

**А.М. Серебренников**

Пермский национальный исследовательский  
политехнический университет

## **МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МУЛЬТИПОЛЬНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В ЦЕПОЧКАХ ЧАСТИЦ С ПОМОЩЬЮ ОДНОГО ЧИСЛЕННО-АНАЛИТИЧЕСКОГО МЕТОДА**

*Рассмотрен метод решения задач распространения волн плазменных колебаний в одномерных периодических системах частиц, базирующийся на использовании интегралов Стрэттона-Чу и векторного мультипольного разложения. Рассматриваются физика моделируемого явления и постановка электродинамической задачи многих тел. Кратко описан алгоритм решения. Показывается, что с помощью учета трансляционной симметрии повышается вычислительная эффективность метода. Обосновывается необходимость применения итерационных алгоритмов решения алгебраических систем уравнений и предлагаются два таких алгоритма. Получены решения некоторых тестовых задач. Приводится сопоставление полученных результатов с известными литературными данными. Рассматривается задача распространения продольной моды плазменных колебаний в цепочечном волноводе из сферических частиц.*

В последние годы в различных физических и инженерных сообществах возрос интерес к электродинамике систем, состоящих из металлических субмикро- и наночастиц. В частности, это объясняется возможностью применения поверхностных (объемных) плазмон-поляритонов (электронно-электромагнитных волн инфракрасного и видимого диапазонов) в фотонной схемотехнике. Также перспективно применение плазмонных частиц в методах спектроскопии на основе гигантского комбинационного рассеяния, в биомедицинских технологиях и ряде других приложений. Благодаря малым размерам частиц у разработчиков фотонных приборов появляется возможность вместе с излучающими системами (антеннами), а также базовыми устройствами (волноводами, резонаторами) конструировать и среду,

в которой будет распространяться информация, и при этом получать очень компактные устройства. Конструктивно такие среды могут быть одно-, двух- и трехмерными. Ожидается, что в этой области появятся новые идеи по части гибридизации электронных устройств и искусственных материальных сред для передачи и обработки информации. Разумеется, потребности техники диктуют необходимость создания новых средств разработки (компьютерных электромагнитных симуляторов), в основе которых лежали бы эффективные математические модели, методы и алгоритмы. Поскольку подходящим элементарным строительным блоком для создания плазмонных устройств рассматриваются сферические частицы, представляется разумным развивать методы, базирующиеся на сферическом анализе. Мы не говорим здесь о применении теории Ми в чистом виде [1], поскольку в любых реалистичных технологиях существуют производственные допуски и любые устройства имеют неконтролируемые геометрические отклонения в пределах этих допусков. Влияние таких отклонений на функциональность устройств необходимо принимать во внимание. В результате требуется моделировать ситуации с частицами несферической (а лучше произвольной) формы. В статьях [2–4] мы рассматривали различные подходы к решению задач рассеяния (излучения) с диэлектрическими частицами. В [3] нам удалось создать достаточно универсальные алгоритмы для работы с частицами сложной геометрии. В этой статье мы обобщим одну из наиболее удачных систем уравнений, полученную для одночастичной задачи в [3], на случай системы многих тел. Покажем, что учет трансляционной симметрии приводит к особому способу формирования разрешающей системы уравнений и позволяет получить существенный вычислительный выигрыш. Также мы решим некоторые тестовые задачи и проведем внутренние проверки в обеспечение верификации наших методов и алгоритмов. Кроме того, в работе проводится обсуждение разработанного нами метода итерационного решения переопределенных систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). Приводится обоснование его сходимости. Наконец, мы сфокусируемся на применении разработанных моделей и методов к исследованию цепочечных систем, представляющих интерес в качестве оптических волноводов [5–7]. Их исследованию посвящена секция численных результатов.

**Теория, постановка задачи и метод решения.** Поскольку в работе мы остаемся в рамках линейной электродинамики изотропных сред, то постановка задачи сохраняется в основном той же, что и в предыдущих статьях [2–4]. В целях сокращения текста она не приводится. Добавляются два новых существенных пункта. Во-первых, новую специфику в формулировку задачи вносит физика явления, моделирование которого производится в данной статье. А именно колебания газа коллективизированных электронов в металле под действием периодического поля световой волны являются чисто квантовым явлением и объясняются на основе квантово-механических теорий в физике конденсированного состояния вещества. Однако за более чем столетнюю историю изучения этого явления было замечено, что электронные состояния в металлах в области оптических частот хорошо описываются моделью газа свободных электронов (моделью Друде).

