

УДК 004.02

**М. С. Денисюк**

Інститут проблем реєстрації інформації НАН України  
вул. М. Шпака, 2, 03113 Україна, Київ

## **Метод моделювання поверхневих плазмонних хвиль на тривимірних поверхнях довільної форми**

*Запропоновано модифікацію FDTD-методу для тривимірної області, яка дозволяє збільшити точність розрахунку векторів електричного та магнітного полів на границях розділу середовищ. Ця модифікація дозволяє моделювати процеси збудження та розповсюдження поверхневих плазмонних хвиль на поверхні металевих конструкцій довільної форми.*

**Ключові слова:** метод кінцевих різниць, метод кінцевих різниць в часовій області, FDTD, чисельне моделювання, плазмон, плазмон-поляритон, комп'ютерна електродинаміка.

### **Вступ**

На сьогоднішній день активно ведуться роботи по створенню пристроїв, які використовують поверхневі плазмон-поляритонні хвилі на поверхні металу для переносу інформації, вимірювання та локальної взаємодії із речовиною. Особливістю цих поверхневих хвиль є значно менша (кілька десятків разів) довжина хвилі порівняно із просторовими оптичними хвилями, які використовуються для їхнього збудження. Використання таких хвиль дозволить зменшити ширину провідників у чіпах мікросхем на два порядки, збільшити роздільну здатність оптичної мікроскопії до декількох нанометрів і збільшити поверхневу щільність запису в оптичних системах запису інформації до 1 Тбіт·см<sup>-2</sup>.

Створення таких пристроїв потребує методів чисельної електродинаміки, які враховують метал як дисперсійне середовище із втратами та якісно моделюють поверхні (межі розділу середовищ) довільної форми. Використання цих методів дозволить оцінювати конструкції пристроїв і визначати їхні оптимальні параметри та режими роботи до їхнього виготовлення.

Найбільш універсальним методом чисельної електродинаміки є метод кінцевих різниць у часовій області (англ. — Finite-Difference Time-Domain Method або FDTD) [1]. Він полягає у розбитті моделі просторовою сіткою, у вузлах якої проводиться розрахунок системи дискретних рівнянь Максвелла для кожної компонен-

© М. С. Денисюк

ти електричного та магнітного полів на кожному кроці за часом. Цей метод дозволяє легко враховувати додаткові диференційні співвідношення для нелінійних середовищ. Збіжність та ізотропність методу досягається при використанні комірки Yee [2] (рис. 1) в якості елементарної комірки сітки розбиття. Комірка Yee являє собою елементарний об'єм, обмежений елементарними контурами інтегрування для знаходження циркуляції електричного (у випадку електричної підґратки) або магнітного (у випадку магнітної підґратки) поля.

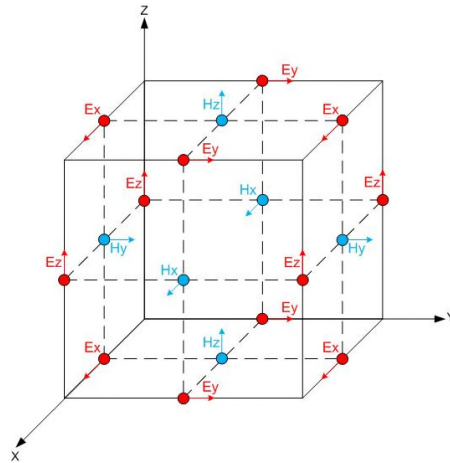


Рис. 1. Комірка Yee

Електрична та магнітна підґратки зміщені одна відносно одної на вектор  $\{\frac{\Delta x}{2}, \frac{\Delta y}{2}, \frac{\Delta z}{2}\}$  (рис. 2). На цьому рисунку проілюстровано взаємне розташування електричної та магнітної підґраток, де виділено контури для визначення циркуляції електричного поля в напрямку осі  $z$  та циркуляції магнітного поля в напрямку осі  $x$ .

