд (16) сходится. Условия сходимости борновского ряда (16) [41]

а) Необходимое: $\det(\hat{\mathbf{U}} - \hat{\mathbf{V}}) \neq 0$.

Иначе система находится в условии конфигурационного резонанса [31]. В этом случае сильное электромагнитное взаимодействие между частицами не может быть аппроксимировано борновскими приближениями любого порядка.

б) Достаточное: $\|\hat{\mathbf{V}}\| < 1$.

в) Необходимое и достаточное: борновский ряд сходится тогда и только тогда, когда все собственные числа матрицы $\hat{\mathbf{V}}$ по модулю меньше единицы.

С физической точки зрения, борновский ряд сходится, когда взаимодействие между частицами достаточно слабое. Взаимодействие между частицами усиливается вблизи резонанса одиночной частицы (Ми-резонанса), так как увеличивается рассеяние каждой отдельной частицы, что приводит к расходимости борновского ряда, как показано в разделе 4.

1.4 Функции Грина мультиполей и их производные

Выражения для диадных функций Грина диполя и квадруполь в свободном пространстве [20], использованных в данном разделе

$$G_{\alpha\beta}^{pp}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = \frac{e^{ik_S l}}{4\pi l} \left[\left(1 + \frac{i}{k_S l} - \frac{1}{k_S^2 l^2} \right) \delta_{\alpha\beta} + \left(-1 - \frac{i3}{k_S l} + \frac{3}{k_S^2 l^2} \right) n_\alpha n_\beta \right] \quad (18)$$

$$G_{\alpha\beta}^{pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = -\frac{e^{ik_S l}}{4\pi} \left(\frac{ik_S}{l} - \frac{1}{l^2} \right) \epsilon_{\alpha\beta\gamma} n_\gamma \quad (19)$$

$$G_{\alpha\beta}^{QQ}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = \frac{ik_S e^{ik_S l}}{24\pi l} \left[\left(-1 - \frac{3i}{k_S l} + \frac{6}{k_S^2 l^2} + \frac{6i}{k_S^3 l^3} \right) \delta_{\alpha\beta} + \left(1 + \frac{6i}{k_S l} - \frac{15}{k_S^2 l^2} - \frac{15i}{k_S^3 l^3} \right) n_\alpha n_\beta \right] \quad (20)$$

$$G_{\alpha\beta}^{QM}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = -\frac{k_S^2 e^{ik_S l}}{24\pi l} \left(1 + \frac{i3}{k_S l} - \frac{3}{k_S^2 l^2} \right) \epsilon_{\alpha\beta\gamma} n_\gamma, \quad (21)$$

где точка вычисления поля $\mathbf{r} = (x, y, z)$, положение источника $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$, $l = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2}$, нормаль $\mathbf{n} = (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)/l$, $\delta_{\alpha\beta}$ – символ Кронекера, $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ – символ Леви-Чивиты, а греческими буквами обозначены

декартовы координаты x, y, z . Тензоры \hat{G}^{pm} и \hat{G}^{QM} связаны с тензорами \hat{G}^{pp} и \hat{G}^{QQ} следующими соотношениями

$$\begin{aligned}\nabla \times \hat{G}^{pp} \mathbf{p} &= \hat{G}^{pm} \mathbf{p} \\ \nabla \times \hat{G}^{QQ} \mathbf{p} &= \hat{G}^{QM} \mathbf{p},\end{aligned}$$

где $\nabla \times$ обозначает операцию ротора, \mathbf{p} – произвольный постоянный вектор.

Декартовы производные элементов диадных функций Грина (18)-(21)

$$\begin{aligned}\frac{\partial G_{\alpha\beta}^{pp}}{\partial \gamma} &= \frac{e^{ik_S l}}{4\pi l} \left\{ k_S \left(i - \frac{2}{k_S l} - \frac{i3}{k_S^2 l^2} + \frac{3}{k_S^3 l^3} \right) \delta_{\alpha\beta} n_\gamma + \right. \\ &\quad \left. k_S \left(-i + \frac{4}{k_S l} + \frac{i9}{k_S^2 l^2} - \frac{9}{k_S^3 l^3} \right) n_\alpha n_\beta n_\gamma + \right. \\ &\quad \left. \left(-1 - \frac{i3}{k_S l} + \frac{3}{k_S^2 l^2} \right) \left(\frac{\partial n_\alpha}{\partial \gamma} n_\beta + n_\alpha \frac{\partial n_\beta}{\partial \gamma} \right) \right\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial G_{\alpha\beta}^{pm}}{\partial \gamma} &= -\frac{e^{ik_S l}}{4\pi} \left\{ k_S^3 \left(-\frac{1}{k_S l} - \frac{i2}{k_S^2 l^2} + \frac{2}{k_S^3 l^3} \right) \epsilon_{\alpha\beta\tau} n_\tau n_\gamma + \right. \\ &\quad \left. \left(\frac{ik_S}{l} - \frac{1}{l^2} \right) \epsilon_{\alpha\beta\tau} \frac{\partial n_\tau}{\partial \gamma} \right\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial G_{\alpha\beta}^{QQ}}{\partial \gamma} &= \frac{ik_S e^{ik_S l}}{24\pi l} \times \\ &\quad \left\{ k_S \left(-\frac{i}{k_S} + \frac{4}{k_S l} + \frac{12i}{k_S^2 l^2} - \frac{24}{k_S^3 l^3} - \frac{24i}{k_S^4 l^4} \right) \delta_{\alpha\beta} n_\gamma + \right. \\ &\quad \left. k_S \left(i - \frac{7}{k_S l} - \frac{27i}{k_S^2 l^2} + \frac{60}{k_S^3 l^3} + \frac{60i}{k_S^4 l^4} \right) n_\alpha n_\beta n_\gamma + \right. \\ &\quad \left. + \left(1 + \frac{6i}{k_S l} - \frac{15}{k_S^2 l^2} - \frac{15i}{k_S^3 l^3} \right) \left(\frac{\partial n_\alpha}{\partial \gamma} n_\beta + n_\alpha \frac{\partial n_\beta}{\partial \gamma} \right) \right\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial G_{\alpha\beta}^{QM}}{\partial \gamma} &= -\frac{k_S^2 e^{ik_S l}}{24\pi l} \left\{ \left(1 + \frac{i3}{k_S l} - \frac{3}{k_S^2 l^2} \right) \epsilon_{\alpha\beta\tau} \frac{\partial n_\tau}{\partial \gamma} + \right. \\ &\quad \left. k_S \left(i - \frac{4}{k_S l} - \frac{i9}{k_S^2 l^2} + \frac{9}{k_S^3 l^3} \right) \epsilon_{\alpha\beta\tau} n_\tau n_\gamma \right\},\end{aligned}$$

где производная компоненты вектора нормали по декартовой координате

$$\frac{\partial n_\alpha}{\partial \beta} = \frac{\delta_{\alpha\beta} - n_\alpha n_\beta}{l}.$$

Выводы по разделу 1:

- а) Оптический отклик сферической кремниевой частицы с диаметром 200 нм в диапазоне 500-900 нм может быть описан при помощи мультипольной модели, учитывающей вклады диполей и квадрупольных электрического и магнитного типов.
- б) Взаимодействие между мультиполями частиц может быть найдено точно в рамках модели связанных мультиполей либо аппроксимировано борновскими приближениями.

2 РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ КОЛЬЦА

Разделы 2 и 3 посвящены разработке конструкций резонансных металинз для фокусировки нормально падающей волны в точку на оптической оси металинзы. Известно, что частицы в таких металинзах упорядочены в кольца, поскольку отклик частиц, находящихся на одном расстоянии от оси линзы должен быть одинаковым [3]. Используя метод, изложенный в разделе 1, был смоделирован оптический отклик кольца, состоящего из N кремниевых наносфер с диаметром 200 нм и находящегося в воздухе (рисунок 5). Кольцо

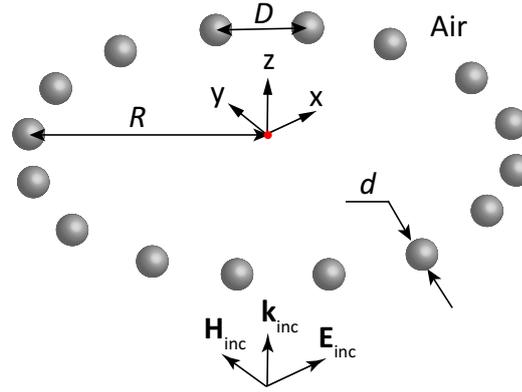


Рисунок 5 – Кольцо сферических наночастиц, введённая декартова система координат и падающая плоская волна

помещено в плоскость xy ($z = 0$) так, что центр кольца совпадает с началом декартовой системы координат. Радиус-вектор положения j -ой частицы в кольце

$$\mathbf{r}_j = [R \cos(2\pi(j-1)/N), R \sin(2\pi(j-1)/N), 0],$$

где R – радиус кольца, индекс $j = 1, 2, \dots, N$. Таким образом, расстояние между соседними частицами в кольце одинаковое. Нормально падающая плоская волна имеет волновой вектор $\mathbf{k}_{\text{inc}} = k_0 \hat{\mathbf{z}}$, вектор электрического поля $\mathbf{E}_{\text{inc}}(\mathbf{r}) = E_0 e^{ik_0 z} \hat{\mathbf{x}}$ и магнитного поля $\mathbf{H}_{\text{inc}}(\mathbf{r}) = (E_0/Z) e^{ik_0 z} \hat{\mathbf{y}}$, где $\hat{\mathbf{x}}$, $\hat{\mathbf{y}}$ и $\hat{\mathbf{z}}$ – орты вдоль осей x , y и z , соответственно, волновой импеданс вакуума $Z = \sqrt{\mu_0/\epsilon_0}$. Отметим, что моделирование учитывает дисперсию показателя преломления и коэффициента экстинкции с-Si [42].

2.1 Применимость мультипольной модели

Чтобы проверить применимость модели связанных мультиполей (МСМ), учитывающей вклад диполей и квадрупольных, была рассчитана плотность энергии электромагнитного поля, используя метод Т-матриц [43] и МСМ (15). Во втором подходе сначала были найдены мультипольные мо-

менты (15), далее они подставлялись в формулы для полного электрического (10) и магнитного (11) полей. При помощи найденных полей была вычислена нормированная плотность электромагнитной энергии по следующей формуле

$$w(\mathbf{r})/w_0 = (|\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2 + Z^2|\mathbf{H}(\mathbf{r})|^2)/2|E_0|^2. \quad (22)$$

На рисунке 6 показаны профили плотности энергии вблизи кольца с радиусом $R = 2$ мкм и числом частиц $N = 62$ для длин волн магнитного дипольного (МД) резонанса $\lambda_{\text{MD}} = 770$ нм и магнитного квадрупольного (МК) резонансов $\lambda_{\text{MQ}} = 574$ нм.

