

Гончаров В.К.<sup>1</sup>, Козадаев К.В.<sup>2</sup>, Микитчук Е.П.<sup>2</sup>

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПИРАМИДАЛЬНЫХ НАНОСТРУКТУР

<sup>1</sup>Научно-исследовательское учреждение «Институт прикладных физических проблем имени А.Н.Севченко» Белорусского государственного университета.

<sup>2</sup>Белорусский государственный университет.  
Минск, Республика Беларусь. kozadaeff@mail.ru

Статья посвящена исследованию особенностей численного моделирования оптических свойств нанопирамид, обусловленных наличием ребер. В сравнении с наноконусами рассмотрены пирамидальные наноструктуры, у которых в основании лежат четырех-, шести-, восьмиугольники. Численно рассчитаны оптические спектры экстинкции двухмерных массивов таких наноструктур.

Благодаря значительному прогрессу в развитии методов синтеза двумерных массивов поверхностных наноструктур, такие среды в настоящее время являются весьма перспективными для разработки оптоэлектронных и плазмонных сенсорных структур нового поколения [1]. Применение верифицированных подходов компьютерного моделирования электромагнитных свойств наноструктур на поверхности твердых материалов позволяет избежать дорогостоящего синтеза тестовых образцов для оценки их физических свойств. Кроме того, использование численных моделей допускает варьирование морфологических свойств и конструктивных параметров наноструктурированных материалов в очень широких диапазонах, что помогает определять требуемое направление разработки новых методов синтеза.

Математическое описание электромагнитных свойств двумерных массивов пирамидальных наночастиц на поверхности твердого тела, возможно проводить путем численного моделирования соответствующих физических процессов на основе метода конечных интегралов (МКИ) в реализации программного пакета CST Microwave Studio [2,3]. МКИ основан на дискретной формулировке уравнений Максвелла в интегральной форме, которые численно решаются с применением моделируемой структуры в виде набора соприкасающихся элементарных ячеек с ориентированными гранями, которые в совокупности играют роль расчетной сетки для дискретизации закона Фарадея и закона отсутствия магнитных зарядов. Размеры ячейки подбираются с учетом достижения желаемой точности численного моделирования. Дискретизация оставшихся уравнений Максвелла требует построения дополнительной дуальной сетки, такой что каждую грань ячейки основной сетки пересекает только одно ребро дуальной, и каждая ячейка основной сетки содержит единственную вершину дуальной:

$$\begin{cases} \tilde{C}\vec{e} = -\frac{d}{dt}\vec{b} \\ \tilde{S}\vec{b} = 0 \end{cases} \quad \begin{cases} \tilde{C}\vec{h} = \frac{d}{dt}\vec{d} + \vec{j} \\ \tilde{S}\vec{d} = q \end{cases},$$

где  $\tilde{C}$  – дискретный матричный оператор ротора,  $\tilde{S}$  – дискретный матричный оператор дивергенции в построенной расчетной сетке (они содержат топологическую информацию об отдельных связях ребер ячейки из расчетной сетки и об взаимной ориентации и состоят из коэффициентов  $\{-1, 0, 1\}$ ),  $\vec{e}$  – вектор-столбец электрических напряжений на всех ребрах расчетной сетки,  $\vec{b}$  – вектор-столбец магнитных потоков через все ребра расчетной сетки, дискретные матричные операторы ротора и дивергенции  $\tilde{C}$  и  $\tilde{S}$  в построенной дуальной сетке,  $\vec{h}$  – вектор-столбец магнитодвижущих сил,  $\vec{d}$  – вектор-столбец электрических индукций.

Описываемая численная модель воспроизведена средствами CST Microwave Studio для двухмерного массива монодисперсных монометаллических нанопирамид/наноконусов, расположенных периодически в 2-х измерениях на поверхности диэлектрической (в данном случае стеклянной) подложки. Модельная элементарная ячейка такой наноструктуры состоит

из двух полубесконечных соприкасающихся параллелепипедов, один из которых состоит из материала подложки, а второй – содержит нанообъект и окружающую его внешнюю среду (Рис. 1 *а, б*). Следует отличать такую минимальную ячейку, соответствующую структурной единице самого метаматериала, от описанной выше расчетной ячейки дискретизации, которая непосредственно участвует в численном решении уравнений Максвелла. Нанообъекты располагаются на границе раздела параллелепипедов, основанием касаясь подложки (Рис. 1*в*). Для преодоления проблемы ступенчатой аппроксимации криволинейных граничных поверхностей в реализации МКЭ средствами CST используется метод идеальной аппроксимации (Perfect Boundary Approximation).