Наиболее просто эта модель может быть получена на основе второго закона Ньютона [8], но также является частным случаем и из других физических теорий. В частности, она следует из феноменологической теории Ландау [9], а также из микроскопических теорий [10], [11]. В соответствии с моделью Друде диэлектрическая функция плазмонного металла имеет вид:

$$\tilde{\epsilon}_r(\omega) = 1 - \omega_{pl}^2 [\omega(\omega + i\omega_{rel})]^{-1},$$

где  $\omega_{pl}$  – плазменная частота,  $\omega_{rel}$  – параметр релаксации. Эти параметры следует понимать как принципиальные материальные константы теории, значения которых добываются экспериментально. К настоящему моменту они известны для основных металлов, обладающих плазмopodobным поведением (Ag, Au, Cu). Во-вторых, различие в формулировке обусловлено тем, что сейчас мы решаем задачу многих тел. По этой причине мы воспользуемся формализмом линейных волновых теорий.

Пусть наша система состоит из  $N$  частиц (тел). С каждой частицей мы свяжем ее собственную локальную «волновую функцию» (ВФ) в виде мультипольного ряда или (что эквивалентно) ряда Аткинсона–Wilcox [2], [12]. Такой подход к решению вполне очевиден, он используется и в других численных методах электродинамики [13]. Параллельно на нем базируются и некоторые методы теории конденсированного состояния вещества. Отметим среди них метод ЛКАО [14],

применяемый в квантово-химических численных моделях для расчета электронных состояний молекул. (В физике кристаллов этот метод известен также как метод сильной связи [15].) В нем одночастичная ВФ электрона сложной многоатомной системы строится в виде линейной комбинации примитивных ВФ – атомных орбиталей.

Итак, будем считать вмещающую среду однородным изотропным диэлектриком, в котором находится источник, генерирующий первичное поле  $\vec{E}_0, \vec{H}_0$ . Далее это поле взаимодействует с системой тел, в результате чего во вмещающей среде индуцируется рассеянное поле  $\vec{E}^{sc} = \sum_{q=1}^N \vec{E}_q^{ex}$ ,  $\vec{H}^{sc} = \sum_{q=1}^N \vec{H}_q^{ex}$ , где под знаком суммы стоят одночастичные поля  $\vec{E}_q^{ex}$ ,  $\vec{H}_q^{ex}$  (одночастичные ВФ). Внутри частиц возникают в свою очередь внутренние поля  $\vec{E}_p^{in}, \vec{H}_p^{in}$ , которые принципиально «одночастичны». С учетом этих обозначений граничные условия на поверхностях частиц  $S_p$  можно записать как

$$\vec{n} \times (\vec{E}_0 + \vec{E}^{sc}) \Big|_{S_p} = \vec{n} \times \vec{E}_p^{in} \Big|_{S_p}, \quad \vec{n} \times (\vec{H}_0 + \vec{H}^{sc}) \Big|_{S_p} = \vec{n} \times \vec{H}_p^{in} \Big|_{S_p}, \quad (1)$$

где  $\vec{n}$  обозначает единичную нормаль к  $S_p$ , направленную из частицы во внешнюю среду. Для построения разрешающей системы уравнений мы так же, как и в [3], используем интегралы Стрэттона–Чу [12], описывающие внутренние поля в частицах. Возьмем произвольную частицу (с индексом  $p$ ) и запишем для нее интеграл внутреннего поля в ДСК:

$$\begin{aligned} & \int_{Q_p} \vec{H}_p^{in}(\vec{r}') \delta(R) dV = \\ & = \int_{S_p} \vec{\nabla} g_p \times (\vec{n} \times \vec{H}_p^{in}) dS + \frac{i}{k_p Z_p} \int_{S_p} g_p \tilde{\rho}_p (\vec{n} \times \vec{E}_p^{in}) dS, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $R \equiv |\vec{r} - \vec{r}'|$ ,  $g_p = \exp(ik_p R)/4\pi R$  – функция Грина однородного пространства,  $\delta(R)$  – дельта-функция Дирака,

$$\tilde{\rho}_p = -R^{-2} (1 - ik_p R - k_p^2 R^2) \tilde{U} - R^{-2} (-3 + 3ik_p R + k_p^2 R^2) \vec{e}_R \vec{e}_R,$$

где  $\tilde{U}$  – единичный тензор,  $R \equiv |\vec{r} - \vec{r}'|$ ,  $\vec{e}_R \equiv (\vec{r} - \vec{r}')/R$ ,  $\vec{e}_R \vec{e}_R$  – диадное произведение,  $\vec{r}$  – точка интегрирования,  $\vec{r}'$  – точка наблюдения поля,  $k_p$  – волновое число;  $Z_p$  – волновой импеданс. Подставим (1)