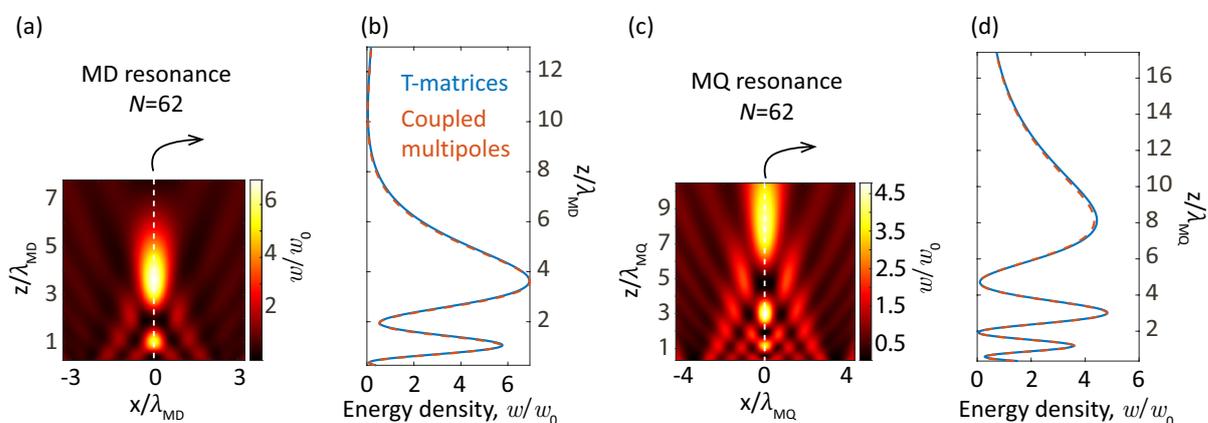


Рисунок 6 – Распределение нормированной плотности электромагнитной энергии вблизи кольца ($R = 2$ мкм, $N = 62$) для МД-го (a-b) и МК-го (c-d) резонансов

Применимость дипольного приближения для систем металлических (плазмонных) наносфер обсуждалась, например, в работах [44, 45]. Было показано, что значительное расхождение между полноволновым моделированием и моделью связанных диполей наблюдается, когда расстояние между центрами частиц D меньше либо равно их удвоенному диаметру, т.е. $D \leq 2d$. Посмотрим, каким будет критерий для структуры (кольца) диэлектрических сфер в модели связанных диполей и квадрупольей. На рисунке 6 число сфер $N = 62$ соответствует расстоянию между частицами $D \approx d$ (частицы почти касаются друг друга). В этом случае взаимодействие между частицами должно быть наиболее сильным. Для дипольного и квадрупольного резонансов расчёт при помощи МСМ хорошо согласуется с расчётом методом Т-матриц (рисунки 6(b) и 6(d)).

В задаче разработки структур для фокусировки света (металинз) необходимо знать точность расчёта фокусного расстояния и величины плотности энергии в фокусе, поскольку фокусное расстояние и фокусная плотность энергии – важные параметры металинзы, которые определяют её функциональные свойства. Определим фокусное расстояние кольца как расстояние между глобальным максимумом нормированной плотности энергии на оси z и плоскостью кольца. На рисунке 6 относительная ошибка фокусного расстояния кольца в МСМ (сравниваются величины фокусного расстояния, полученные в МСМ и методом Т-матриц) составляет 0.71% для МД-го и 1.15% для МК-го резонансов, а ошибка плотности энергии в фокусе равна всего 0.33% для МД-го и 0.39% для МК-го резонансов. Таким образом, модель связанных мультиполей (диполей и квадрупольных) применима практически для любых расстояний между диэлектрическими сферическими частицами (т.е. для $D > d$) на длинах волн дипольных и квадрупольных резонансов одиночной частицы.

2.2 Фокусирующие свойства кольца частиц

На рисунках 6(a) и 6(c) видно, что кольцо обладает свойством фокусировки, то есть создаёт горячие пятна плотности электромагнитной энергии. Картина интерференции волн, рассеянных кольцом наночастиц, напоминает картину дифракции Френеля на круглом сплошном отверстии (рисунок 4 в работе [46]), но в отличие от сплошного отверстия каждая частица в кольце поддерживает резонансный отклик.

Исследуем более подробно фокусирующие свойства кольца в нулевом борновском приближении (НБП). Используя выражения (3)-(6), (10)-(11), (18)-(21), можно получить формулу для нормированной плотности электромагнитной энергии (22) кольца вдоль ось z

$$w(z)/w_0 = \tilde{w}_E(z) + \tilde{w}_H(z), \quad (23)$$

где электрический и магнитный вклады в НБП

$$\tilde{w}_E(z) = \frac{1}{2} \left| e^{iks_z} + N \frac{e^{iksl}}{4\pi l} \left\{ \frac{\alpha_p}{\varepsilon_0 \varepsilon_S} \left[A(l) + B(l) \frac{R^2}{2l^2} \right] + \alpha_m C(l) \frac{z}{l} + \frac{\alpha_Q}{12\varepsilon_0 \varepsilon_S} \frac{z}{l} \left[D(l) + F(l) \frac{R^2}{l^2} \right] + \frac{\alpha_M}{4} G(l) \frac{R^2/2 - z^2}{l^2} \right\} \right|^2$$

$$\tilde{w}_H(z) = \frac{1}{2} \left| e^{iks_z} + N \frac{e^{ik_S l}}{4\pi l} \left\{ \alpha_m \left[A(l) + B(l) \frac{R^2}{2l^2} \right] + \frac{\alpha_p}{\varepsilon_0 \varepsilon_S} C(l) \frac{z}{l} + \frac{\alpha_M z}{4} \left[D(l) + F(l) \frac{R^2}{l^2} \right] + \frac{\alpha_Q}{12\varepsilon_0 \varepsilon_S} G(l) \frac{R^2/2 - z^2}{l^2} \right\} \right|^2,$$

соответственно. Здесь $l = \sqrt{R^2 + z^2}$, и введены вспомогательные функции

$$\begin{aligned} A(l) &= k_S^2 + \frac{ik_S}{l} - \frac{1}{l^2} & B(l) &= -k_S^2 - \frac{3ik_S}{l} + \frac{3i}{l^2} \\ C(l) &= k_S^2 + \frac{ik_S}{l} & D(l) &= k_S^4 + \frac{3ik_S^3}{l} - \frac{6k_S^2}{l^2} - \frac{6ik_S}{l^3} \\ F(l) &= -k_S^4 - \frac{6ik_S^3}{l} + \frac{15k_S^2}{l^2} + \frac{15ik_S}{l^3} & G(l) &= -k_S^4 - \frac{3ik_S^3}{l} + \frac{3k_S^2}{l^2}. \end{aligned}$$

На рисунке 7(а) показано фокусное расстояние кольца (посчитанное как расстояние до глобального максимума функции (23)) в зависимости от его радиуса и расстояния между центрами частиц. Видно, что фокусное расстояние почти не зависит от межчастичного расстояния (т.е. от числа частиц) при фиксированном радиусе кольца. Таким образом, фокусное расстояние и положение пиков плотности энергии определяется преимущественно радиусом кольца (рисунок 7(а)) и длиной волны (рисунок 6). Число частиц определяет величину усиления плотности энергии в фокусе согласно формуле (23).

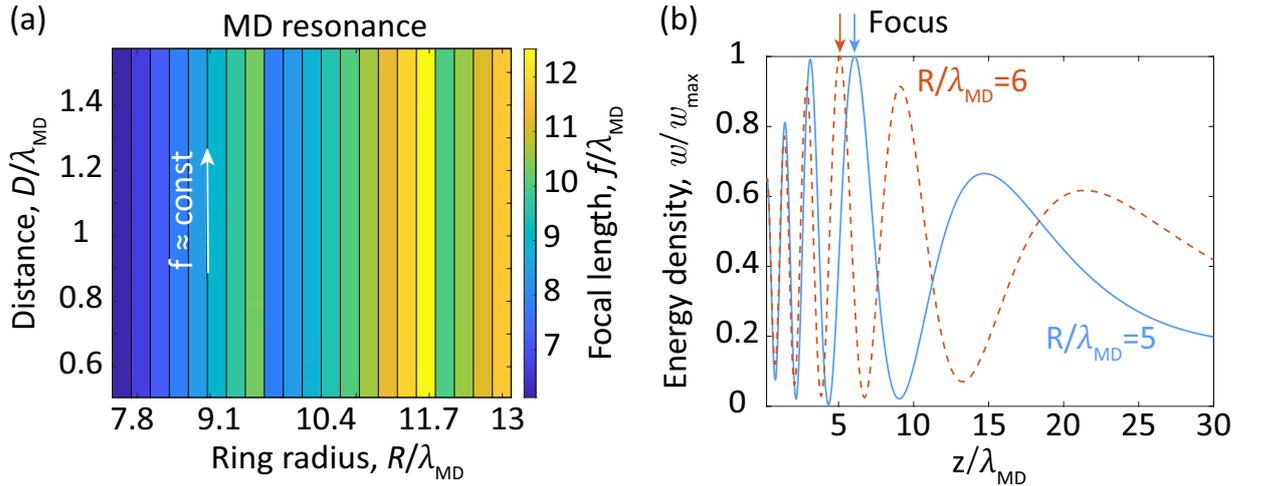


Рисунок 7 – Фокусирующие свойства кольца наночастиц. (а) Зависимость фокусного расстояния кольца от его радиуса и расстояния между частицами для МД-го резонанса ($\lambda_{MD} = 770$ нм) одиночной частицы. (б)

Нормированная на максимум плотность энергии вдоль z , посчитанная в НБП по формуле (23), для колец с радиусами $R/\lambda_{MD} = 6$ и $R/\lambda_{MD} = 5$.

Стрелками показано положение фокусов этих колец

Рисунок 7(а) также показывает, что фокусное расстояние изменяется с ростом радиуса кольца немонотонно. Такое поведение можно объяснить следующим образом. Конструктивная интерференция между внешней падающей волной и рассеянными волнами приводит к возникновению максимумов и минимумов плотности энергии на оси z (формула (23)). Эти пики удаляются от плоскости кольца с ростом его радиуса (рисунок 7(б)). В результате при большем радиусе глобальный максимум плотности энергии (т.е. фокус) может оказаться ближе к кольцу. Когда это происходит, фокусное расстояние уменьшается с увеличением радиуса кольца (см. фокусные расстояния на рисунке 7(б)). Аналогичное поведение фокусного расстояния наблюдается и на МК-ом резонансе.