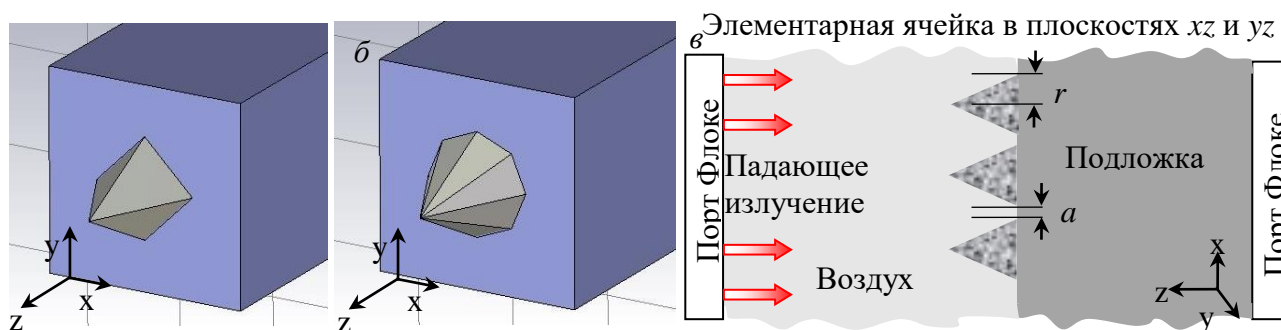


Рисунок 1 – Элементарная ячейка для: нанопирамиды с четырехугольником в основании (*а*), нанопирамиды с восьмиугольником в основании (*б*); схема моделирования оптических свойств двухмерного слоя пирамидальных наночастиц Ag на стеклянной подложке в атмосфере воздуха (*в*)

На рис. 2 приведен пример построения вычислительной сетки на поверхности наноструктур с минимальной плотностью 50 линий на длину волны для: четырехугольников (*а*), восьмиугольников (*б*) в основании модельных нанопирамид. Из рисунка видно, что при автоматическом построении вычислительной сетки наибольшая плотность последней требуется для пирамид с наименьшим количеством граней, что объясняется необходимостью более точной дискретизации ребер многогранников с меньшими телесными углами раскрытия.

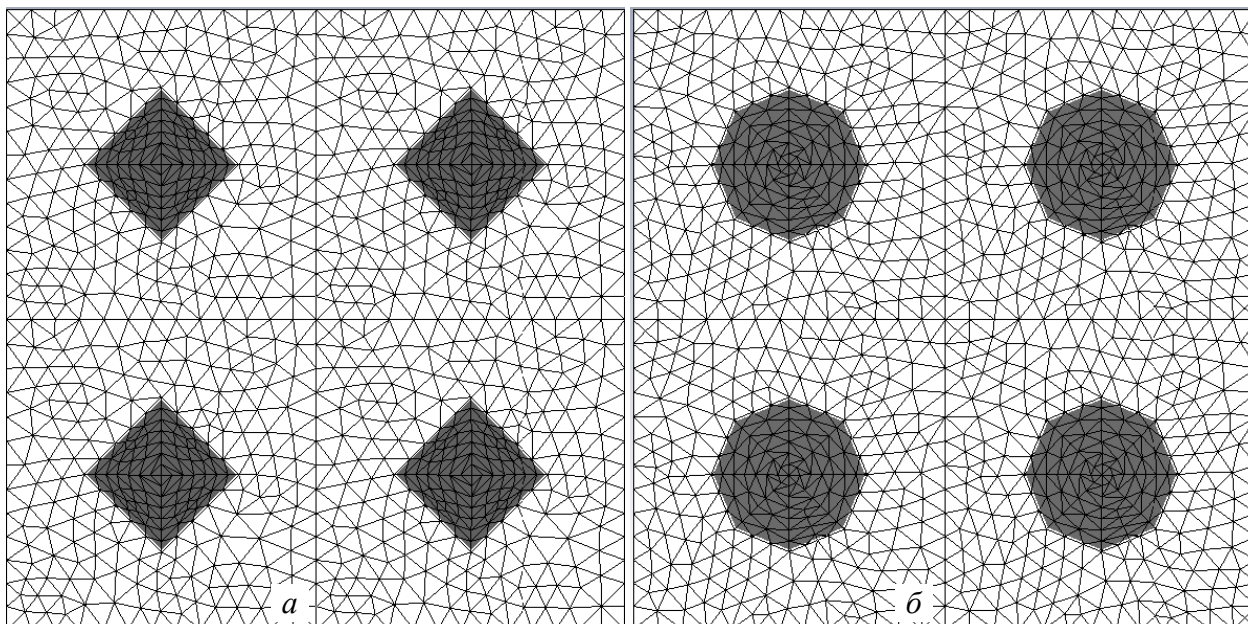


Рисунок 2 – Вычислительная сетка на поверхности наноструктур с минимальной плотностью 50 линий на длину волны для: четырехугольников (*а*), восьмиугольников (*б*) в основании нанопирамид