в (2) и поместим точку наблюдения  $\vec{r}'$  за пределы объема  $Q_p$ , занятого частицей, во внешнюю область. В этом случае благодаря свойствам дельта-функции объемный интеграл в левой части обратится в нуль. При представлении полей  $\vec{E}_q^{ex}$ ,  $\vec{H}_q^{ex}$  в виде рядов Аткинсона–Wilcox уравнение (2) приобретет вид интегрального:

$$\begin{aligned} \int_{S_p} \vec{\nabla} g_p \times \sum_{q=1}^N (\vec{n} \times \vec{H}_q^{ex}) dS + \frac{i}{k_p Z_p} \int_{S_p} g_p \tilde{\rho}_p \sum_{q=1}^N (\vec{n} \times \vec{E}_q^{ex}) dS = \\ = \int_{S_p} \vec{\nabla} g_p \times (\vec{n} \times \vec{H}_0) dS + \frac{i}{k_p Z_p} \int_{S_p} g_p \tilde{\rho}_p (\vec{n} \times \vec{E}_0) dS. \end{aligned} \quad (3)$$

При представлении  $\vec{E}_q^{ex}$ ,  $\vec{H}_q^{ex}$  мультипольными разложениями уравнение (3) становится бесконечным алгебраическим относительно коэффициентов этих разложений. Напомним, что два следующих векторных поля

$$\vec{E}_q^{ex}[u_q, v_q] = \vec{K}_2[v_q] + ikZ \vec{K}_1[u_q], \quad \vec{H}_q^{ex}[u, v] = \vec{K}_2[u_q] - ikZ^{-1} \vec{K}_1[v_q], \quad (4)$$

удовлетворяющих однородным уравнениям Гельмгольца, называются векторным мультипольным (МП) разложением ЭМ поля, если скалярные поля  $u_q$  и  $v_q$  выражены посредством рядов вида

$$\begin{Bmatrix} u_q(\vec{r}) \\ v_q(\vec{r}) \end{Bmatrix} = \sum_{nm} \begin{Bmatrix} u_{qnm} \\ v_{qnm} \end{Bmatrix} i^{n+1} h_n^{(1)}(kr_q) Y_{nm}(\theta_q, \phi_q), \quad (5)$$

где  $h_n^{(1)}$  – сферическая функция Ханкеля порядка  $n$ ,  $Y_{nm}(\theta_q, \phi_q) = \bar{P}_n^{|m|}(\cos \theta_q) e^{im\phi_q}$  – сферическая функция,  $\bar{P}_n^{|m|}(\cos \theta_q)$  – нормированный присоединенный полином Лежандра,  $\vec{K}_1[\cdot] \equiv \vec{\nabla} \times (\vec{r}_q \cdot)$  и  $\vec{K}_2[\cdot] \equiv \vec{\nabla} \times \vec{K}_1[\cdot]$  – дифференциальные операторы в локальной сферической системе координат. Суммирование в (5) выполняется по  $(n, m)$ , при этом  $n = 0, \dots, \infty$  и  $m = -n, \dots, n$ . Если выразить более точно, ряды (4) являются разложением внешних полей  $\vec{E}_q^{ex}$ ,  $\vec{H}_q^{ex}$ . Внутренние поля  $\vec{E}_p^{in}$ ,  $\vec{H}_p^{in}$  выражаются аналогичной зависимостью с той лишь разницей, что  $h_n^{(1)}(kr_q)$  меняется на  $j_n(k_p r_p)$ , т.е. сферическую функцию Бесселя,

а материальные константы без индексов, относящиеся к внешней среде, – на соответствующие константы среды, заполняющей частицы. (Индексы  $p$  и  $q$  в обозначениях расстояний и углов показывают их принадлежность к локальным системам координат, связанным с частицами, изображенными на рис. 1).