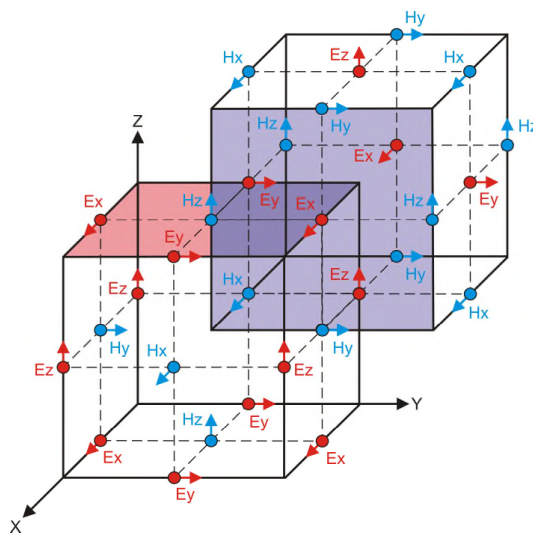


Рис. 2. Зчеплення електричної та магнітної комірок Yee

Особливість підходу Yee полягає у просторовому рознесенні точок, в яких розраховуються різні компоненти векторних полів. Це означає, що кожна із компонент електричного та магнітного полів має власну сітку розбиття, просторово зміщену відносно інших на величину, вдвічі меншу за крок дискретизації. Таке рознесення призводить до того, що для визначення повного вектора електричного чи магнітного поля в певному вузлі сітки розбиття необхідно використовувати компоненти, які визначені в різних просторових точках. На цю особливість можна не зважати, коли розрахунок проводиться для однорідного середовища. Однак, при моделюванні неоднорідних середовищ чи границь розділу середовищ визначення повних векторів електричного та магнітного полів відбувається із додатковою похибкою через те, що різні компоненти одного вектора визначаються в різних середовищах.

### Елементарна комірка для моделювання границь розділу середовищ

При моделюванні границь розділу середовищ, а особливо поверхневих явищ на цих границях, як то поверхневих плазмонних коливань, визначення повних векторів електричного та магнітного полів із найменшою похибкою є однією із головних проблем. Як зазначено вище, комірка Yee має вади, що призводять до додаткових спотворень повних векторів електричного та магнітного полів на границі розділу середовищ. Тому в даній роботі пропонується використовувати іншу будову сітки розбиття та елементарної комірки, які дозволяють моделювати вектори напруженості електричного та магнітного полів без спотворень. Для визначення повних векторів у вузлі сітки необхідно просторово сумістити центри елементарних контурів для визначення циркуляції поля за всіма трьома напрямками, як проілюстровано на рис. 3,а.

