Электродинамический анализ наноантенн миллиметрового и оптического диапазонов
Лерер А.М.

Разработаны электродинамические модели и исследованы радиофизические свойства углеродных нанотрубок – вибраторов (изолированных, на подложке, решеток), металлических оптических антенн и оптических антенн, образованных из покрытых пленками металлов ZnO наностержней. В основе моделей численно – аналитическое решение интегродифференциальных уравнений, описывающих дифракцию электромагнитных волн на импедансных и диэлектрических телах. Использование интегральных представлений ядер интегро-дифференциальных уравнений позволило обойти трудности решения, связанные с особенностью ядер и на порядок сократить время расчетов.

Как известно, проводимость обычного провода обратно пропорциональна его длине и прямо пропорциональна поперечному сечению. Перенос зарядов в углеродных нанотрубках (УНТ) имеет квантовую природу [1]. Их проводимость не зависит ни от ее длины, ни от ее толщины и равна так называемому кванту проводимости - предельному значению проводимости, отвечающему свободному переносу электронов по всей длине проводника. Электропроводность нанотрубок выше, чем у всех известных проводников сопоставимых размеров.

Если рассматривать нанотрубки как линии передач, то можно выделить несколько особенностей, отличающих нанотрубки от классических линий передач. Для УНТ существует понятие кинетической индукции, величина которой много больше классической магнитной индукции. Кроме электростатической емкости также необходимо учитывать квантовую емкость [1]. Как следствие, скорость распространение волны в УНТ сравнима со скоростью Ферми, а не со скоростью света c, и составляет порядка $0.02c$. Таким образом, длина волны в нанотрубке значительно меньше, чем длина волны в макроскопическом металлическом проводнике. Поэтому резонансные частоты нанотрубки - вибратора намного меньше, чем у вибратора металлического. На факт сильного замедления поверхностной волны в нанотрубках впервые было указали в работе в работе [2]. Впервые строгая теория нанотрубки - наноантенны была построена независимо в работах [3], [4].

В [5], [6] разработан метод расчета УНТ – вибраторов на подложке, основанный на решении парных интегральных уравнений относительно (ПИУ) преобразования Фурье для плотности тока на вибраторе. В этом случае особенность ядра ИДУ относительно тока на вибраторе переносится на медленное убывание подынтегральной функции в интеграле Фурье. Улучшить сходимость интеграла Фурье проще, чем регуляризовать ИДУ. Для вибратора на подложке решение ПИУ предпочтительней перед решением ИДУ и тем, что ФГ выражается через интеграл Фурье.

В традиционной оптике светом обычно управляют перенаправлением волновых фронтов распространяющегося излучения с помощью линз, зеркал и дифракционных элементов. Такой тип управления опирается на волновую природу электромагнитных полей и, таким образом, не применим к направлению полей в субдлинноволновом масштабе, в отличие от радио- и СВЧ-диапазонов, где антенны используются для управления полями в субдлинноволновом масштабе и являются эффективным интерфейсом между распространяющимся излучением и локализованными полями. Такими же свойствами обладают и оптические антенны (ОА).

Оптические антенны используются для повышения эффективности передачи энергии от внешнего поля к полю локальному и обратно. В задачах микроскопии оптические антенны заменяют традиционные фокусирующие линзы или объективы, позволяя концентрировать излучение в размерах меньших, чем дифракционный предел [7-9]. ОА приводят к гигантскому увеличению локального электрического поля. Это свойство ОА может быть использовано для повышения эффективности фотофизических процессов в светоизлучающих устройствах и в солнечных батареях, определения структуры ДНК, обнаружения отдельных молекул [7-9].

В качестве ОА используются углеродные нанотрубки [10], металлические и металлодиэлектрические вибраторы и сферы [11-15]. Свойства ОА аналогичны антеннам радиодиапазона с некоторыми существенными отличиями в физических характеристиках и невозможности использования принципа масштабируемости. Большинство отличий вызвано тем, что металл, в оптическом диапазоне не является идеальным проводником, а имеет свойства плазмы твердого тела, обусловленные наличием газа из свободных электронов. Поэтому при решении задачи дифракции электромагнитной волны оптического диапазона на металлическом объекте необходимо учитывать поле внутри образца.