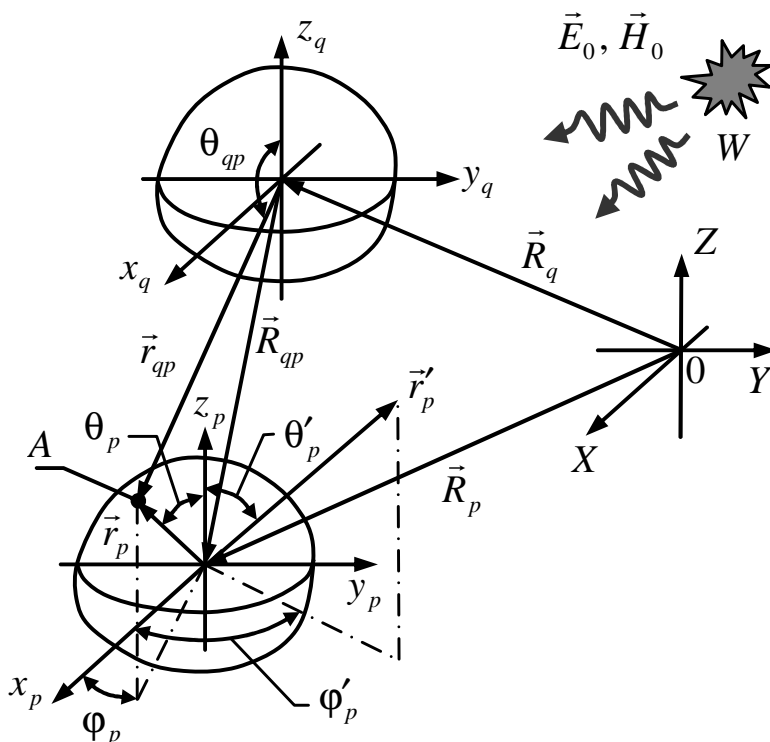


Рис. 1. Геометрия задачи

Поскольку положение точки  $\vec{r}'$  в уравнении (3) может быть выбрано произвольным (с сохранением требования:  $\vec{r}' \notin Q_p$  и  $\vec{r}' \notin S_p$ ), то, размещая  $\vec{r}'$  в различных точках на некоторой вспомогательной (виртуальной) поверхности, описанной вокруг  $p$ -й частицы, мы наберем систему линейно-независимых алгебраических уравнений относительно МП коэффициентов. Линейная независимость относительно коэффициентов  $u_{qnm}$  и  $v_{qnm}$  следует из того, что координаты точки  $\vec{r}'$  входят в уравнение (3) нелинейно. Все остальное, что можно сказать по поводу уравнения (3), вполне аналогично тому, что обсуждалось в [3]. Таким образом, уравнения (3), собранные вме-

сте, образуют переопределенную алгебраическую систему вида  $\tilde{M} \vec{W} = \vec{V}$  или более подробно:

$$\begin{bmatrix} \tilde{M}_{11} & \dots & \tilde{M}_{1q} & \dots & \tilde{M}_{1N} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \tilde{M}_{p1} & \dots & \tilde{M}_{pq} & \dots & \tilde{M}_{pN} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \tilde{M}_{N1} & \dots & \tilde{M}_{Nq} & \dots & \tilde{M}_{NN} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \vec{w}_1 \\ \vdots \\ \vec{w}_q \\ \vdots \\ \vec{w}_N \end{Bmatrix} = - \begin{Bmatrix} \vec{V}_1 \\ \vdots \\ \vec{V}_p \\ \vdots \\ \vec{V}_N \end{Bmatrix}, \quad (6)$$

где все элементарные матрицы  $\tilde{M}_{pq}$  имеют большее число строк, чем столбцов. В основе численного метода решения системы (6) лежит процедура минимизации квадратичной невязки:

$$\delta(\vec{W}) = \left\| \vec{V} - \tilde{M} \vec{W} \right\|_{C^d}^2 = \vec{V}^T \vec{V} - 2 \vec{V}^T \tilde{M} \vec{W} + \vec{W}^T \tilde{M}^T \tilde{M} \vec{W}, \quad (7)$$

где  $T$  обозначает транспонирование вместе с комплексным сопряжением,  $\|*\|_{C^d}$  – норму комплексного арифметического векторного евклидова пространства,  $d$  – размерность вектора  $\vec{V}$ . Условие минимума ( $\partial\delta/\partial\vec{W} = 0$ ) ведет к нормальной системе:

$$\tilde{M}^T \tilde{M} \vec{W} = \tilde{M}^T \vec{V}, \quad (8)$$

которая может быть решена любым численным методом. Решение нормальной системы доставляет минимум невязке (7):

$$\delta_{\min} = \vec{V}^T \vec{V} - \vec{V}^T \tilde{M} \vec{W} = \vec{V}^T \vec{V} - \vec{W}^T \tilde{M}^T \tilde{M} \vec{W}. \quad (9)$$

За счет увеличения порядка конечной суммы МП ряда величина  $\delta_{\min}$  может быть минимизирована до сколь угодно малого (заданного наперед) уровня. Доказательство этого утверждения приводится в [3]. Для этого требуется некоторое преобразование базисных функций и коэффициентов МП ряда. Техника этого преобразования универсальна и не изменяется при переходе от одночастичной задачи к задаче многих тел. При разработке алгоритма решения системы (6) заслуживает внимания лишь одна техническая деталь. Дело в том, что МП ряды (4), (5) записаны в локальных сферических системах координат, ассоциированных с частицами (см. рис. 1). Таким образом, при связывании их посредством уравнения (3) требуется процедура преобразования компонент векторных мультиполей в единую (декартову) систему координат.

Технически это делается путем умножения векторов одночастичных полей  $\vec{E}_q^{ex}$ ,  $\vec{H}_q^{ex}$  на некоторые матрицы преобразования. Технику таких вычислений мы здесь опускаем, так как она хорошо известна в векторном (тензорном) анализе и может быть легко найдена в соответствующей литературе (см., например, [16]).