Для иллюстрации влияния параметров расчетной сетки на результаты моделирования на рис. 3 *а* приведена зависимость длины волны пика ППР для одной и той же нанопирамиды

от густоты расчетной сетки. Из рисунка видно, что результаты стабилизируются при минимальной густоте вычислительной сетки порядка 50 линий на длину волны, что соответствует разбиению нанообъекта на свыше чем  $2 \cdot 10^5$  вычислительных ячеек и требует выделения, по меньшей мере, 9 ГБ оперативной памяти для проведения расчетов. На рис. 3 б показаны результирующие спектры ППР (б) для исследованных наноструктур. Следует отметить, что вычисление каждого из приведенных спектров экстинкции для нанопирамид на компьютере с тактовой частотой 4 ГГц центрального процессора и с числом вычислительных потоков до 8 требует порядка 20 ч. При этом увеличение числа граней пирамиды приводит к «красному» смещению основного пика ППР более, чем на 20 нм.

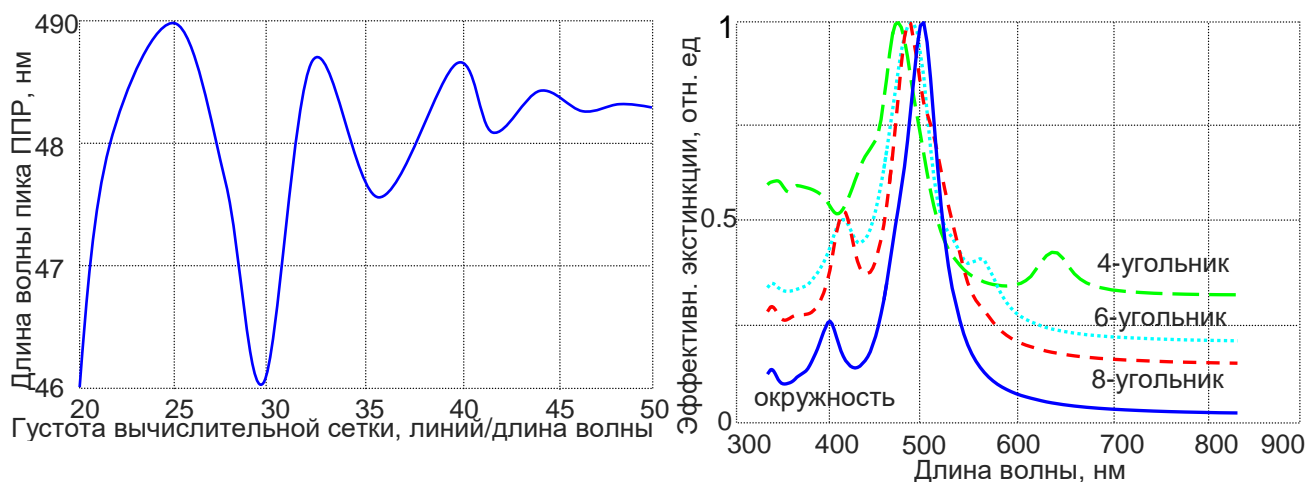


Рисунок 3 – Результаты моделирования (пояснения в тексте).

В работе проведено численное моделирование оптических свойств пирамидальных наноструктур. В сравнении с наноконусами рассмотрены пирамидальные наноструктуры, у которых в основании лежат четырех-, шести-, восьмиугольники. Численно рассчитаны оптические спектры экстинкции двумерных массивов таких наноструктур.

#### Список литературы:

1. Мамичев, Д. А. Оптические сенсоры на основе поверхностного плазмонного резонанса для высокочувствительного биохимического анализа / Д. А. Мамичев [и др.] // Молек. мед. – 2012. – № 6. – С. 19–27.
2. Микитчук, Е.П. Моделирование электромагнитных свойств серебряных наноструктур на подложке в атмосфере воздуха / Е.П. Микитчук, К.В. Козадаев // Ж. Белорус. гос. ун-та. Физ. – 2017 – № 1. – С. 100 –107.
3. Микитчук, Е.П. Моделирование взаимодействия между серебряными наночастицами в двумерном массиве на стеклянной подложке / Е.П. Микитчук, К.В. Козадаев // Ж. Прикл. Спектроскоп. – 2016 – Т. 83, № 6. – С. 947 –952.