УДК 004.942 + 537.87

К. С. Курочка, А. А. Кухаренко

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ ВОКРУГ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВЕКТОРНОГО МЕТОДА КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Современные наноматериалы, применяемые в оптике, состоят из различных комбинаций сферических частиц. Исследователя интересует распределение электромагнитного поля вблизи данных частиц, что позволяет оценить поле внутри сложных материалов. Поэтому является актуальным разработка методики и алгоритмов для решения задач такого рода. В статье рассматривается применение векторного метода конечных элементов для исследования электромагнитного поля вблизи наночастиц.

Введение

Современное развитие науки и техники приводит ко все большему использованию нанокомпозитов с частицами металлов. Основным конструктивным элементом в нанотехнологии является металлическая частица сферической формы [1]. Поэтому для получения новых материалов целесообразно изучить распределение электромагнитного поля на элементарных объектах. В перспективе, это позволяет перейти к синтезу материалов с заданными свойствами в виртуальном пространстве, до проведения натурных экспериментов, что в свою очередь позволит сэкономить значительные средства, время и деньги.

Основным предметом исследования наноструктурных объектов является электромагнитное поле (ЭМП) [1,2], которое определяет оптические и физические эффекты, возникающие при воздействии света.

В настоящее время не существует унифицированного метода и соответствующего программного обеспечения (ПО), позволяющего решать большинство задач, связанных с распределением ЭМП в наноструктурах. Это все требует от исследователя не только знаний в области физики, химии и нанотехнологии, но и умение ориентироваться в современном ПО и быстро обучаться работе с ним.

Сегодня нашел свое широкое применение при исследовании сложных систем и процессов метод конечных элементов (МКЭ) и его модификация для случая векторных величин. Будем строить математическую модель распределения ЭМП в наноструктурах с помощью векторного метода конечных элементов (ВМКЭ) [3,4].

Моделирование электромагнитного поля с использованием векторного метода конечных элементов

Напряженность электрического поля, создаваемого источником с плотностью зарядов J_{imp} в области Ω, характеризуемой электрической и магнитной постоянными может быть описана с помощью уравнений Максвелла (*J. K. Maxwell*). Исследуемая область может быть как двухмерной, так и трехмерной. Для определения напряженности электрического поля E необходимо решить уравнения Максвелла [3,7]:

$$\nabla \times E = -j\omega\mu H, \tag{1}$$

$$\nabla \times H = j\omega\epsilon E + J_{imp}, \tag{2}$$

$$\nabla \cdot (\epsilon E) = -\frac{1}{j\omega}\nabla J_{imp}, \tag{3}$$

$$\nabla \cdot (\mu H) = 0, \tag{4}$$

с учетом граничных условий, где H – напряженность магнитного поля, ω – частота источника, j – мнимая единица, ∇ – Гамильтонов (*W. R. Hamilton*) оператор.

За счет исключения напряженности магнитного поля H в (2) и преобразования (1) можно получить волновое уравнение, называемое уравнением Гельмгольца (*H. von Helmholtz*) [3, 5]:

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\mu_r}\nabla \times E\right) - k_0^2 \epsilon_r E = -jk_0 Z_0 J_{imp} on \Omega, \tag{5}$$

где $\mu_r = \frac{\mu}{\mu_0}$ и $\epsilon_r = \frac{\epsilon}{\epsilon_0}$ – относительные магнитная и электрическая постоянные, $k_0 = \omega\sqrt{\mu_0\epsilon_0}$ и $Z_0 = \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}}$ – волновое число и внутренний импеданс.

Типовые граничные условия для электрических полей включают однородные условия Дирихле (*J. P. G. Dirichlet*) на идеально проводящей поверхности, а также смешанные на поверхности, обладающей импедансом [3, 4, 5]. Формулировку этих граничных условия можно записать в виде:

$$\vec{n} \times E = P on \Gamma_D, \tag{6}$$

$$\vec{n} \times \left(\frac{1}{\mu_r}\nabla \times E\right) + \frac{jk_0}{\eta_r}\vec{n} \times (\vec{n} \times E) = K_N on \Gamma_N, \tag{7}$$

где P – установленные значения для тангенциальных компонент поля на Γ_D, η_r – нормальный импеданс поверхности на Γ_n, K_N – известные функции, описанные на границе источника.