**Учет трансляционной симметрии.** Сейчас рассмотрим систему тождественных частиц (имеющих одинаковую форму и материальные свойства). Далее организуем процедуру их попарного сравнения по всему ансамблю частиц. Появление, как минимум, двух пар, удовлетворяющих условию  $\vec{R}_{ij} = \vec{R}_{pq}$ , означает появление трансляционной симметрии. Это, в свою очередь, означает тождественность матриц  $\vec{M}_{ij}$  и  $\vec{M}_{pq}$ . Эта особенность является исключительно важной с вычислительной точки зрения, так как регулярные ансамбли большого числа частиц (например, идеальные цепочки) могут иметь большое число совпадений вида  $\vec{R}_{ij} = \vec{R}_{pq} = \vec{R}_{li} = \dots = \vec{R}_{jk}$ . Таким образом, в алгоритме решения требуется вычислять лишь неповторяющиеся блоки и располагать их в глобальной матрице СЛАУ (6) на соответствующих позициях. Эффективность учета трансляционной симметрии мы продемонстрируем на примере прямой регулярной цепочки, состоящей из  $N$  частиц. При разупорядочении цепочки количество различных элементарных матриц, которые необходимо сформировать, очевидно, будет равно квадрату  $N$ . Непосредственным подсчетом легко установить, что в регулярном случае число различных матриц в системе (6) составляет всего  $2N - 1$  штук. Благодаря этому мы можем говорить о линейном алгоритмическом масштабировании (скейлинге) вместо квадратичного. Конкретная практика вычислений подтвердила высокую эффективность учета трансляционной симметрии. Однако в случае больших систем уравнений мы получаем ощутимый выигрыш только на этапе формирования СЛАУ. Строго говоря, нам еще требуется эффективный метод решения алгебраической системы. Его разработке посвящен следующий раздел.

**Итерационный метод решения переопределенных СЛАУ.** С вычислительной точки зрения у переопределенных систем есть один существенный недостаток. Для решения переопределенной СЛАУ прямым методом ее необходимо предварительно привести к нормальному виду (8). Это достаточно затратная по времени проце-



дура, требующая порядка  $\sim t^2 N$  операций умножения только для вычисления матрицы  $\tilde{M}^T \tilde{M}$  (где  $N$  – число строк, а  $t$  – число столбцов исходной матрицы  $\tilde{M}$ ). Разумеется, после этого прямой метод решения нормальной системы (например, метод Гаусса) добавляет еще  $\sim t^3$  операций. Процедура умножения  $\tilde{M}^T$  на  $\tilde{M}$  происходит достаточно быстро, если  $t \ll N$ , но для матриц, близких к квадратным, алгоритм оказывается слишком медленным. Было бы желательно найти какой-нибудь итерационный подход, в котором было бы не очень много операций умножения в пересчете на одну итерацию. Предлагается следующий. Возьмем квадратичную невязку  $\delta(\vec{W})$  и дадим приращение ее аргументу:

$$\begin{aligned} \delta(\vec{W} + d\vec{W}) &= \|(\vec{V} - \tilde{M} \vec{W}) - \tilde{M} d\vec{W}\|_{C^d}^2 = \\ &= \delta(\vec{W}) - 2 d\vec{W}^T \tilde{M}^T (\vec{V} - \tilde{M} \vec{W}) + d\vec{W}^T \tilde{M}^T \tilde{M} d\vec{W}. \end{aligned}$$

(Эту функцию можно понимать как точное разложение  $\delta(\vec{W})$  в степенной ряд.) Отрицательность конечной разности  $\delta(\vec{W} + d\vec{W}) - \delta(\vec{W})$  при заданном  $d\vec{W}$  гарантирует движение в сторону минимума  $\delta(\vec{W})$ . Таким образом, реализуется итерационная схема вида  $\vec{W}_{i+1} = \vec{W}_i + d\vec{W}_i$ , где  $i$  – итерационный шаг алгоритма. Неположительность конечной разности требует на каждом шаге выполнения условия:

$$- 2 d\vec{W}^T \tilde{M}^T (\vec{V} - \tilde{M} \vec{W}) + d\vec{W}^T \tilde{M}^T \tilde{M} d\vec{W} \leq 0. \quad (10)$$

Пусть  $d\vec{W} = 2 \tilde{M}^T (\vec{V} - \tilde{M} \vec{W}) / C$ , где  $C \geq 0$  – некоторая константа, подлежащая определению. (Очевидно, что при такой записи вектор  $d\vec{W}$  представляет собой нормированный на  $C$  вектор антиградиента.) С учетом принятых обозначений неравенство (10) принимает вид:  $- C \|d\vec{W}\|^2 + \|\tilde{M} d\vec{W}\|^2 \leq 0$ , откуда мы получаем условие:  $C \geq \|\tilde{M} d\vec{W}\|^2 \|d\vec{W}\|^{-2}$ . (Размерность пространства в обозначении нормы опускаем.) Применяя неравенство Коши–Буняковского  $\|\tilde{M} d\vec{W}\|^2 \leq \|\tilde{M}\|^2 \|d\vec{W}\|^2$  и решая совместно два последних неравенства, получаем:  $C \geq \|\tilde{M}\|^2$ . Данное неравенство следует понимать как условие сходимости метода. Итерационная процедура нахождения