2.3 Применимость нулевого борновского приближения

Оптимизация металинз происходит с использованием НБП (раздел 3), поэтому необходимо исследовать применимость НБП для моделирования фокусирующих свойств кольца. Определим ошибку (относительное отклонение) величины $\Delta V^{(n)}$, посчитанной в борновском приближении n -ого порядка $V^{(n)}$ и в рамках МСМ $V^{(\text{СММ})}$

$$\Delta V^{(n)} = \frac{|V^{(\text{СММ})} - V^{(n)}|}{V^{(\text{СММ})}} \times 100\%.$$

На рисунке 8 показаны ошибка фокусного расстояния $\Delta f^{(0)}$ (рисунки 8(а) и 8(б)) и ошибка величины плотности энергии в фокусе $\Delta w_f^{(0)}$ (рисунки 8(с) и 8(д)) в зависимости от радиуса кольца и межчастичного расстояния для НБП ($n = 0$).

В НБП фокусное расстояние точно определено при всех рассматриваемых параметрах кольца: ошибка меньше 2.5% для МД-го резонанса и меньше 1% для МК-го резонанса. Это значит, что на резонансных частотах НБП применимо для вычисления фокусного расстояния кольца при любом межчастичном расстоянии ($D > d$), поэтому посчитанное в НБП фокусное расстояние кольца на рисунке 7(а) практически равно фокусному расстоянию, найденному в МСМ. Ошибка для плотности энергии в фокусе показана на рисунках 8(с) и 8(д). Для рассматриваемых параметров точность НБП при вычислении плотности энергии ниже, чем при вычислении фокусного расстояния.

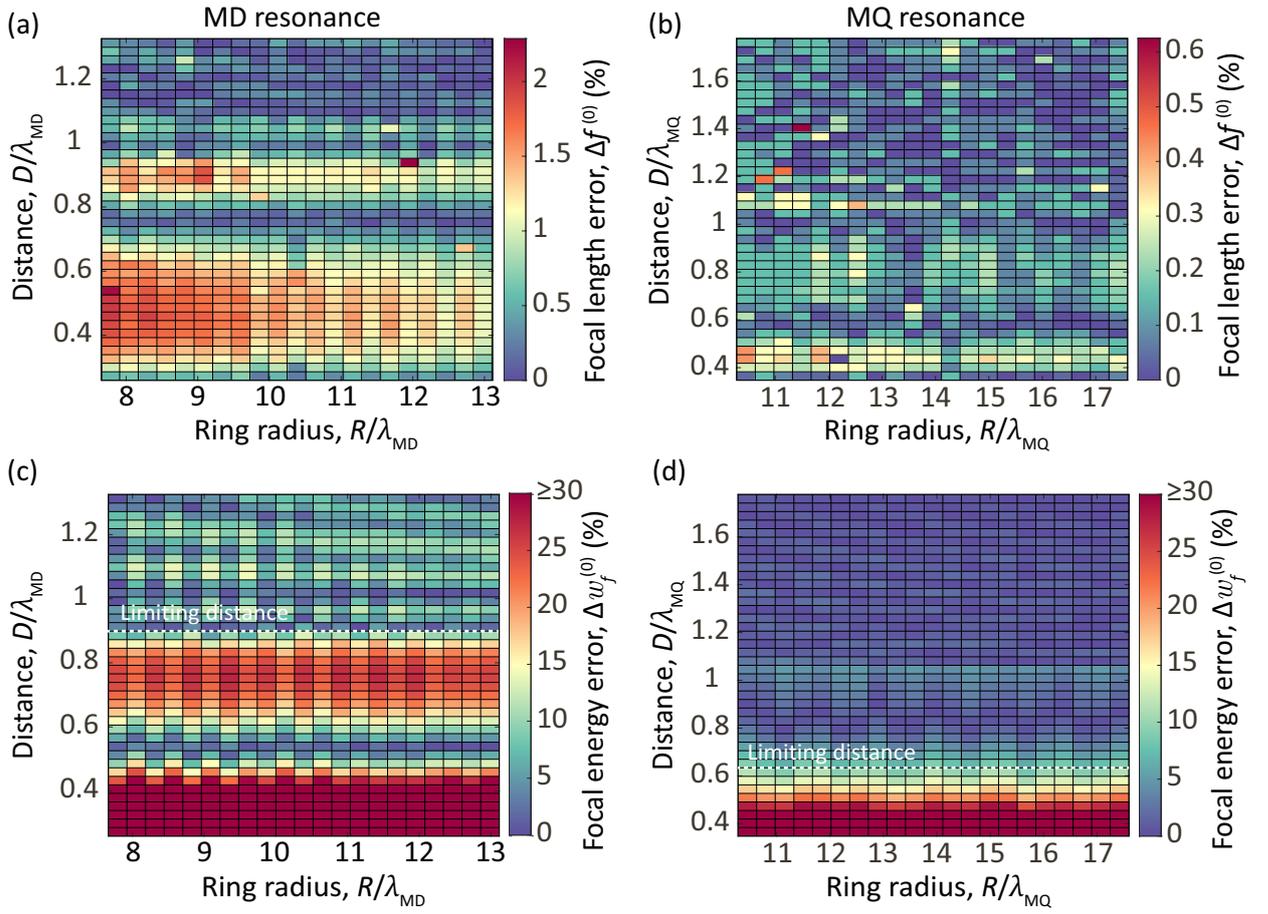


Рисунок 8 – (a,b) Ошибка фокусного расстояния для НБП $\Delta f^{(0)}$ как функция радиуса кольца и расстояния между частицами для (a) МД-го ($\lambda_{MD} = 770$ нм) и (b) МК-го ($\lambda_{MQ} = 574$ нм) резонанса. (c,d) Ошибка плотности энергии в фокусе кольца для НБП $\Delta w_f^{(0)}$ для (c) МД-го и (d) МК-го резонанса. Белой пунктирной линией показано предельное расстояние между частицами: для всех бóльших расстояний относительная ошибка НБП меньше либо порядка 10%

На рисунках 8(c) и 8(d) видно, что, начиная с определённого значения межчастичного расстояния, ошибка плотности энергии становится достаточно низкой. Следовательно, можно определить предельное расстояние между частицами, больше которого ошибка по плотности энергии $\Delta w_f^{(0)} \lesssim 10\%$ для всех рассматриваемых радиусов кольца. На рисунках 8(c) и 8(d) предельное расстояние показано белой пунктирной линией. Предельное расстояние $D = 0.92\lambda_{MD}$ для МД-го резонанса (770 нм) и $D = 0.66\lambda_{MQ}$ для МК-го резонанса (574 нм). В разделе 3 эти значения задают минимальное расстояние между частицами в процессе оптимизации металинз.

2.4 Борновские приближения более высокого порядка

На рисунке 9 показана ошибка плотности энергии в фокусе кольца наночастиц $\Delta w_f^{(n)}$ в зависимости от порядка БП и расстояния между частицами при фиксированном радиусе кольца. Как и ожидалось, с ростом порядка БП

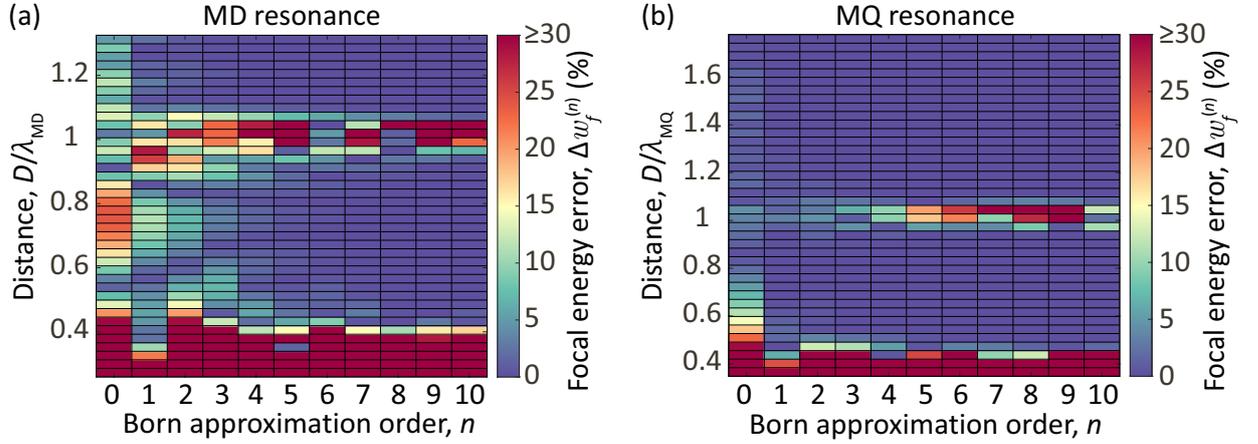


Рисунок 9 – Ошибка плотности энергии в фокусе кольца для БП разных порядков $\Delta w_f^{(n)}$ на длине волны (а) МД резонанса (770 нм) и (б) МК резонанса (574 нм) в зависимости от расстояния между частицами в кольце с фиксированным радиусом $R = 8.6$ мкм

ошибка расчёта оптического отклика уменьшается, что происходит, вообще говоря, если борновский ряд сходится. Для расчёта плотности энергии в фокусе с ошибкой меньше 10% практически для всех рассматриваемых параметров кольца достаточно пятого БП на МД-ом резонансе и первого БП на МК-ом резонансе. Однако ошибка растёт с ростом порядка БП, если ряд расходится, а именно при $D \lesssim 0.4\lambda_0$ и $D \approx \lambda_0$ (рисунок 9), где λ_0 – резонансная длина волны. В разделе 4 проанализирована сходимость борновского ряда для кольца в скалярном приближении и показано, что ряд расходится при $D \approx m\lambda_0$, где m – целое.