Существуют несколько типов интегральных уравнений, описывающих дифракцию на диэлектрических телах. Большинство из этих ИУ можно разбить на две группы – поверхностные (ПИУ) и объемные ИУ (ОИУ). В ПИУ неизвестной является поле на границе раздела диэлектриков, а в ОИУ - во всех внутренних точках тела. ОИУ имеют ряд преимуществ: они более простые, неоднородность и нелинейность диэлектрика не усложняет существенно решение, в результате решения непосредственно находится электрическое поле в диэлектрике. Применения ИУ для плазмонных структур описано, например, в [15-18].

В настоящей работе применен для исследования дифракции электромагнитных волн на металлодиэлектрических наноструктурах эффективный численно-аналитический метод решения ОИУ [17]. Для моделирования ОА, образованных решеткой из *N* планарных прямоугольных металлических вибраторов, расположенных на поверхности диэлектрической подложки использованы приближенные граничные условия для тонкого диэлектрического слоя, учитывающие конечное значение диэлектрической проницаемости металлов в оптическом диапазоне [18].

В настоящее время создаются структуры ядро–оболочка на основе ZnO наностержней, покрытых пленками металлов, которые могут быть использованы в качестве наноантенн видимого и ИК диапазонов. Решетки таких наностержней, покрытых пленками металлов, могут быть выращены на проводящих подслоях, необходимых для возбуждения плазмонов. Исследование таких ОА является одной из целей данной работы.

В основе наноэлектромагнетизма объединение микроскопической квантовой теории электронных свойств наноструктур и классической макроскопической электродинамики. В работе использованы *электродинамические модели:*

1. Квантово – механические свойства углеродной нанотрубки в модели описаны с помощью макроскопического параметра – поверхностного импеданса.
2. При исследовании металлических нановибраторов учтено конечное значение диэлектрической проницаемости металлов в оптическом диапазоне.

В работе использованы *математические модели*:

1. Решение краевой задачи о дифракции электромагнитной волны на УНТ - вибраторах сведено к решению интегродифференциальных уравнений (ИДУ), ядра которых представлены в виде интеграла Фурье. ИДУ решены методом Галеркина с чебышевским базисом.
2. Решение краевой задачи о дифракции электромагнитных волн оптического диапазона на металлодиэлектрическом нановибраторе сведено к решению объемного ИДУ относительно напряженности электрического поля внутри неоднородного диэлектрического цилиндра. Ядра ИДУ также представлены в виде интеграла Фурье. ИДУ решены методом, сочетающим методы Галеркина и коллокации.
3. При решение краевой задачи о дифракции на планарном металлическом нановибраторе использован метод приближенных граничных условий для тонкого диэлектрического слоя. Решение задачи сведено к решению методом Галеркина с чебышевским базисом парных интегральных уравнений.
4. Интегральное представление ядер позволяют легко обойти трудности решения ИУ, связанные с особенностью ядер. В полученных системах линейных алгебраических уравнений матричные элементы выражены в виде интегралов Фурье. Особенность ядра ИУ при решении ИУ проявляется в медленной сходимости интегралов в матричных элементах полученных СЛАУ. Улучшена сходимость этих интегралов.

В настоящей работе использованы результаты из [5], [6], [17]. [18].

УНТ - вибраторы

При обычной технологии выращивания УНТ они расположены перпендикулярно подложке. Рассмотрим метод расчета дифракционных характеристик из *N* произвольно расположенных перпендикулярных подложке УНТ – вибраторов. Рассмотрим УНТ, расположенные целиком в диэлектрике с диэлектрической проницаемостью ε_1 перпендикулярно диэлектрической подложке ε_2, $\mu_1 = \mu_2 = 1$. Введем декартовую систему координат, в которой оси X, Y параллельны подложке и перпендикулярны УНТ, ось Z направлена вдоль вибратора перпендикулярно подложке, начало координат лежит на подложке. Длина УНТ L, ее радиус *a*.

Полагаем, что поверхности вибратора выполняется граничное условие:

$$E_z = \rho_S j, \tag{1}$$

E_z, j - продольные компоненты напряженности электрического поля и плотности поверхностного тока, ρ_S - поверхностное сопротивление углеродной нанотрубки [3,4] $\rho_s = i\dfrac{\pi^2 a\hbar(\omega - i\nu)}{2e^2 v_F}$, где υ_F скорость Ферми (для УНТ $\upsilon_F = 9{,}71 \cdot 10^5$ м/с), ω - циклическая частота, ν –релаксационная частота (для УНТ $\nu = 3{,}33 \cdot 10^{11}$ Гц) *e* – заряд электрона, *c* – скорость света в вакууме, $\hbar$ - постоянная Планка.