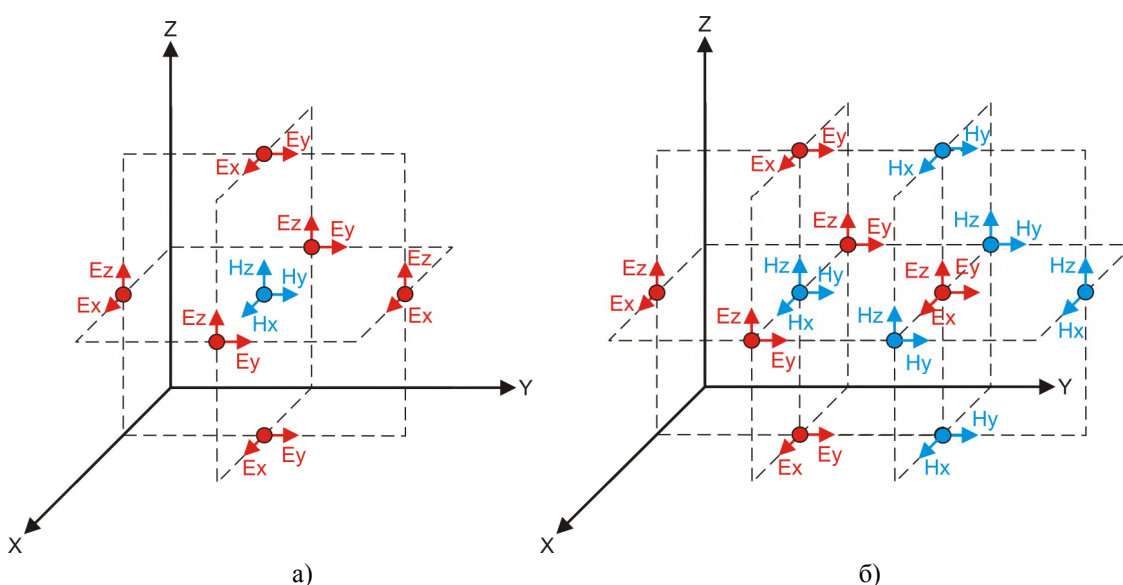


Рис. 3. Взаємне розташування підградек різних компонент електричного і магнітного полів на прикладі елементарних комірок електричної (а) та електричної і магнітної (б) підградек

Запропонована конструкція сітки розбиття моделі дещо ускладнює індексування вузлів електричної та магнітної підграток. Однак, ця задача вирішується, наприклад, використанням одного тривимірного масиву в оперативній пам'яті для зберігання компонент і електричного, і магнітного полів (рис. 4).

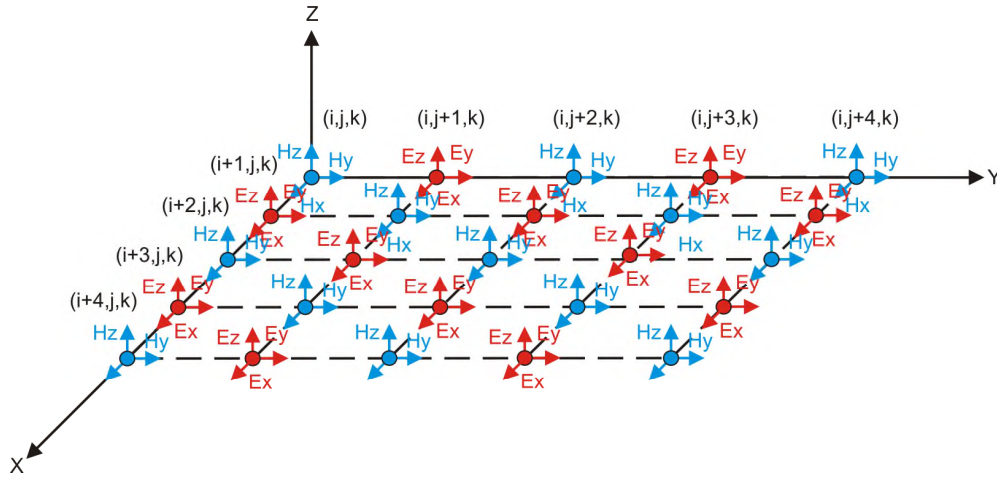


Рис. 4. Двовимірний зріз сітки розбиття моделі та приклад індексації вузлів

Тоді, наприклад, закон Ампера в дискретній формі для компоненти  $E_x$  можна записати наступним чином:

$$E_z|_{i,j,k}^{n+1} = \left( \frac{1 - \frac{\sigma\Delta t}{2\varepsilon}}{1 + \frac{\sigma\Delta t}{2\varepsilon}} \right) \cdot E_z|_{i,j,k}^n + \left( \frac{\frac{\Delta t}{\varepsilon}}{1 + \frac{\sigma\Delta t}{2\varepsilon}} \right) \cdot \times \left[ \frac{H_y|_{i+1,j,k}^n - H_y|_{i-1,j,k}^n}{\Delta x} - \frac{H_x|_{i,j+1,k}^n - H_x|_{i,j-1,k}^n}{\Delta y} \right]. \quad (1)$$

### Моделювання 3D-поверхонь довільного нахилу

Спочатку розглянемо випадок, коли елементарна комірка перетинається плоскою границею двох середовищ із довільним нахилом (рис. 5). Така границя має один вектор нормалі  $\vec{n}$  по всій поверхні.