минимума невязки  $\delta(\vec{W})$  на первом шаге работы алгоритма может быть организована как

$$\vec{W}_2 = \vec{W}_1 + d\vec{W}_1 = \vec{W}_1 + 2 \tilde{M}^T (\vec{V} - \tilde{M} \vec{W}_1) \alpha^{-1} \|\tilde{M}\|^{-2},$$

где  $\alpha \geq 1$ , а  $\vec{W}_1$  – начальное приближение. На последующих шагах модифицируем ее как

$$\vec{W}_{i+1} = \vec{W}_i + d\vec{W}_i = \vec{W}_i + 2 \tilde{M}^T (\vec{V} - \tilde{M} \vec{W}_i) \alpha^{-1} \|d\vec{W}_{i-1}\|^2 \|\tilde{M} d\vec{W}_{i-1}\|^{-2}.$$

Критерием останова алгоритма является минимизация  $\delta(\vec{W})$  (а также  $d\vec{W}$ ) ниже некоторого наперед заданного уровня. Практика использования данного алгоритма показала необходимость формулировки метода генерации подходящего начального приближения. В противном случае количество итераций оказывается достаточно большим. Ясно, что для произвольного случая создать такой метод не представляется возможным. Однако для волноводных задач с цепочками частиц, облучаемых компактными источниками, оказалось возможным создать достаточно простой и эффективный подход. Предлагается следующий эвристический итерационный метод. (Принципиальный момент состоит в том, что его сходимость не может быть доказана в общем случае.) Идея метода базируется на физических соображениях. Для определенности рассмотрим задачу о возбуждении продольного плазмон-поляритона вдоль однорядной цепочки частиц компактным источником, находящимся в окрестности одной из частиц подобно тому, как это показано на рис. 2.

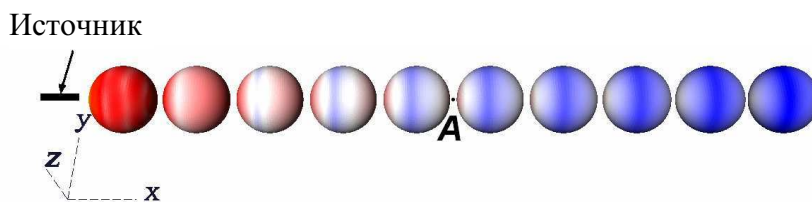


Рис. 2. Продольная плазмонная мода

Пронумеруем частицы по мере их удаления от источника. Поскольку мы имеем дело с «неизлучающими» возбуждениями, то в основном существенному взаимодействию между собой подвержены лишь ближайшие соседние частицы цепочки. Причем первая частица находится в окрестности источника, и, соответственно, поле в ней обусловлено ближнезонными эффектами источника и в меньшей сте-

пени взаимодействием с соседней частицей. Матрица первой частицы  $\tilde{M}_{11}$  занимает левый верхний угол глобальной матрицы  $\tilde{M}$ . Алгоритм строится так. На первом шаге решаем систему:  $\tilde{M}_{11} \vec{w}_1 = \vec{V}_1$ . Вторая частица взаимодействует с полем источника и с первой частицей, поле которой теперь уже найдено, третья частица взаимодействует с частицами 2 и 1 и т.д. В результате строится следующий алгоритм последовательного нахождения одночастичных векторов-решений:  $\tilde{M}_{22} \vec{w}_2 = \vec{V}_2 - \tilde{M}_{21} \vec{w}_1$ ,

$$\tilde{M}_{33} \vec{w}_3 = \vec{V}_3 - \tilde{M}_{31} \vec{w}_1 - \tilde{M}_{32} \vec{w}_2,$$

$$\tilde{M}_{ii} \vec{w}_i = \vec{V}_i - \sum_{j=1}^{i-1} \tilde{M}_{ij} \vec{w}_j.$$

После того как все элементарные векторы  $\vec{w}_i$  определены, строится следующий итерационный процесс:

$$\tilde{M}_{ii} \vec{w}_i = \vec{V}_i - \sum_{j \neq i}^N \tilde{M}_{ij} \vec{w}_j.$$

Критерием его остановки вновь является минимизация  $\delta(\vec{W})$  (а также  $d\vec{W}$ ) вплоть до минимально достижимого уровня. Далее включается алгоритм градиентного поиска минимума невязки  $\delta(\vec{W})$ , описанный выше.