Рассмотрим вначале одиночный УНТ – вибратор. Полагаем, что на вибраторе имеется только продольная компонента тока, которая зависит только от z. Используем граничное условие (1). В результате получим

$$\frac{1}{i\omega\varepsilon_1\varepsilon_0}\left(\frac{d^2}{dz^2}+k_1{}^2\right)\int_0^L j(z')g_e(z,z')dz' + E_z^e(z) = \rho_s j(z), \qquad z\in[0,L], \tag{2}$$

где k_1 волновое число в верхнем диэлектрике, ядро ИДУ $g_e(z,z')$ определим ниже. Полагаем, что внешнее поле $E_z^e(z)$ сумма двух плоских волн – падающей и отраженной от подложки без вибратора. Коэффициент отражения определяется формулой Френеля. Вектор $\vec{E}^e(z)$ лежит в плоскости падения.

Ядро ИДУ

$$g_e(z,z') = \frac{a}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{2\pi} g(x,x',y,y',z,z')d\varphi' . \tag{3}$$

В (3) полагается, что точки наблюдения и истока лежат на поверхности вибратора

$$x = a\cos\varphi, y = a\sin\varphi, x' = a\cos\varphi', y' = a\sin\varphi' . \tag{4}$$

Функция $g(x,x',y,y',z,z')$ в (3) - функция Грина (ФГ) для векторного потенциала в случае тока, перпендикулярного подложке:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}+k^2\varepsilon\right)g(x,x',y,y',z,z') = -\delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z'). \tag{5}$$

Пусть $z' \ge 0$. При $z \ge 0$ решение (5) ищем в виде

$$g(x,x',y,y',z,z') = \frac{1}{8\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\left[e^{-\gamma_1|z-z'|}+Q(\rho)e^{-\gamma_1(z+z')}\right]\frac{1}{\gamma_1}e^{i\alpha\bar{x}+i\beta\bar{y}}d\alpha d\beta . \tag{6}$$

Здесь и ниже использованы обозначения $\bar{x} = x - x', \bar{y} = y - y'$, $\gamma_{1,2} = \sqrt{\rho^2 - k_{1,2}^2}$, $\rho = \sqrt{\alpha^2+\beta^2}$, k_2 - волновое число в подложке, $Q = \dfrac{\gamma_1 - \gamma_2 t}{\gamma_1 + \gamma_2 t}$, $t = \dfrac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2}$.

Первый член в (6) – частное решение неоднородного уравнения (5) - ФГ свободного пространства

$$g_0(x,x',y,y',z,z') = \frac{e^{-ik_1R}}{4\pi R},$$

для которого существует ИП

$$\frac{e^{-ik_1R}}{4\pi R} = \frac{1}{4\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty} K_0\left(R_1\sqrt{\rho^2-k_1{}^2}\right)e^{-i\rho(z-z')}d\rho, \tag{7}$$

где K_0 - функция Макдональда

Второй член –

$$g_2(x,x',y,y',z,z') = \frac{1}{8\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} Q(\rho)e^{-\gamma_1(z+z')}\frac{1}{\gamma_1}e^{i\alpha\bar{x}+i\beta\bar{y}}d\alpha d\beta \tag{8}$$

учитывает влияние подложки. При $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ $g_1 = 0$.

Подставим (7), (8) в (3), учтем (4), сделаем замену переменных $\alpha = \rho\cos\vartheta, \beta = \rho\sin\vartheta$. В результате имеем

$$g_e(z,z') = g_{e,1}(z,z') + g_{e,2}(z,z'), \tag{9}$$

$$g_{e,1}(z,z') = \frac{a}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} I_0(a\gamma_1)K_0(a\gamma_1)e^{-i\rho(z-z')}d\rho, \tag{10}$$

$$g_{e,2}(z,z') = \frac{a}{2\pi}\int_0^{\infty} \rho Q(\rho)\frac{e^{-\gamma_1(z+z')}}{\gamma_1}J_0^2(\rho a)d\rho, \tag{11}$$

где J_0 - функция Бесселя, I_0 - модифицированная функция Бесселя.

Решение (2) ищем методом Галеркина

$$j(z) = \sum_{n=0}^{\infty} X_n V_n(z), \tag{12}$$

где X_n – неизвестные коэффициенты, $V_n(z)$ - базисные функции, в качестве которых используем взвешенные полиномы Чебышева второго рода

$$V_n(z) = \frac{i^n}{\pi(n+1)}\sqrt{1 - z^2/l^2}\,U_n\left(\frac{z}{l}\right), \; n = 0,1,2.... \tag{13}$$

Преобразование Фурье от $V_n(z)$ выражается через функции Бесселя $\widetilde{V}_n(\gamma) = J_{n+1}(\gamma l)/\gamma$.