Будет ли использование БП высоких порядков рациональнее использования модели связанных мультиполей? Для ответа на этот вопрос сравнивалось время решения системы (12) этими методами. Для нахождения точного решения системы (12) использовалась функция *linsolve* приложения Matlab [47]. Число частиц в кольце варьировалось от $N = 100$ до $N = 1000$ при фиксированном расстоянии между частицами $D = 0.7\lambda_0$, и для системы $24N$ линейных уравнений (12) пять раз измерялось время решения функцией *linsolve* и борновскими приближениями, а после усреднялось. Результаты показаны на рисунке 10. Видно, что время решения системы (12) даже в ше-

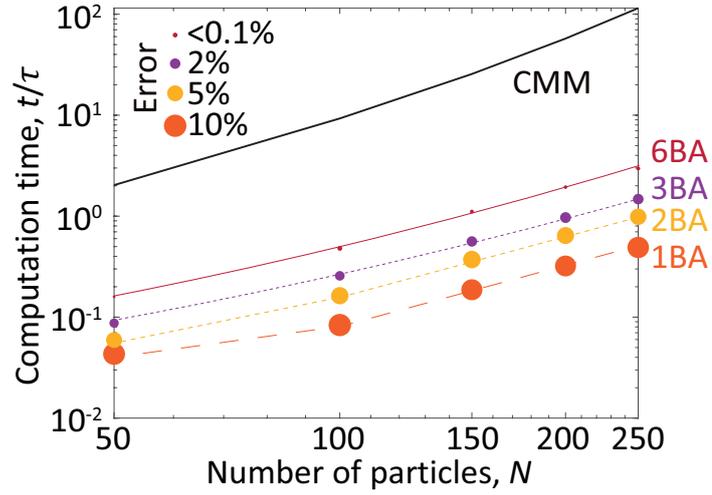


Рисунок 10 – Время решения системы (12) при помощи функции *linsolve* в Matlab (чёрная линия) и БП разных порядков (цветные линии) в зависимости от числа частиц в кольце при фиксированном расстоянии между частицами $D = 0.7\lambda_{\text{MD}}$, где $\lambda_{\text{MD}} = 770$ нм. Размер кружка пропорционален величине ошибки расчёта плотности энергии в фокусе в n -ом борновском приближении (17) относительно МСМ (15)

стом БП (бордовая линия на рисунке 9) меньше, чем время, необходимое для точного решения (черная линия на рисунке 9), при этом ошибка в шестом БП меньше 0.1%. Величины ошибок для первого, второго и третьего БП также показаны на рисунке 9. Таким образом, использование метода последовательных БП более предпочтительно по сравнению с МСМ из-за меньшего времени расчёта при достаточно высокой точности. Асимптотическая зависимость времени решения (12) от числа частиц следующая: $O(N^3)$ для МСМ, $O(nN^2)$ для БП порядка $n > 0$ и $O(N)$ для НБП [48]. Таким образом, быстрее всего решать систему (12) в НБП, точность которого при этом не зависит от сходимости борновского ряда.

Выводы по разделу 2:

- а) Ошибка расчёта свойств фокуса кольца наночастиц в модели связанных мультиполей $\lesssim 1\%$ при любом расстоянии между центрами частиц $D > d$ на МД-ом и МК-ом резонансах.
- б) Ошибка расчёта свойств фокуса кольца наночастиц в нулевом борновском приближении $\lesssim 10\%$, если расстояние между частицами $D \geq 0.92\lambda_{\text{MD}}$ для МД-го и $D \geq 0.66\lambda_{\text{MQ}}$ для МК-го резонансов.

- в) Асимптотическая зависимость времени решения системы (12) от числа частиц: $O(N^3)$ для МСМ, $O(nN^2)$ для БП порядка $n > 0$ и $O(N)$ для НБП.
- г) Интерференция вторичных (рассеянных) волн приводит к появлению максимумов и минимумов плотности энергии вдоль оси кольца, то есть кольцо наночастиц обладает свойством фокусировки.
- д) Фокусное расстояние и положения пиков плотности энергии кольца наночастиц определяются преимущественно радиусом кольца и длиной волны и практически не зависят от числа частиц (то есть от расстояния между частицами), которое определяет усиление плотности энергии в фокусе.

3 ОПТИМИЗАЦИЯ МЕТАЛИНЗ

Металинзы, разрабатываемые в работе, состоят из концентрических колец наночастиц, которые резонансно рассеивают падающую волну. Плотность энергии на оси кольца (оси z) имеет несколько максимумов, возникающих благодаря конструктивной интерференции между падающей и рассеянной волнами (формула (23) для плотности энергии вдоль z). При увеличении радиуса кольца количество максимумов растёт, а их положение смещается вдоль оптической оси от плоскости кольца. Следовательно, в структуре, состоящей из нескольких колец, наиболее сильный эффект фокусировки может быть достигнут, если все кольца имеют интерференционные максимумы в одной и той же точке (будущем фокусе линзы). Однако это условие не является достаточным – также важно, чтобы в фокусе совпадали фазы волн, приходящих от колец в фокус. В процессе оптимизации определяется оптимальное количество колец и подбираются их параметры, такие как радиус кольца и количество частиц, чтобы получить фокусировку в требуемой точке.

3.1 Описание оптимизационного алгоритма

Оптимизация осуществлялась при помощи эволюционного многокритериального алгоритма Simple Evolutionary Multi-Objective Optimizer (SEMO) [49]. В процессе оптимизации преследовались две цели: минимизировать расстояние между фокусом данной линзы и желаемым положением фокуса (рассогласование фокуса) и максимизировать плотность энергии в фокусе. Состояние алгоритма характеризуется набором металинз (популяцией), который образует кривую Парето (каждая отдельная металинза не доминирует над какой-либо другой). Считается, что одна металинза *доминирует* над другой, если её рассогласование фокуса меньше, а плотность энергии в фокусе больше, чем у другой металинзы; во всех остальных случаях две металинзы считаются «одинаково хорошими», то есть ни одна из двух металинз не доминирует над другой. Расчёт плотности энергии осуществляется при помощи НБП. На каждом шаге оптимизации одна случайно выбранная из популяции металинза мутирует. Во время мутации может измениться радиус кольца или количество частиц в нём. Как только случайно выбранный индивид мутирует, набор металинз, образующий кривую Парето, обновляется до состояния, когда в него входят лишь индивиды, которые не домини-

руг друг над другом. Критерий остановки оптимизации следующий: оптимизация прекращается после выполнения определённого количества шагов, в течение которых кривая Парето не изменяется. Наконец, из популяции выбираются особи (металинзы) с нужным фокусным расстоянием, и, если они существуют, алгоритм возвращает ту, у которой наибольшая плотность энергии в фокусе. Если алгоритм не смог найти такую особь, он перезапускается. Схематичное представление работы оптимизационного алгоритма показано на рисунке 11.

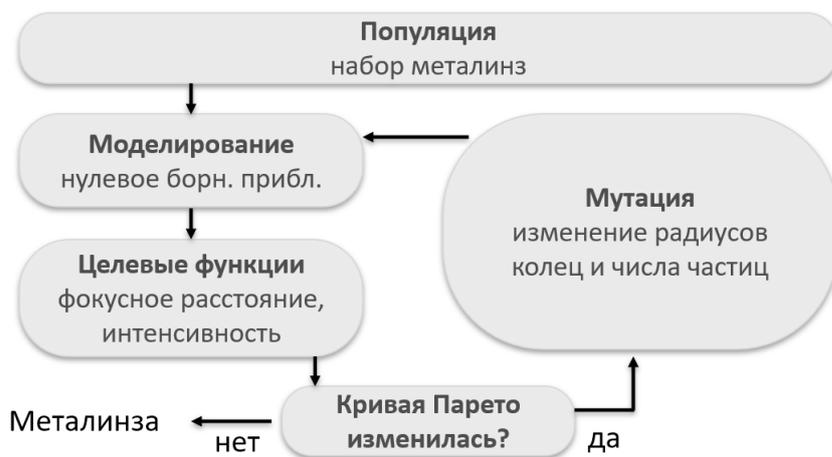


Рисунок 11 – Схема оптимизации металинзы при помощи эволюционного алгоритма и НБП

3.2 Результаты оптимизации

Описанный в подразделе 3.1 алгоритм был применён для оптимизации структур *c*-Si наносфер с целью получения металинз, имеющих фокусное расстояние 5 мкм. В процессе оптимизации общий диаметр металинзы был ограничен 20-ю мкм, а количество частиц в кольце и число колец могли свободно меняться так, чтобы минимальное расстояние между любыми двумя частицами всегда было больше заданного. Также были зафиксированы диаметр (200 нм), рабочая длина волны и, как следствие, показатель преломления частицы, равный показателю преломления *c*-Si на рабочей длине волны. Внешняя падающая волна распространялась вдоль положительного направления оси *z* и была поляризована по *x*. Оптимизация выполнялась в НБП.

На рисунке 12 приведены результаты оптимизации для двух длин волн, соответствующих МД-ому резонансу $\lambda_{MD} = 770$ нм и МК-ому резонансу $\lambda_{MQ} = 574$ нм. В процессе оптимизации был установлен нижний предел на расстояние между частицами, равный $D = 0.92\lambda_{MD}$ для МД-го резонанса

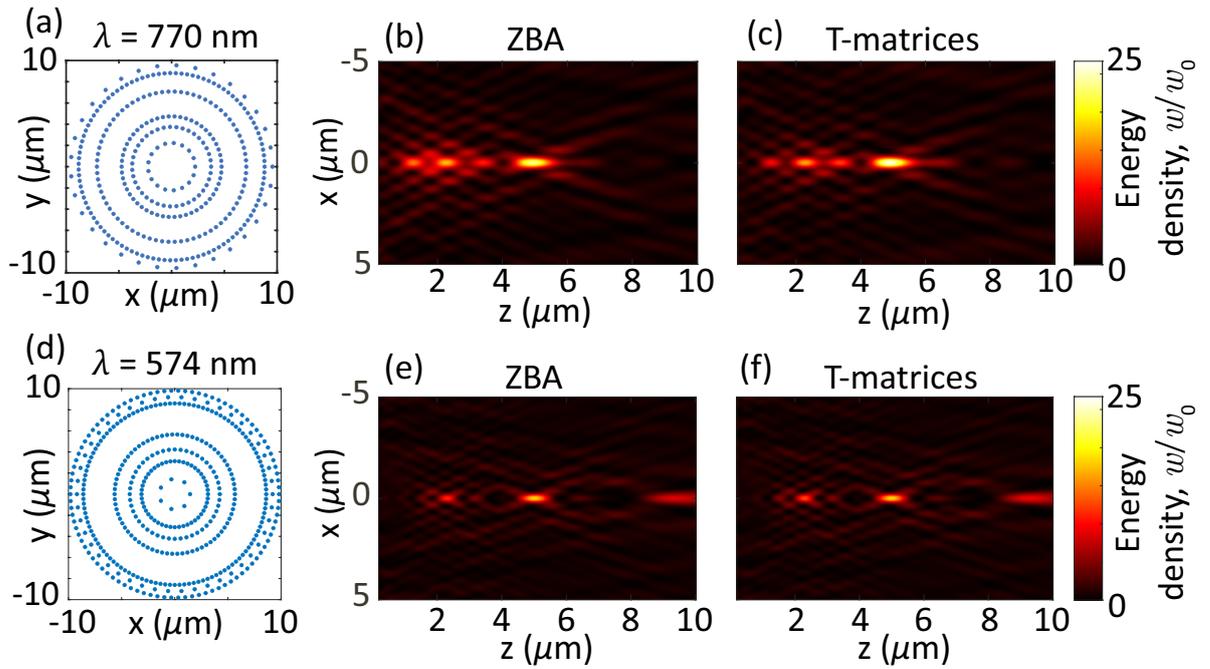


Рисунок 12 – Оптимизированные структуры кремниевых наносфер (металинзы) и их профили нормированной плотности энергии. (a) Конструкция металинзы для работы на МД резонансе, синими кружками показаны положения частиц. (b,c) Распределение плотности электромагнитной энергии (22) вблизи металинзы, посчитанное в НБП (b) и при помощи метода Т-матриц [43] (c). (d-f) То же самое для МК резонанса

и $D = 0.66\lambda_{\text{MD}}$ для МК-го резонанса. Таким образом, в оптимизированных структурах минимальное расстояние между частицами может быть больше или равно предельному расстоянию, чтобы НБП давало корректные результаты (подраздел 2.3). Обе структуры, представленные на рисунках 12(a) и 12(d), демонстрируют фокусировку вблизи 5 мкм (рисунки 12(b) и 12(e)). Диаметры оптимизированных металинз получились меньше заданного максимального значения (20 мкм) и равны 19.1 мкм для МД-го резонанса и 19.6 мкм для МК-го резонанса, в то время как общее количество частиц в структурах составляет $N = 320$ и $N = 437$, соответственно.