У даному випадку необхідно врахувати граничні умови та те, що комірка заповнена лише частково. Подібна задача вже розглядалася в роботах [3–5]. Однак ці роботи обмежилися двовимірним випадком при використанні комірки Yee в основі сітки розбиття. В даному розділі пропонується використати підхід, запропонований в [3], та розширити його на тривимірний випадок. Для переходу до тривимірного випадку пропонується використовувати коефіцієнти заповнення комірки різними матеріалами моделі, які визначаються як відношення об'єму перетину комірки із деталями моделі до об'єму комірки.

Вибраний підхід оснований на використанні ефективної діелектричної проникності. Ця проникність складається із двох компонент, що виражають граничні умови для паралельної та перпендикулярної до границі розділу компонент електричного поля. Граничні умови для магнітного поля в FDTD-методі враховуються автоматично.

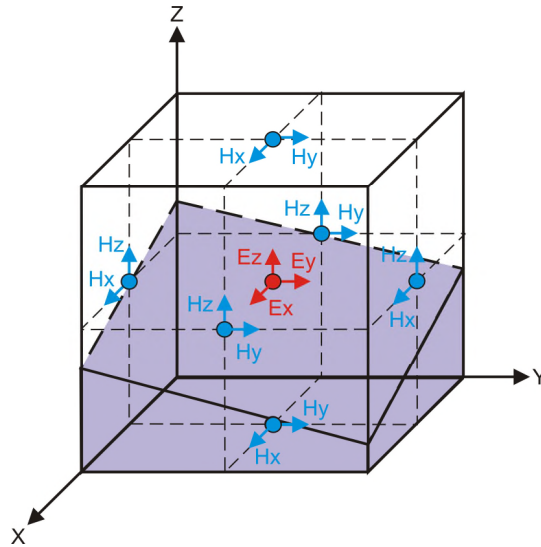


Рис. 5. Ілюстрація випадку, коли об'єм елементарної комірки перетинається плоскою межею розділу двох середовищ із довільним нахилом

Ефективна діелектрична проникність визначається наступним чином:

$$\varepsilon_{eff} = \varepsilon_{\parallel} (1 - n^2) + \varepsilon_{\perp} n^2, \quad (2)$$

де  $n$  — проекція одиничного вектора нормалі до границі розділу на вектор електричного поля  $\vec{E}$ . В наступному виразі  $\varepsilon_{\parallel}$  та  $\varepsilon_{\perp}$  означають ефективні діелектричні проникності для паралельної та перпендикулярної компонент електричного поля. Компонента  $\varepsilon_{\parallel}$  враховує граничну умову  $E_{\parallel 1} = E_{\parallel 2}$  та часткове заповнення комірки:

$$\varepsilon_{\parallel} = \varepsilon_1 \frac{V_1}{\Delta V} + \varepsilon_2 \frac{V_2}{\Delta V}, \quad (3)$$

де  $V_1$  та  $V_2$  — об'єми перетину комірки із деталями моделі;  $\Delta V$  — об'єм комірки.

Компонента  $\varepsilon_{\perp}$  враховує граничну умову  $D_{\perp 1} = D_{\perp 2}$  та часткове заповнення комірки:

$$\varepsilon_{\perp} = \left[ \frac{(V_1/\Delta V)}{\varepsilon_1} + \frac{(V_2/\Delta V)}{\varepsilon_2} \right]^{-1}. \quad (4)$$

У випадку, коли один із матеріалів метал, вводиться відповідна діелектрична проникність металу  $\varepsilon_m$ , яка визначається за моделлю Дебая, Друде чи Лоренца. При цьому вводиться додаткове диференційне рівняння.