Вместо решения граничной задачи воспользуемся вариационной постановкой, полученную путем умножения (5) на весовую функцию W_i и интегрирования по проблемной области Ω, что даст:

$$\int_\Omega W_i \left[\nabla \times \left(\frac{1}{\mu_r}\nabla \times E\right) - k_0^2 \epsilon_r E\right] d\Omega = -jk_0 Z_0 \int_\Omega W_i J_{imp} d\Omega. \tag{8}$$

Применяя свойства векторного произведения

$$\nabla \cdot \left[W_i \times \left(\frac{1}{\mu_r}\nabla \times E\right)\right] = \frac{1}{\mu_r} \cdot (\nabla \times W_i) \cdot (\nabla \times E) - W_i \left[\nabla \times \left(\frac{1}{\mu_r}\nabla \times E\right)\right], \tag{9}$$

и теорему Гаусса (*J.K.F.Gaus*) [5]

$$\int_\Omega \nabla \cdot \left[W_i \times \left(\frac{1}{\mu_r}\nabla \times E\right)\right] d\Omega = \int_\Gamma \vec{n} \cdot \nabla \cdot \left[W_i \times \left(\frac{1}{\mu_r}\nabla \times E\right)\right] d\Gamma, \tag{10}$$

а также применяя граничные условия (7), получаем вариационную форму уравнения Гельмгольца:

$$\int_\Omega \left[\frac{1}{\mu_r}(\nabla \times W_i)(\nabla \times E) - k_0^2 \epsilon_r W_i \cdot E\right] d\Omega = \int_{\Gamma_N} \frac{1}{\mu_r}(\vec{n} \times W_i) \cdot (\nabla \times E)\, d\Gamma -$$
$$- \int_{\Gamma_N} \left[\frac{jk_0}{\eta_r}(\vec{n} \times W_i) \cdot (\vec{n} \times E) + W_i \cdot K_N\right] d\Gamma - jk_0 Z_0 \int_\Omega W_i \cdot J_{imp}(d)\Omega. \tag{11}$$

Для разбиения рассматриваемой области на конечные элементы, с учетом специфики векторного метода, используются так называемые реберные (edge) элементы, особенностью которых является то, что в отличии от узлового МКЭ значения задаются на ребрах элементов.

Когда электрическое поле интерполируется на каждый элемент, то используются значения тангенциальных компонент на ребрах элементов, поле E в области Ω может быть найдено по формуле:

$$E = \sum_{i=1}^{N_{edge}} N_i E_i + \sum_{i=1}^{N_D} N_i^D E_i^D, \tag{12}$$

где N_{edge} – число уникальных ребер элементов в дискретизованной области, исключая те ребра, которые расположены на Γ_D, E_i – тангенциальная компонента поля на i-ом ребре, N_i – векторная базисная функция, N_D – количество ребер на Γ_D, N_i^D и E_i^D – векторная базисная функция и тангенциальное значение поля соответственно.

Подставив (12) в (11), где в качестве W_i используем векторную базисную функцию для ребер элемента, получим:

$$\sum_{j=0}^{N_{edge}} K_{ij}E_j, i = 1, 2, \ldots, N_{edge}, \tag{13}$$

где

$$K_{ij} = \int_\Omega \left[\frac{1}{\mu_r}(\nabla \times N_i) \cdot (\nabla \times N_j) - k_0^2 \epsilon_r N_i \cdot N_j\right] d\Omega + jk_0 \int_{\Gamma_N} \frac{1}{\eta_r} (\vec{n} \times N_i)(\vec{n} \times N_j)\, d\Gamma, \tag{14}$$

$$b_i = -jk_0 Z_0 \int_\Omega N_i J_{imp} d\Omega - \int_{\Gamma_N} N_i K_N d\Gamma - \sum_{j=1}^{N_D} E_j^D \int_\Omega \left[\frac{1}{\mu_r}(\nabla \times N_i) \cdot \left(\nabla \times N_j^D\right) - k_0^2 \epsilon_r N_i \cdot N_j^D\right] d\Omega. \tag{15}$$

В матричном виде уравнение (13) можно записать

$$[K]\{E\} = \{b\}. \tag{16}$$

Уравнение (16) представляет собой систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) решая которое может быть получен вектор $\{E\}$. Для нахождения значения поля в любой точке области можно воспользоваться формулой (12) [4].