Чтобы проверить результаты оптимизации металинз в НБП, а именно профили плотности энергии вблизи металинз в НБП (рисунки 12(b) и 12(e)), профили плотности энергии также были рассчитаны численным методом Т-матриц [43]. Результаты расчёта методом Т-матриц показаны на рисунках 12(c) и 12(f). Видно, что профили энергии на рисунках 12(b), 12(e) и рисунках 12(c), 12(f) качественно и количественно совпадают друг с другом. В таблице 1 приведены значения фокусных расстояний и плотностей энергии

Таблица 1 – Значения фокусного расстояния и плотности энергии в фокусе конструкций металинз с рисунков 12(а) и 12(е)

Металинза	НБП		Т-матрицы	
	f (мкм)	w_f/w_0	f (мкм)	w_f/w_0
МД: $\lambda = 770$ nm, $D_{\min} = 0.92\lambda$	4.92	24.1	4.92	26.68
МК: $\lambda = 574$ nm, $D_{\min} = 0.66\lambda$	5	18.69	5	18.87

в фокусах оптимизированных металинз. Для обеих металинз фокусные расстояния определяются одинаково обоими методами: $f = 4.92$ мкм и $f = 5$ мкм для металинз, работающих на МД и МК резонансах, соответственно. Отклонения от требуемого фокусного расстояния (5 мкм) равны 1.6% для МД-го и 0% для МК-го резонансов. В таблице 1 также приведены значения плотности энергии в фокусе (то есть в точках $z = 4.92$ мкм для МД и $z = 5$ мкм для МК резонансов). Ошибка расчёта этой величины в НБП относительно метода Т-матриц равна 9.68% для МД-го и 0.95% для МК-го резонансов.

Таким образом, при помощи НБП были оптимизированы положения кремниевых наносфер и получены структуры для фокусировки света (металинзы) с требуемым фокусным расстоянием и высоким усилением плотности энергии в фокусе. То, что в оптимизированных металинзах расстояние между частицами больше их размера, делает возможным изготовление этих металинз *методом лазерной печати наночастиц* [50], позволяющим получать структуры из частиц сферической формы с точным позиционированием и резонансным откликом [51]. В работе [52] приведены примеры структур наносфер, изготовленных при помощи метода лазерной печати, в том числе металинзы из металлических наносфер.

Выводы по разделу 3:

- а) При помощи эволюционного алгоритма и нулевого борновского приближения были оптимизированы положения кремниевых наночастиц и получены металинзы с заданным фокусным расстоянием для работы на МД-ом и МК-ом резонансах, при этом результаты оптимизации и моделирования металинз в НБП согласуются с моделированием точным методом Т-матриц.

- б) В фокусе металинз, геометрии которых были получены нами в результате оптимизации, плотность энергии превосходит в 25 раз плотность энергии падающей волны на МД резонансе и в 19 раз на МК резонансе.
- в) Оптимизированные металинзы могут быть применены для работы на наномасштабе, поскольку их толщина составляет 200 нм, а диаметры МД-ой линзы и МК-ой линзы равны 19.1 мкм и 19.6 мкм, соответственно.
- г) При помощи оптимизации в НБП можно разрабатывать металинзы из разреженно упакованных частиц, которые впоследствии могут быть изготовлены при помощи метода лазерной печати.

4 СХОДИМОСТЬ БОРНОВСКОГО РЯДА

В разделе 1 было предложено моделировать оптический отклик структур наночастиц при помощи метода последовательных борновских приближений, а в разделах 2 и 3 обсуждалась применимость метода в задаче разработки металинзы. В разделах 2 и 3 основное внимание было уделено нулевому борновскому приближению, поскольку именно в НБП рассчитывались поля в процессе оптимизации. Однако в подразделе 2.4 было показано, что для получения корректных результатов в борновских приближениях более высокого порядка необходимо знать, сходится ли борновский ряд. Математические критерии сходимости для общего случая написаны в подразделе 1.3. В этом разделе рассмотрено несколько частных систем (димер и кольцо), чтобы ответить на вопрос: при каком расстоянии между частицами борновский ряд может сходиться вблизи мультипольного резонанса одиночной частицы? Результаты этого раздела выходят за рамки задачи о разработке металинзы и могут быть применимы к другим структурам наночастиц.

Рассмотрим рассеяние плоской волны $\mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ на димере наносфер (рисунок 13(a)), имеющим простое аналитическое решение в рамках МСМ. Для простоты будем считать, что вблизи мультипольного резонанса частицы внешняя волна возбуждает в частице только резонансный мультиполь. Например, в случае ЭД-го резонанса система (12) в этом приближении записывается в следующем виде

$$\begin{aligned}\mathbf{p}^1 &= \alpha_p \mathbf{E}_0(\mathbf{r}_1) + \alpha_p k^2 \varepsilon_0^{-1} \hat{G}_{12}^{pp} \mathbf{p}^2 \\ \mathbf{p}^2 &= \alpha_p \mathbf{E}_0(\mathbf{r}_2) + \alpha_p k^2 \varepsilon_0^{-1} \hat{G}_{21}^{pp} \mathbf{p}^1,\end{aligned}\tag{24}$$

где $\hat{G}_{12}^{pp} = \hat{G}_{21}^{pp}$ (см. подраздел 1.4). Центры частиц расположены в точках $\mathbf{r}_1 = [0, +D/2, 0]$ и $\mathbf{r}_2 = [0, -D/2, 0]$ (рисунок 13(a)), следовательно, в уравнениях (24) скалярное произведение $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i = 0$, где $i = 1, 2$. В рассматриваемой задаче $E_0(\mathbf{r}_1) = E_0(\mathbf{r}_2)$, но временно будем писать зависимость внешнего поля от координаты частицы.

Из-за симметрии димера дипольные моменты имеет компоненты только вдоль падающего поля, остальные компоненты равны нулю. Дипольный

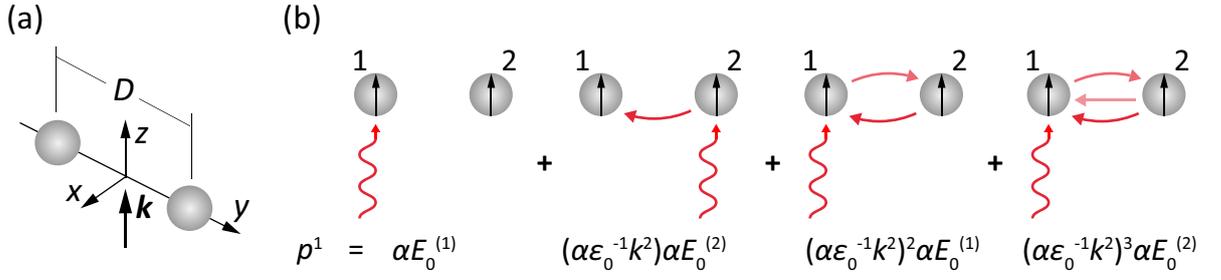


Рисунок 13 – (а) Схематичное изображение димера наночастиц, находящегося в вакууме, с отмеченным волновым вектором падающей волны. (b) Если борновский ряд (26) сходится, дипольный момент 1-ой частицы можно представить в виде бесконечной суммы перерассеяний между двумя частицами. Слагаемое $\alpha_p E_0^{(1)}$ соответствует поглощению внешней волны 1-ой частицей; $(\alpha k^2 \varepsilon_0^{-1} G_{12})$ – поглощению внешней волны 2-ой частицей и рассеянию в сторону 1-ой; $(\alpha k^2 \varepsilon_0^{-1} G_{12})^2$ – поглощению внешней волны 1-ой частицей, рассеянию в сторону 2-ой и обратному рассеянию в сторону 1-ой и т.д. Здесь $\alpha \equiv \alpha_p$, $G_{12} \equiv G_{12,\beta\beta}^{pp}$

момент первой частицы

$$p_\beta^1 = \frac{\alpha_p E_0^{(1)} + \alpha_p^2 k^2 \varepsilon_0^{-1} G_{12,\beta\beta}^{pp} E_0^{(2)}}{1 - \left(\alpha_p k^2 \varepsilon_0^{-1} G_{12,\beta\beta}^{pp} \right)^2}, \quad (25)$$

где $E_0^{(i)} \equiv E_0(\mathbf{r}_i)$, $\beta = x$ для поперечной поляризации ($\mathbf{E}_0 \parallel x$), и $\beta = y$ для продольной поляризации ($\mathbf{E}_0 \parallel y$). Напишем борновский ряд для (25), разложив знаменатель в геометрический ряд

$$\begin{aligned} p_\beta^1 &= \left[\alpha_p E_0^{(1)} + \alpha_p^2 k^2 \varepsilon_0^{-1} G_{12,\beta\beta}^{pp} E_0^{(2)} \right] \sum_{m=0}^{\infty} \left(\alpha_p k^2 \varepsilon_0^{-1} G_{12,\beta\beta}^{pp} \right)^{2m} = \\ &= \alpha_p E_0^{(1)} + \left(\alpha_p k^2 \varepsilon_0^{-1} G_{12,\beta\beta}^{pp} \right) \alpha_p E_0^{(2)} + \\ &+ \left(\alpha_p k^2 \varepsilon_0^{-1} G_{12,\beta\beta}^{pp} \right)^2 \alpha_p E_0^{(1)} + \left(\alpha_p k^2 \varepsilon_0^{-1} G_{12,\beta\beta}^{pp} \right)^3 \alpha_p E_0^{(2)} + \dots \quad (26) \end{aligned}$$

Борновский ряд (26), соответствующий бесконечному количеству перерассеяний между парой частиц, проиллюстрирован рисунком 13(b).