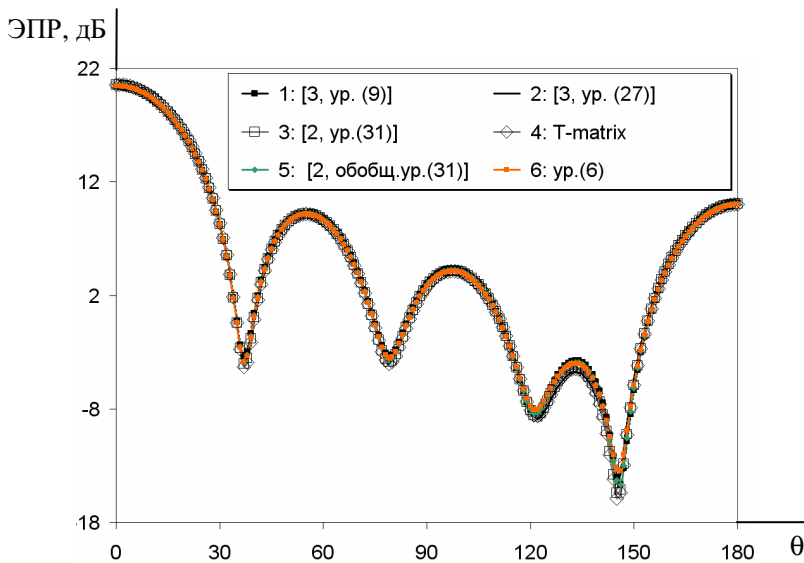


Рис. 3. Диаграмма ЭПР

**Численные результаты.** Эту секцию мы начнем с решения одной тестовой задачи в обеспечение верификации нашего метода и алгоритмов. Рассмотрим диэлектрический куб с параметрами  $b = 1,0$  м (длина ребра),  $\epsilon_{r2} = 3,0$ ,  $\mu_{r2} = 1,0$ ,  $\sigma_2 = 0$  см/м, облучаемый плоской волной частотой 299,792 МГц. Волна предполагается падающей нормально из вакуума на одну из граней куба. На рис. 3 показана диаграмма эффективной поверхности рассеяния (ЭПР), полученная несколькими альтернативными численными методами.

Кривые 1 и 2 получены с помощью систем уравнения (9) и (27) из статьи [3], кривая 3 – с помощью уравнения (31) из [2], кривая 4 – с помощью стандартного метода Т-матриц [17]. Далее мы соберем этот же куб из восьми кубов меньшего размера ( $b = 0,5$  м) и решим для такой сборки задачу многих тел. На рис. 3 кривая 5 получена с помощью уравнения (31) из работы [2], обобщенного на случай системы многих тел, а кривая 6 – с помощью системы (6) данной статьи. Видно, что между всеми кривыми нет визуальных различий. Сейчас рассмотрим задачу о распространении продольной волны плазменных колебаний вдоль однорядной цепочки, состоящей из десяти сферических малых частиц ( $D = 50$  нм), показанной на рис. 2. Расстояния между центрами частиц  $L = 55$  нм. Такая волна может быть создана источником, генерирующим электрическое поле, направленное по оси  $X$ . В качестве источника возьмем отрезок тока, расположенный рядом с поверхностью крайней левой частицы. На рис. 2 показано поверхностное распределение напряженности электрического поля  $\lg |\vec{E}^{sc}|$ .

На рис. 4 показано распределение напряженности в центрах частиц и зазорах между ними. С помощью аналитического интегрирования системы (31) из [2] можно показать, что для малых частиц коэффициенты внутреннего МП разложения есть  $a_{nm} \sim r^{-n+1}$ ,  $b_{nm} \sim r^{-n+1}$  ( $r$  – радиус частицы), и при этом они нелинейно зависят от  $\omega$ ,  $\omega_{pl}$ ,  $\omega_{rel}$ . Таким образом, резонансному усилению у нас подвергается почти полная группа мультиполей ( $n \geq 2$ ) и при этом неоднородно.

Эта особенность объясняет сложный характер резонансного поведения наночастиц (плазмонный резонанс), известный по многочис-

ленным исследованиям (см., например, [13]). Явление сильной концентрации мы наблюдаем и в нашем примере. Быстрый спад напряженности, как видно из рисунков, является следствием омических потерь, так как поле «переконцентрировано» в частицах вследствие плазмонного резонанса и межчастичных взаимодействий, а релаксационный параметр  $\omega_{rel}$  не является достаточно малым. Параметры модели Друде соответствуют серебру и обобщены по результатам анализа множества литературных источников, в том числе тех, что указаны в списке литературы в конце статьи. В расчетах использовались следующие значения:  $\omega_{pl} = 2,5 \cdot 10^{15}$  Гц,  $\omega_{rel} = 2,0 \cdot 10^{13}$  Гц,  $\omega = 4,5 \cdot 10^{14}$  Гц.