### Моделювання 3D-поверхонь довільної форми

У випадку, коли границя розділу середовищ має довільну форму (рис. 6), вектор нормалі в різних точках поверхні може мати різний напрямок. У цьому випадку пропонується визначити середній вектор нормалі для ділянки границі розділу, яка знаходиться всередині комірки.

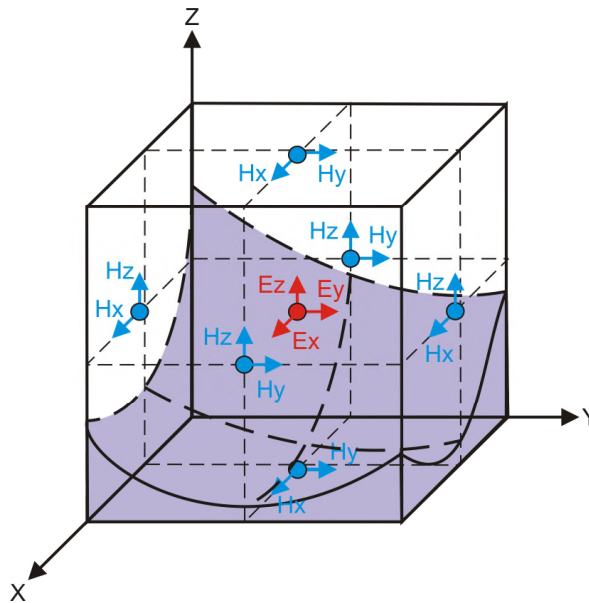


Рис. 6. Ілюстрація випадку, коли об'єм елементарної комірки перетинається межею розділу двох середовищ довільної форми

Якщо деталі моделі представлені у вигляді замкнених поверхонь, заданих набором трикутників, якість поверхні можна змінювати, варіюючи кількістю і, відповідно, розмірами цих трикутників. У такому випадку поставлена задача вирішується наступним чином. Визначається набір трикутників, які потрапляють в дану комірку та визначаються їхні вектори нормалі  $(\vec{n}_0, \vec{n}_1, \vec{n}_2, \dots, \vec{n}_m)$  та площі  $(s_0, s_1, s_2, \dots, s_m)$ . Далі, визначається усереднений вектор нормалі:

$$\vec{n} = \frac{s_0 \vec{n}_0 + s_1 \vec{n}_1 + s_2 \vec{n}_2 + \dots + s_m \vec{n}_m}{(s_0 + s_1 + s_2 + \dots + s_m)m}. \quad (5)$$

Визначивши середній вектор нормалі, необхідно застосувати підхід, описаний у попередньому розділі.

## Моделювання 3D-границь розділу більше двох середовищ довільної форми

При моделюванні складних об'єктів виникає ситуація, коли елементарна комірка перетинається декількома деталями моделі. В цьому випадку в комірці присутні декілька ділянок різних границь розділу двох середовищ (рис. 7).

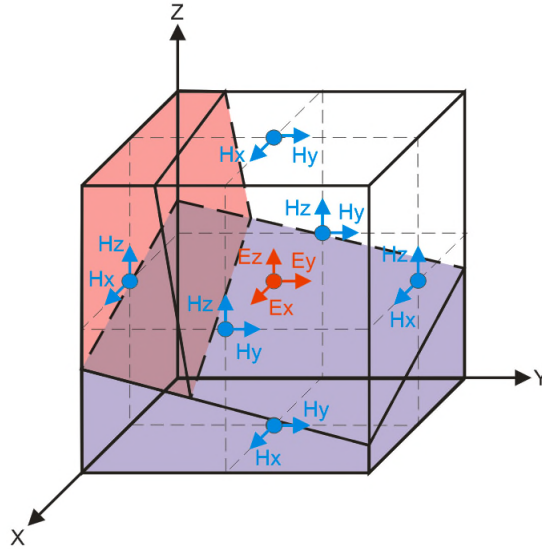


Рис. 7. Ілюстрація випадку, коли об'єм елементарної комірки перетинається декількома деталями, тобто декількома границями розділу двох середовищ