Таким образом, на основании построенной модели и алгоритма ее исследования можно предложить схему использования ВМКЭ (рис. 1).

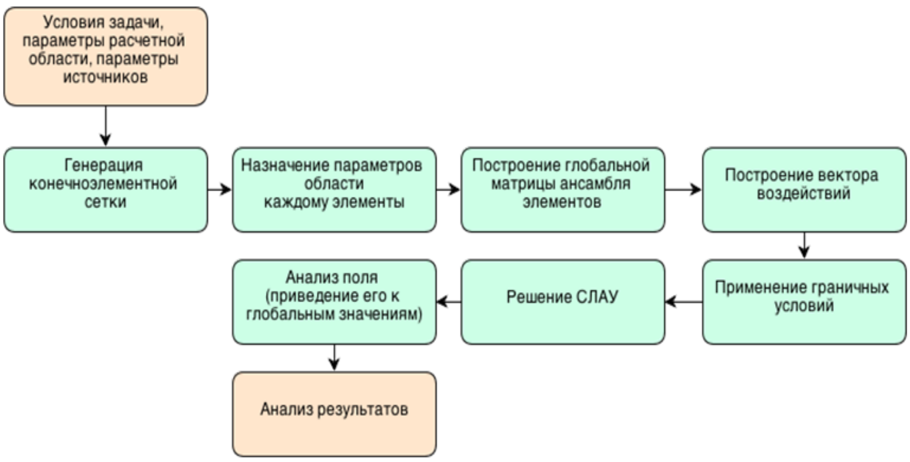

Рисунок 1 – Схема использования ВМКЭ

Верификация

Согласно предложенного алгоритма и математической модели было разработано соответствующее программное обеспечение (ПО). Программа разработана на языке C# 4 и платформе .NET 4 и получила название ElectroMagnetic Field FEM Modeler (EMFFM). Для верификации рассмотрим следующие задачи:

- сферическая частица, расположенная в области в виде сфере (рис. 2 а),
- сферическая частица, размещенная в области в виде куба (рис. 2 б).

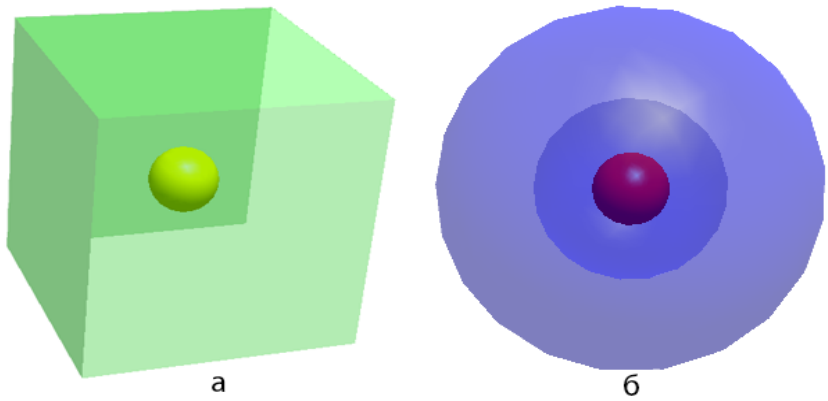

Рисунок 2 – Частица в кубе и сфере

Источник излучает плоскую монохромную электромагнитную волну. Для данного класса задач существует точное аналитическое решение – теория Ми (*G. Mie*) [6, 7]. Оно определяется из решения векторного волнового уравнения в сферических координатах:

$$\Delta\psi + k^2 m^2 \psi = 0. \tag{17}$$

В этих координатах это уравнение допускает разделение переменных и имеет частные решения вида

$$\psi_{ln} = \cos l\phi P_l^m(\cos\theta) z_n(mkr), \psi_{ln} = \sin l\phi P_l^m(\cos\theta) z_n(mkr). \tag{18}$$