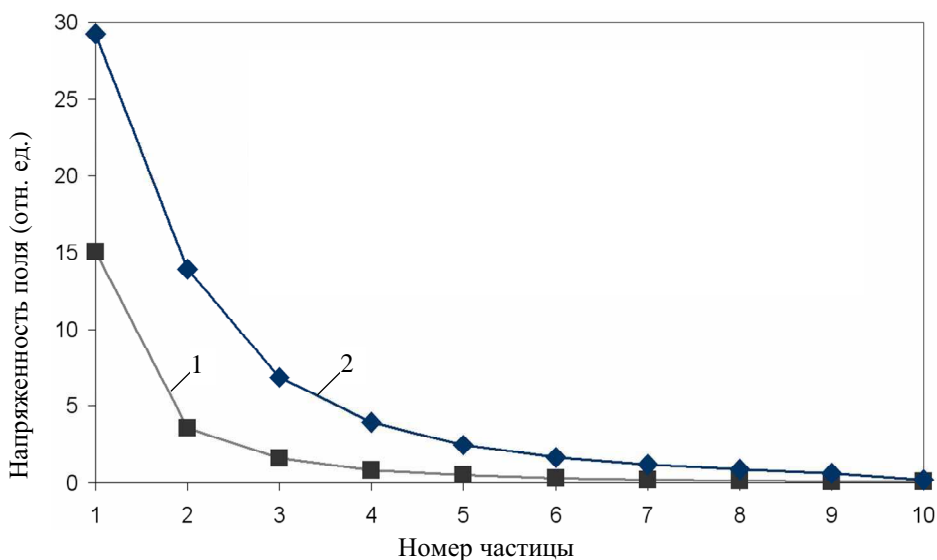


Рис. 4. Электрическое поле в волноводе: 1 – напряженность электрического поля в центрах частиц для волноводной моды, изображенной на рис. 2; 2 – напряженность электрического поля в зазорах между частицами \*10E-01 для волноводной моды, изображенной на рис. 2

В таблице приводятся результаты исследования сходимости метода. В первой колонке помещены значения старшей степени волновой гармоники в МП разложении, во второй – нормированной невязки (9), в третьей – полной «дальнезонной» излученной мощности, в четвертой – напряженности электрического поля в точке А (см. рис. 2), т.е. в зазоре между частицами.

### Результаты исследования сходимости метода

$N_{multip}$	$\delta_{min} \cdot \ V\ ^{-2}$	$P_{scat}$ , отн. ед.	$E_A$ , отн. ед.
7	5.3E-8	1795.3	2443.6
8	8.0E-9	1787.2	2437.5
9	9.0E-9	1789.8	2465.3
10	9.0E-9	1788.0	2461.2

### Библиографический список

1. Борен К., Хафмен Д. Поглощение и рассеяние света малыми частицами. – М.: Мир, 1986.
2. Serebrennikov A.M. An analysis of scattering caused by dielectric bodies using semi-analytic methods // IEEE Trans. Antennas Propagat. – 2008. – Vol. 56. – P. 3201–3209.
3. Serebrennikov A.M. A novel semi-analytic method for the analysis of scattering by dielectric objects immersed in uniform media // Comp. Phys. Comm. – 2010. – Vol. 181. – P. 1087–1095.
4. Серебренников А.М. К обоснованию сходимости одного мультипольного метода для решения векторных задач рассеяния. Системы мониторинга и управления: сб. науч. тр. – Пермь: Изд-во Перм. гос. тех. ун-та, 2010. – С. 203–207.
5. Park S.Y., Stroud D. Surface-plasmon dispersion relations in chains of metallic nanoparticles: An exact quasistatic calculation // Phys. Rev. B. – 2004. – Vol. 69.
6. Weber W.H., Ford G.W. Propagation of optical excitations by dipolar interactions in metal nanoparticle chains // Phys. Rev. B. – 2004. – Vol. 70.
7. Govyadinov A.A., Markel V.A. From slow to superluminal propagation: Dispersive properties of surface plasmon polaritons in linear chains of metallic nanospheroids // Phys. Rev. B. – 2008. – Vol. 78.
8. Слэтер Дж. Диэлектрики, полупроводники, металлы. – М.: Мир, 1969.
9. Бредов М.М., Румянцев В.В., Топтыгин И.Н. Классическая электродинамика. – СПб.: Лань, 2003.

10. Шриффер Дж. Теория сверхпроводимости. – М.: Наука, 1970.
11. Маделунг О. Теория твердого тела. – М.: Наука, 1980.
12. Колтон Д., Кресс Р. Методы интегральных уравнений в теории рассеяния. – М.: Мир, 1987.
13. Stout B., Auger J.C., Devilez A. Recursive T matrix algorithm for resonant multiple scattering: applications to localized plasmon excitations // JOSA A. – 2008. – Vol. 25. – P. 2549–2557.
14. Дьячков П.Н. Углеродные нанотрубки: строение, свойства, применение. – М.: БИНОМ: Лаборатория знаний, 2006.
15. Ziman J.M. Principles of the Theory of Solids. – London: Cambridge University Press, 1979.
16. Победря Б.Е. Лекции по тензорному анализу. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1986.
17. Wriedt T. Using the T-Matrix method for light scattering computations by non-axisymmetric particles: Superellipsoids and realistically shaped particles. Part // Part. Syst. Charact. – 2002. – Vol. 19. – P. 256–268.

Получено 09.09.2011