Дана задача вирішується розглядом кожної границі розділу двох середовищ окремо. З набору трикутників, які обмежують деталі моделі і які потрапили в середину даної комірки, виділяються набори трикутників, які розмежовують дві певні деталі. Потім для кожного такого набору визначається площа  $S_i$ , усереднений вектор нормалі, діелектричні проникності  $\varepsilon_{\parallel i}$  і  $\varepsilon_{\perp i}$  та  $\varepsilon_{eff i}$ . Діелектричні проникності  $\varepsilon_{\parallel i}$  і  $\varepsilon_{\perp i}$  для конкретної пари деталей визначаються за формулами (3) і (4), при цьому замість  $\Delta V$  підставляється сумарний об'єм перетину цих деталей із коміркою ( $V_1 + V_2$ ). Отриманий таким чином набір значень ефективної діелектричної проникності використовується для визначення ефективної проникності для даної комірки:

$$\varepsilon_{eff} = \frac{S_1 \varepsilon_{eff1} + S_2 \varepsilon_{eff2} + \dots + S_L \varepsilon_{effL}}{S_1 + S_2 + \dots + S_L}. \quad (6)$$

## Висновки

Запропонований метод моделювання криволінійних поверхонь розділу середовищ дозволяє моделювати поверхневі електромагнітні та плазмонні коливання без додаткових утрат точності. Цей метод полягає у заміні в FDTD-методі комірки

Үєє запропоновану в даній роботі та введені в систему рівнянь Максвелла ефективної діелектричної проникності. В роботі описано метод розрахунку ефективної діелектричної проникності для особливих випадків, які виникають при моделюванні складних тривимірних моделей. Недоліками методу є часткове перекриття контурів інтегрування, що призводить до збільшення часу розрахунку. Даний метод реалізується у вигляді алгоритму, який виконується до початку розрахунку за FDTD-методом. Результатом роботи алгоритму є масив значень ефективної діелектричної проникності. Окрім того, в алгоритмі, що реалізує FDTD-метод, необхідно реалізувати індексацію масивів компонент напруженості полів запропонованим в роботі методом.

1. *Taflove A.* Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method / A. Taflove, S.C. Hagness // Norwood: Artech House, 2005. — 3rd ed. — 1038 p.
2. *Yee K.S.* Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwell's Equations in Isotropic Media / K.S. Yee / IEEE Trans. Antennas and Propagation. — 1966. — Vol. 14. — P. 302–307.
3. *Mohammadi Ahmad.* Contour-Path Effective Permittivities for the Two-Dimensional Finite-Difference Time-Domain Method / A. Mohammadi, H. Nadgaran, M. Agio // Optics express, 2005. — Vol. 13, N 25. — P.10367-10381.
4. *Jalali T.* Efficient Effective Permittivity Treatment for the 2D-FDTD Simulation of Photonic Crystals / T. Jalali, K. Rauscher, A. Mohammadi, D. Erni, et al. // Journal of Computational and Theoretical Nanoscience. — 2007. — Vol. 4. — P. 644–648.
5. *Kaneda K.* FDTD Analysis of Dielectric Resonators with Curved Surfaces / Kaneda K., Houshmand B., Itoh T. // IEEE Trans. Microwave Theory Tech. — 1997. — Vol. 45. — P. 1645–1649.
6. *Mohammadi Ahmad.* Dispersive Contour-Path Finite-Difference Time-Domain Algorithm for Modeling Surface Plasmon Polaritons at Flat Interfaces / A. Mohammadi, M. Agio // Optics Express. — 2006. — Vol. 14, N 23. — P. 11330–11338.

Надійшла до редакції 11.11.2009