В уравнении (18) первый множитель может быть как косинусом, так и синусом, второй – присоединенный полином Лежандра (*A–M. Legendre*) [5], третий – может быть любой сферической бесселевой (*F. W. Bessel*) функцией [5], которая связана с обычной соотношением

$$Z_n(p) = \sqrt{\frac{\pi}{2p}} Z_{n+\frac{1}{2}}(p). \tag{19}$$

Общее решение скалярного волнового уравнения есть линейная комбинация таких частных решений. Если u и v являются решениями скалярного волнового уравнения, а M_u, M_v, N_u, N_v – производными векторными полями, то уравнения Максвелла удовлетворяются при

$$E = M_v + iN_u, H = m(-M_u + iN_v). \tag{20}$$

Составляющие M_ψ, N_ψ в развёрнутом виде определяются формулами:

$$M_r = 0, M_\theta = \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial(r\psi)}{\partial\phi}, M_\phi = -\frac{1}{r}\frac{\partial(r\psi)}{\partial\theta},$$

$$mkN_r = \frac{\partial^2(r\psi)}{\partial r^2} + m^2k^2 r\psi, mkN_\theta = \frac{1}{r}\frac{\partial^2(r\psi)}{\partial r\partial\theta}, mkN_\phi = \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial^2(r\psi)}{\partial r\partial\phi}. \tag{21}$$

Для проверки работы программы можно использовать теорию Ми, которая считается дает точное аналитическое решение для задачи рассеяния света (поля) на сфере. Для этого было разработано небольшое тестовое приложение для получения данных на основе аналитического решения в среде Matlab. Результаты верификации представлены на рисунке 3.

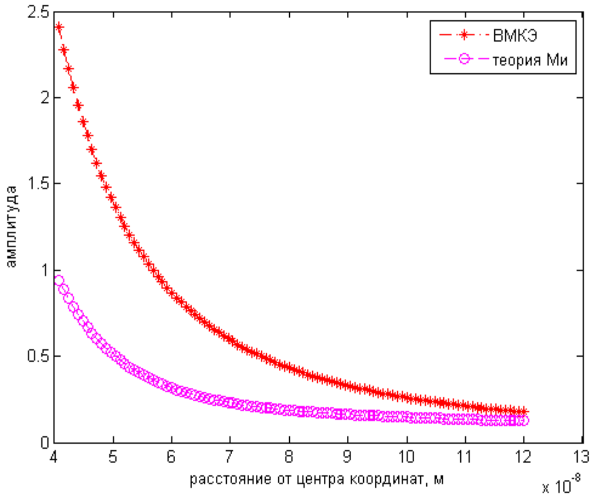

Рисунок 3 – Зависимость амплитуды плоской волны от расстояния от центра частицы

Выводы

Предложена математическая модель и алгоритм исследования распределения ЭМП вокруг сферических частиц. В дальней зоне наблюдается малая погрешность, в отличии от ближней, что вероятно связано с наличием плазмонного эффекта. В модели этот эффект не учтен, что требует ее доработки для получения адекватных результатов в ближней зоне.

Список литературы

1. Виноградов А. П. Электродинамика композитных материалов / А. П. Виноградов – М: УРСС Едиториал, 2004. – 505 с.
2. Ибрагимов И. М. Основы компьютерного моделирования наносистем: Учебное пособие / И. М. Ибрагимов, А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров. – СПб.: Издательство “Лань”, 2010. – 384 с.: ил.
3. Jianming. Jin, The Finite Element Method in Electromagnetics (2nd edition). New York: Wiley, 2002. – 780 p.
4. Jianming, J. Theory And Computation Of Electromagnetic Fields / J. Jianming – John Wiley Sons, 2010. – 616 p.
5. Jackson J. D. Classical electrodynamics / J. D. Jackson – New York: Wiley, 1998. – 808 p.
6. Хюлст ван де Г. Рассеяние света малыми частицами. / Г. ван де Хюлст. – М.: Издательство иностранной литературы, 1961. – 537 с.
7. Mie G., 1908, Beitrage zur Optik truber Medien, Speziell killoidaler Metallosungen, Ann. d. Physik IV, 25, 377.

Курочка Константин Сергеевич, заведующий кафедры информационных технологий Гомельского государственного технического университета им. П.О. Сухого, кандидат технических наук, доцент, kurochka@gstu.by.

Кухаренко Андрей Александрович, магистрант 1 курса факультета автоматизированных и информационных систем Гомельского государственного технического университета им. П.О. Сухого, преподаватель-стажер, digiman2006@rambler.ru.