Поскольку $E_0^{(1)} = E_0^{(2)} = E_0$, дипольные моменты, полностью учитывающие электромагнитное взаимодействие между частицами (диполями)

$$p_\beta^i = \frac{\alpha_p E_0}{1 - \alpha_p k^2 \varepsilon_0^{-1} G_{12,\beta\beta}^{pp}}, \quad i = 1, 2 \quad (27)$$

а борновский ряд для (27) также является геометрической прогрессией

$$p_\beta^i = \alpha_p E_0 \sum_{m=0}^{\infty} \left(\alpha_p k^2 \varepsilon_0^{-1} G_{12,\beta\beta}^{pp} \right)^m, \quad i = 1, 2. \quad (28)$$

Решение системы (24) в борновском приближении n -ого порядка получается путём замены ряда (28) на конечную сумму: $\sum_{m=0}^{\infty} \rightarrow \sum_{m=0}^n$. Критерий сходимости геометрического ряда (28)

$$|\alpha_p \cdot k^2 \varepsilon_0^{-1} G_{12,\beta\beta}^{pp}| < 1. \quad (29)$$

Поляризуемость α_p выражается через коэффициент Ми согласно (7), тогда критерий сходимости борновского ряда для ЭД-го резонанса (29) можно записать в следующем виде

$$6\pi \cdot |a_1| \cdot |k_S^{-1} G_{12,\beta\beta}^{pp}| < 1. \quad (30)$$

Аналогично рассмотрев другие мультипольные резонанса, можно получить критерии сходимости для МД-го, ЭК-го и МК-го резонансов

$$6\pi \cdot |b_1| \cdot |k_S^{-1} G_{12,\beta\beta}^{pp}| < 1 \quad (31)$$

$$60\pi \cdot |a_2| \cdot |k_S^{-3} B_{12,\beta z}^{QQ}| < 1 \quad (32)$$

$$60\pi \cdot |b_2| \cdot |k_S^{-3} B_{12,\beta z}^{QQ}| < 1, \quad (33)$$

соответственно, где

$$B_{12,\beta z}^{QQ} = \begin{cases} \frac{ik_S^3 e^{ik_S R}}{24\pi k_S R} \left[-i + \frac{5}{k_S R} + \frac{21i}{k_S^2 R^2} - \frac{48}{k_S^3 R^3} - \frac{48i}{k_S^4 R^4} \right], & \beta = y \\ \frac{ik_S^3 e^{ik_S R}}{12\pi k_S^2 R^2} \left[-1 - \frac{3i}{k_S R} + \frac{6}{k_S^2 R^2} + \frac{6i}{k_S^3 R^3} \right], & \beta = x \end{cases}.$$

Пусть $\varepsilon_S = 1$, тогда $k_S = k = 2\pi/\lambda$. Рассмотрим два случая.

Нет поглощения ($\varepsilon'' = 0$). В этом случае условие ЭД резонанса следующее [53]

$$a_1 = 1. \quad (34)$$

Из условия (34) при заданном размере и показателе преломления частицы можно найти длину волны ЭД-го резонанса λ_0 . Например, для частицы с радиусом 100 нм и проницаемостью $\varepsilon = 12.5$ имеем $\lambda_0 = 555$ нм. Условия других мультипольных резонансов аналогичны (34): соответствующий коэффициент Ми равен единице. Учтя (34) в неравенстве (30), получаем условие сходимости борновского ряда для дипольных резонансов частиц без поглощения (омических потерь)

$$6\pi \cdot |k_0^{-1} G_{12,\beta\beta}| < 1, \quad (35)$$

которое не зависит от размера частицы и её показателя преломления (однако длина волны резонанса зависит от этих параметров). Решив неравенство (35), найдём *критическое* расстояние для продольной и поперечной поляризаций: $D^y = 0.3\lambda_0$ и $D^x = 0.21\lambda_0$, соответственно. Если расстояние между центрами частиц больше критического, борновский ряд сходится, иначе – расходится. Положив $|a_2| = 1$ в (32), или $|b_2| = 1$ в (33), имеем условие сходимости борновского ряда для квадрупольного резонанса

$$60\pi \cdot |k_0^{-3} B_{12,\beta z}^{QQ}| < 1, \quad (36)$$

из которого получаем критические расстояния: $D^{yz} = 0.44\lambda_0$ и $D^{xz} = 0.33\lambda_0$. При учёте сразу всех четырёх мультиполей взаимодействие между ними всегда приводит к появлению компонент мультиполей, соответствующих более высокому критическому расстоянию. Окончательно, критическое расстояние для дипольного и квадрупольного резонансов частицы без поглощения: $D^{(\text{dip})} = 0.3\lambda_0$ и $D^{(\text{quad})} = 0.44\lambda_0$, соответственно. Таким образом, если расстояние между любыми двумя частицами в структуре меньше этих величин для соответствующего резонанса, то борновский ряд, записанный для структуры, расходится.

Есть поглощение ($\varepsilon'' \neq 0$). При наличии поглощения (омических потерь) условие резонанса отлично от (34). На рисунке 14(а) показаны резо-

нансные значения модулей коэффициентов Ми как функции мнимой части проницаемости ε'' материала частицы. В численном моделировании ε' части-

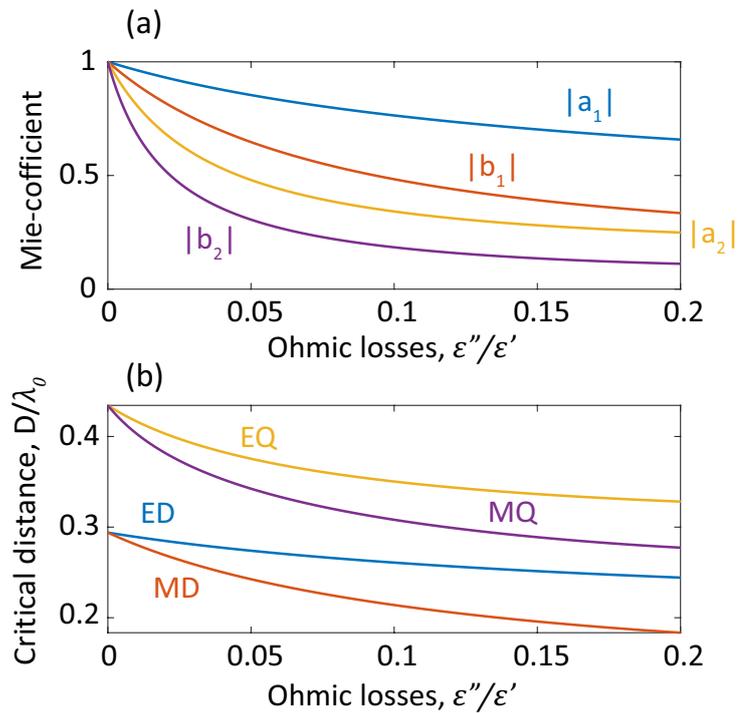


Рисунок 14 – (а) Абсолютные значения коэффициентов Ми ($|a_l|$ и $|b_l|$, где $l = 1,2$) в резонансе в зависимости от ε'' материала частицы, где $\varepsilon' = 12.5$, $\lambda_{ED} = 555$ нм, $\lambda_{MD} = 731$ нм, $\lambda_{EQ} = 407$ нм и $\lambda_{MQ} = 505$ нм. (б) Критическое расстояние между частицами как функция ε'' для рассматриваемых резонансов

цы оставалась постоянной, а размер частицы менялся, чтобы резонанс был на одной и той же длине волны для разных ε'' . Из рисунка 14(а) видно, что при увеличении поглощения в частице уменьшается значение модуля коэффициента Ми в резонансе. Другими словами, когда в частице увеличивается поглощение, уменьшается её рассеяние, поскольку эффективность рассеяния мультипольной моды пропорциональна квадрату модуля коэффициента Ми (формула (2)). Из рисунка 14(а) также следует, что омические потери подавляют резонансы рассеяния квадруполь сильнее, чем диполей; а резонансы магнитных мультиполей сильнее, чем электрических. Поскольку критерии сходимости борновского ряда (30)-(33) зависят от модулей коэффициентов Ми, то с увеличением поглощения критическое расстояние также снижается для всех мультипольных резонансов (рисунок 14(б)). Физический смысл этого результата понятен: при уменьшении рассеяния частицы снижается элек-

тромагнитное взаимодействие между частицами, поэтому оно может быть аппроксимировано конечным числом перерасеяний.

Применимость метода последовательных борновских приближений.

Зная критические расстояния между частицами, можно исследовать точность расчёта резонансного оптического отклика при помощи МПБП. Поместим одну частицу в начало декартовой системы координат, а положение второй частицы будем менять, при этом расстояние между частицами будет одновременно больше критического ($0.3\lambda_0$ или $0.44\lambda_0$ в зависимости от типа резонанса) и их диаметра (то есть частицы никогда не будут касаться). Предполагается, что частицы не поглощают ($\varepsilon'' = 0$). Точность расчёта отклика свяжем с ошибкой сечения рассеяния

$$\Delta\sigma_{\text{sca}}^{(n)} = \frac{|\sigma_{\text{sca}}^{(n)} - \sigma_{\text{sca}}^{(\text{CMM})}|}{\sigma_{\text{sca}}^{(\text{CMM})}} \times 100\%, \quad (37)$$

где σ_{sca} – сечение рассеяния димера с учётом вкладов диполей и квадрупольей [20], $\sigma_{\text{sca}}^{(\text{CMM})}$ и $\sigma_{\text{sca}}^{(n)}$ – сечения рассеяния, посчитанные в рамках МСМ и в борновском приближении n -ого порядка, соответственно. На рисунке 15 показан минимальный порядок борновского приближения n , при котором ошибка $\Delta\sigma_{\text{sca}}^{(n)}$ становится меньше 10%.

Кольцо. Рассмотрим кольцо N сферических частиц (рисунок 5) и также, как и в случае димера, ограничимся ЭД-м приближением. В качестве внешнего поля возьмём векторный пучок с радиальной поляризацией, который возбуждает дипольные моменты с радиальной поляризацией (что ниже позволит раскладывать в борновский ряд скалярную величину). Векторный пучок также имеет продольную компоненту поля, но поскольку структура помещена в плоскости (xy) , поперечной направлению распространения (z) пучка, то моды, возбуждаемые в плоскости кольца могут быть рассмотрены отдельно от мод, поперечных плоскости кольца. Для радиальной моды система (12) записывается в следующем виде (для простоты отклик частиц на векторный пучок считается таким же, как на плоскую волну)

$$\mathbf{p}_\rho^i = \alpha_p E_0 + \alpha_p \frac{k^2}{\varepsilon_0} \sum_{j=1, j \neq i}^N G_{\rho\rho}^{pp}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \mathbf{p}_\rho^j. \quad (38)$$

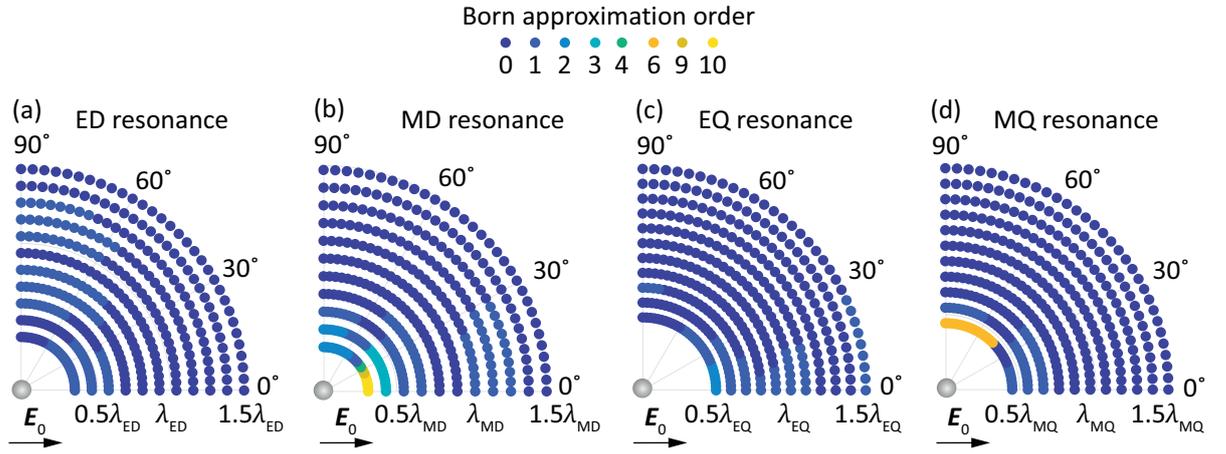


Рисунок 15 – Порядок борновского приближения как функция положения частицы, пока другая находится в центре системы координат для ЭД-го ($\lambda_{ED} = 555$ нм), МД-го ($\lambda_{MD} = 731$ нм), ЭК-го ($\lambda_{EQ} = 407$ нм) и МК-го ($\lambda_{MQ} = 505$ нм) резонансов. Положение цветного кружка соответствуют положению второй частицы, а его цвет – порядку борновского приближения, в котором ошибка (37) меньше 10%. Диаметр и проницаемость частиц: $d = 200$ нм и $\varepsilon = 12.5$. Нормально падающая плоская волна горизонтально поляризована

Будем искать решение (38) в следующем виде

$$\mathbf{p}_\rho^i = \tilde{p}[\cos(\varphi_i), \sin(\varphi_i), 0]. \quad (39)$$

Подставляя (39) в уравнение (38), находим выражение для модуля дипольных моментов \tilde{p}

$$\tilde{p} = \frac{\alpha_p}{1 - \alpha_p k^2 \varepsilon_0^{-1} \tilde{G}_{\rho\rho}^{pp}} E_0, \quad (40)$$

где введена дипольная (решёточная) сумма радиальной моды кольца

$$\tilde{G}_{\rho\rho}^{pp} = \sum_{j=2}^N G_{\rho\rho}^{pp}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_j) = \frac{k}{8\pi} \sum_{j=2}^N \frac{e^{iq \sin(\varphi_j/2)}}{q \sin(\varphi_j/2)} \left\{ 1 + \frac{3i}{q \sin(\varphi_j/2)} - \frac{3}{q^2 \sin^2(\varphi_j/2)} + \left[1 - \frac{i}{q \sin(\varphi_j/2)} + \frac{1}{q^2 \sin^2(\varphi_j/2)} \right] \cos(\varphi_j) \right\},$$

где R – радиус кольца, $q = 2kR$, φ_j – угловая координата j -ой частицы кольца.

Разложение в борновский ряд дипольного момента частицы в кольце (40) аналогично случаю димера (28). Критерий сходимости борновского ряда для кольца

$$\underbrace{|\alpha_p k^2 \varepsilon_0^{-1} \tilde{G}_{\rho\rho}^{pp}|}_S < 1. \quad (41)$$

Заметим, что борновский ряд всегда расходится, если выполнено условие конфигурационного резонанса (знаменатель (40) равен нулю)

$$\begin{cases} \operatorname{Re}[\alpha_p^{-1}] = \varepsilon_0^{-1} \operatorname{Re}[k^2 \tilde{G}_{\rho\rho}^{pp}] \\ \operatorname{Im}[\alpha_p^{-1}] = \varepsilon_0^{-1} \operatorname{Im}[k^2 \tilde{G}_{\rho\rho}^{pp}] \end{cases}.$$

На рисунке 16 показан параметр сходимости $|S|$, введённый в (41), для кольца с разным числом частиц N и межчастичным расстоянием D в условии ЭД-го резонанса одиночной частицы (34). Борновский ряд расходится, если

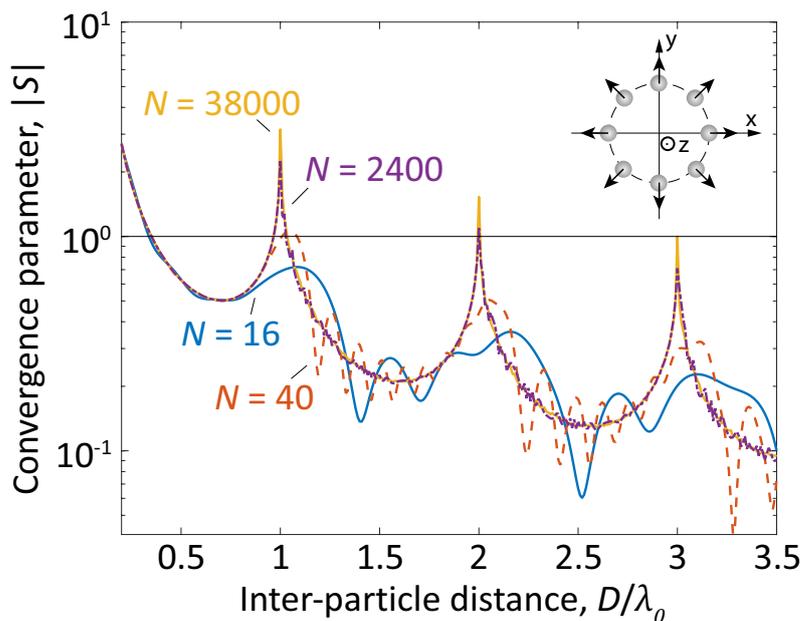


Рисунок 16 – Параметр сходимости (41) радиальной моды кольца (на вставке) с разным числом частиц и расстоянием между частицами

$D \lesssim 0.35\lambda_0$, и может расходиться, если а) $D \approx \lambda_0$ и $N > 33$, б) $D \approx 2\lambda_0$ и $N > 840$ (рисунки 9 и 16). В пределе $N \rightarrow \infty$ борновский ряд будет расходиться в точках $D = m\lambda_0$, где m – целое число, – условие брэгговского резонанса.

Выводы по разделу 4:

- а) Если расстояние между любыми двумя частицами без поглощения $D \leq 0.3\lambda_{\text{dip}}$ на дипольном резонансе и $D \leq 0.44\lambda_{\text{quad}}$ на квадрупольном резонансе, то борновский ряд, записанный для структуры частиц, расходится.
- б) Показано, что с ростом поглощения (ε'') материала частиц уменьшается резонансное значение модуля коэффициента Ми и, как следствие, рассеяние одной частицы, поэтому борновский ряд сходится при меньших расстояниях между частицами.
- в) Борновский ряд, записанный для кольца достаточно большого числа частиц, расходится, если длина волны соответствует мультипольному резонансу одиночной частицы, а расстояние между частицами $D = m\lambda_0$ (m – целое), что является условием конфигурационного брэгговского резонанса кольца.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе изложен мультипольный метод последовательных борновских приближений (МПБП) и исследована его применимость для моделирования и оптимизации резонансного оптического отклика структур диэлектрических наночастиц. К достоинствам этого метода можно отнести достаточно низкое время расчета, низкое потребление ресурсов компьютера, высокую точность и совместимость с оптимизационными алгоритмами. При помощи этого метода получены структуры кремниевых наносфер для фокусировки света (металинзы), у которых плотность энергии в фокусе на порядок превышает плотность энергии падающей волны. Основные результаты работы следующие:

- а) Изложена теоретическая модель описания оптического отклика ансамблей наночастиц, имеющих дипольные и квадрупольные резонансы электрического и магнитного типов.
- б) Найдены условия применимости нулевого борновского приближения для моделирования фокусирующих свойств колец кремниевых наносфер. Проведён анализ применимости борновских приближений более высокого порядка.
- в) Показана возможность фокусировки кольцом сферических наночастиц и исследованы его фокусирующие свойства.
- г) При помощи нулевого борновского приближения, мультипольного разложения и эволюционного алгоритма оптимизированы металинзы для работы на магнитном дипольном и квадрупольном резонансах одиночной наночастицы. Результаты оптимизации проверены точным численным методом Т-матриц и получено хорошее согласие.
- д) Получены критерии сходимости борновского ряда и условия применимости МПБП для моделирования оптического отклика ансамблей наночастиц на мультипольных резонансах одиночной наночастицы.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 *Khorasaninejad M., Capasso F.* Metalenses: Versatile multifunctional photonic components // *Science*. — 2017. — Т. 358. — eaam8100. — DOI: 10.1126/science.aam8100.
- 2 *Lalanne P., Chavel P.* Metalenses at visible wavelengths: past, present, perspectives // *Laser Photonics Rev.* — 2017. — Т. 11. — С. 1600295. — DOI: 10.1002/lpor.201600295.
- 3 *Chen W. T., Zhu A. Y., Capasso F.* Flat optics with dispersion-engineered metasurfaces // *Nat. Rev. Mater.* — 2020. — Т. 5, № 8. — С. 604–620. — DOI: 10.1038/s41578-020-0203-3.
- 4 *Chen W. T., Capasso F.* Will flat optics appear in everyday life anytime soon? // *Appl. Phys. Lett.* — 2021. — Т. 118, № 10. — С. 100503. — DOI: 10.1063/5.0039885.
- 5 Near-IR wide-field-of-view Huygens metalens for outdoor imaging applications / J. Engelberg [и др.] // *Nanophotonics*. — 2020. — Т. 9, № 2. — С. 361–370. — DOI: 10.1515/nanoph-2019-0177.
- 6 Metasurface eyepiece for augmented reality / G.-Y. Lee [и др.] // *Nat. Commun.* — 2018. — Т. 9. — С. 4562. — DOI: 10.1038/s41467-018-07011-5.
- 7 Ultra-compact visible chiral spectrometer with meta-lenses / A. Y. Zhu [и др.] // *APL Photonics*. — 2017. — Т. 2, № 3. — С. 036103. — DOI: 10.1063/1.4974259.
- 8 Broadband lightweight flat lenses for long-wave infrared imaging / M. Meem [и др.] // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. — 2019. — Т. 116, № 43. — С. 21375–21378. — DOI: 10.1073/pnas.1908447116.
- 9 Low-loss metasurface optics down to the deep ultraviolet region / C. Zhang [и др.] // *Light Sci. Appl.* — 2020. — Т. 9. — С. 55. — DOI: 10.1038/s41377-020-0287-y.
- 10 GaN Metalens for Pixel-Level Full-Color Routing at Visible Light / B. H. Chen [и др.] // *Nano Lett.* — 2017. — Т. 17, № 10. — С. 6345–6352. — DOI: 10.1021/acs.nanolett.7b03135.

- 11 Metalenses at visible wavelengths: Diffraction-limited focusing and subwavelength resolution imaging / M. Khorasaninejad [и др.] // *Science*. — 2016. — Т. 352. — С. 1190–1194. — DOI: 10.1126/science.aaf6644.
- 12 Ultrahigh Numerical Aperture Metalens at Visible Wavelengths / H. Liang [и др.] // *Nano Lett.* — 2018. — Т. 18, № 7. — С. 4460–4466. — DOI: 10.1021/acs.nanolett.8b01570.
- 13 Sub-Wavelength Grating Lenses With a Twist / S. Vo [и др.] // *IEEE Photonics Technology Letters*. — 2014. — Т. 26, № 13. — С. 1375–1378. — DOI: 10.1109/lpt.2014.2325947.
- 14 Subwavelength-thick lenses with high numerical apertures and large efficiency based on high-contrast transmitarrays / A. Arbabi [и др.] // *Nat. Commun.* — 2015. — Т. 6. — С. 7069. — DOI: 10.1038/ncomms8069.
- 15 High-Efficiency All-Dielectric Metalenses for Mid-Infrared Imaging / H. Zuo [и др.] // *Adv. Opt. Mat.* — 2017. — Т. 5, № 23. — С. 1700585. — DOI: 10.1002/adom.201700585.
- 16 Ultra-thin high-efficiency mid-infrared transmissive Huygens meta-optics / L. Zhang [и др.] // *Nat. Commun.* — 2018. — Т. 9. — С. 1481. — DOI: 10.1038/s41467-018-03831-7.
- 17 Aberration-Free Ultrathin Flat Lenses and Axicons at Telecom Wavelengths Based on Plasmonic Metasurfaces / F. Aieta [и др.] // *Nano Lett.* — 2012. — Т. 12, № 9. — С. 4932–4936. — DOI: 10.1021/nl302516v.
- 18 Polarization-Insensitive Metalenses at Visible Wavelengths / M. Khorasaninejad [и др.] // *Nano Lett.* — 2016. — Т. 16, № 11. — С. 7229–7234. — DOI: 10.1021/acs.nanolett.6b03626.
- 19 A broadband achromatic metalens for focusing and imaging in the visible / W. T. Chen [и др.] // *Nat. Nanotechnol.* — 2018. — Т. 13, № 3. — С. 220–226. — DOI: 10.1038/s41565-017-0034-6.
- 20 Babicheva V., Evlyukhin A. Analytical model of resonant electromagnetic dipole-quadrupole coupling in nanoparticle arrays // *Phys. Rev. B*. — 2019. — Т. 99. — С. 195444. — DOI: 10.1103/PhysRevB.99.195444.

- 21 *Yao K., Unni R., Zheng Y.* Intelligent nanophotonics: merging photonics and artificial intelligence at the nanoscale // *Nanophotonics*. — 2019. — Т. 8. — С. 339–366. — DOI: 10.1515/nanoph-2018-0183.
- 22 *Preble S., Lipson M., Lipson H.* Two-dimensional photonic crystals designed by evolutionary algorithms // *Appl. Phys. Lett.* — 2005. — Т. 86, № 6. — С. 061111. — DOI: 10.1063/1.1862783.
- 23 Parallel microgenetic algorithm design for photonic crystal and waveguide structures / J. Jiang [и др.] // *Opt. Lett.* — 2003. — Т. 28, № 23. — С. 2381–2383. — DOI: 10.1364/OL.28.002381.
- 24 Integrated optical devices design by genetic algorithm / L. Sanchis [и др.] // *Appl. Phys. Lett.* — 2004. — Т. 84, № 22. — С. 4460–4462. — DOI: 10.1063/1.1738931.
- 25 *Huntington M. D., Lauhon L. J., Odom T. W.* Subwavelength lattice optics by evolutionary design // *Nano Lett.* — 2014. — Т. 14, № 12. — С. 7195–7200. — DOI: 10.1021/nl5040573.
- 26 Evolutionary optimization of optical antennas / T. Feichtner [и др.] // *Phys. Rev. Lett.* — 2012. — Т. 109, № 12. — С. 127701. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.127701.
- 27 Evolutionary multi-objective optimization of colour pixels based on dielectric nanoantennas / P. R. Wiecha [и др.] // *Nat. Nanotechnol.* — 2017. — Т. 12, № 2. — С. 163. — DOI: 10.1038/nnano.2016.224.
- 28 *Mie G.* Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen // *Ann. Phys.* — 1908. — Т. 330. — С. 377–445. — DOI: 10.1002/andp.19083300302.
- 29 *Bohren C. F., Huffman D. R.* Absorption and Scattering of Light by Small Particles, — Wiley, New York, 1983.
- 30 Optical interaction between a dielectric tip and a nanometric lattice: implications for near-field microscopy / B. Labani [и др.] // *J. Opt. Soc. Am. B*. — 1990. — Т. 7, № 6. — С. 936. — DOI: 10.1364/josab.7.000936.

- 31 *Keller O., Xiao M., Bozhevolnyi S.* Configurational resonances in optical near-field microscopy: a rigorous point-dipole approach // *Surf. Sci.* — 1993. — Т. 280. — С. 217–230. — DOI: 10.1016/0039-6028(93)90370-Y.
- 32 The application of iterative solvers in discrete dipole approximation method for computing electromagnetic scattering / Z. H. Fan [и др.] // *Microw. Opt. Techn. Lett.* — 2006. — Т. 48. — С. 1741–1746. — DOI: 10.1002/mop.21760.
- 33 *Singham S. B., Bohren C. F.* Light scattering by an arbitrary particle: the scattering-order formulation of the coupled-dipole method // *J. Opt. Soc. Am. A.* — 1988. — Т. 5. — С. 1867–1872. — DOI: 10.1364/JOSAA.5.001867.
- 34 Light scattering by dielectric bodies in the Born approximation / A. S. Bereza [и др.] // *Phys. Rev. A.* — 2017. — Т. 95. — С. 063839. — DOI: 10.1103/PhysRevA.95.063839.
- 35 Optical response features of Si-nanoparticle arrays / A. B. Evlyukhin [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Т. 82. — С. 045404. — DOI: 10.1103/PhysRevB.82.045404.
- 36 Substrate-induced resonant magnetoelectric effects for dielectric nanoparticles / A. E. Miroschnichenko [и др.] // *ACS Photonics.* — 2015. — Т. 2. — С. 1423–1428. — DOI: 10.1021/acsp Photonics.5b00117.
- 37 Multipolar response of nonspherical silicon nanoparticles in the visible and near-infrared spectral ranges / P. D. Terekhov [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2017. — Т. 96. — С. 035443. — DOI: 10.1103/PhysRevB.96.035443.
- 38 Modeling of isotropic backward-wave materials composed of resonant spheres / L. Jylhä [и др.] // *J. Appl. Phys.* — 2006. — Т. 99, № 4. — С. 043102. — DOI: 10.1063/1.2173309.
- 39 Mie resonance-based dielectric metamaterials / Q. Zhao [и др.] // *Mater. Today.* — 2009. — Т. 12, № 12. — С. 60–69. — DOI: 10.1016/S1369-7021(09)70318-9.
- 40 Collective resonances in metal nanoparticle arrays with dipole-quadrupole interactions / A. B. Evlyukhin [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2012. — Т. 85, № 24. — С. 245411. — DOI: 10.1103/PhysRevB.85.245411.

- 41 *Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М.* Численные методы. — М.: Наука, 1987. — Гл. Численные методы алгебры.
- 42 *Aspnes D. E., Studna A. A.* Dielectric functions and optical parameters of Si, Ge, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb from 1.5 to 6.0 eV // *Phys. Rev. B.* — 1983. — Т. 27. — С. 985. — DOI: 10.1103/PhysRevB.27.985.
- 43 CELES: CUDA-accelerated simulation of electromagnetic scattering by large ensembles of spheres / A. Egel [и др.] // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* — 2017. — Т. 199. — С. 103–110. — DOI: 10.1016/j.jqsrt.2017.05.010.
- 44 Plasmons in nearly touching metallic nanoparticles: singular response in the limit of touching dimers / I. Romero [и др.] // *Opt. Express.* — 2006. — Т. 14, № 21. — С. 9988–9999. — DOI: 10.1364/OE.14.009988.
- 45 *Zou S., Janel N., Schatz G. C.* Silver nanoparticle array structures that produce remarkably narrow plasmon lineshapes // *J. Chem. Phys.* — 2004. — Т. 120, № 23. — С. 10871–10875. — ISSN 00219606. — DOI: 10.1063/1.1760740.
- 46 *Gillen G. D., Guha S.* Modeling and propagation of near-field diffraction patterns: A more complete approach // *Am. J. Phys.* — 2004. — Т. 72, № 9. — С. 1195–1201. — DOI: 10.1119/1.1767102.
- 47 <https://www.mathworks.com/products/matlab.html>.
- 48 *Introduction to Algorithms* / Т. Н. Cormen [и др.]. — The MIT Press, 2009.
- 49 *Kalyanmoy D.* Multi-Objective Optimization using Evolutionary Algorithms. — John Wiley & Sons, LTD, New York, USA, 2002.
- 50 Laser printing of silicon nanoparticles with resonant optical electric and magnetic responses / U. Zywietz [и др.] // *Nat. Commun.* — 2014. — Т. 5. — С. 3402. — DOI: 10.1038/ncomms4402.
- 51 Electromagnetic resonances of silicon nanoparticle dimers in the visible / U. Zywietz [и др.] // *ACS Photonics.* — 2015. — Т. 2, № 7. — С. 913–920. — DOI: 10.1021/acsp Photonics.5b00105.
- 52 *Laser Printing of Functional Materials: 3D Microfabrication, Electronics and Biomedicine* / U. Zywietz [и др.]. — John Wiley & Sons, 2018. — Гл. Laser printing of nanoparticles.

- 53 *Tribelsky M. I., Luk'yanchuk B. S.* Anomalous Light Scattering by Small Particles // *Phys. Rev. Lett.* — 2006. — T. 97, № 26. — C. 263902. — DOI: 10.1103/physrevlett.97.263902.