Подставляем ток (12) в (2). Затем проектируем уравнение (2) на $V_p^*(z)$. В результате получим систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)

$$\sum_{n=0}^{\infty} X_n A_{pn} = B_p,\; p = 0,1...,$$

с матричными элементами (МЭ) A_{pn} в левой и B_p правой частях:

$$A_{pn}(\rho) = \int_0^L dz V_p^*(z)\left(\frac{d^2}{dz^2} + k_1^2\right)\int_0^L V_n(z')g_e(\rho,z,z')dz', \tag{14}$$
$$B_p = \frac{ik\varepsilon_1}{Z_c}\int_{-l}^{l} E^e(z)V_p^*(z)dz.$$

МЭ (14) полученной СЛАУ - двойные интегралы, ядро которых $g_e(\rho,z,z')$ имеет особенность при $z = z'$. Используем интегральное представление ядра (9), (10). После подстановки (9) - (11) в (4) получим

$$A_{pn} = A_{pn}^{(1)} + A_{pn}^{(2)} + A_{pn}^{(3)},$$

где

$$A_{pn}^{(1)} = \frac{\zeta_{pn}a}{\pi}\int_0^{\infty}\gamma_1^2\, I_0(a\gamma_1)K_0(a\gamma_1)J_{p+1}(\rho l)J_{n+1}(\rho l)/\rho^2\, d\rho, \tag{15}$$

$$A_{pn}^{(3)}=\eta\int_{-l}^{l}V_{p}^{*}(z)\,V_n(z)dz=$$

$$=i\zeta_{nj}\,\frac{l}{\pi^2(p+1)(n+1)}\cos\frac{q\pi}{2}\left(\frac{1}{(p+n+2)^2-1}-\frac{1}{(p-n)^2-1}\right),$$

$\zeta_{pn}=1$, если $p\,,n$ одной четности, в противном случае $\zeta_{pn}=0$.

$$A_{pn}^{(2)}=\frac{a}{2\pi}\int_0^\infty\rho Q(\rho)J_0^2(\rho\,a)I_{p+1}(\gamma_1\,l)I_{n+1}(\gamma_1\,l)e^{-2\gamma_1 l}\Big/\gamma_1\,d\rho\,. \tag{16}$$

Особенность ядра ИДУ проявляется в медленной сходимости интеграла по ρ в (15).

Интегралы (15) находим численно. Разбиваем на четыре интеграла с отрезками интегрирования $[0,k_1]$, $[k_1,C]$, $[C,E]$, $[E,\infty)$, где константы $C,\,E$ выбираются из условий $C\,l>>\max(p,n),\;Ea>>1$. В первом интеграле сделаем замену переменных $\rho=k_1\cos\psi$, во втором - $\rho=k_1\mathrm{ch}\theta$. Оба интеграла затем вычисляем по формуле прямоугольников. В третьем интеграле функции Бесселя заменяем их асимптотикой $J_{p+1}(\gamma\,l)J_{n+1}(\gamma\,l)\approx\dfrac{1}{\pi\,\gamma\,l}\cos\left(\dfrac{p-n}{2}\pi\right)$, преобразованный интеграл вычисляем по формуле прямоугольников. В четвертом интеграле все функции Бесселя заменяем их асимптотикой, преобразованный интеграл находим аналитически. Таким образом, учтено медленное убывание (как γ^{-2} при $\gamma\to\infty$) подынтегрального выражения (15). Аналогично вычисляются интегралы (16).

Рассмотрим теперь дифракцию на системе из *нескольких УНТ – вибраторов*. Нетрудно и в этом случае как записать систему ИДУ, так и получить методом Галеркина ее решение. Матричные элементы СЛАУ, описывающие взаимодействие между вибраторами, также имеют вид (14), только точки истока z' и наблюдения z лежат на разных УНТ. ФГ в этом случае не имеет особенности. Поэтому естественно использовать особую часть ФГ в виде

$$g_0(x,x',y,y',z,z')=\frac{e^{-ik_1R}}{4\pi R}\,,\;R=\sqrt{(x-x')^2+(y-y')^2+(z-z')^2}, \tag{17}$$

а интегралы в (14) взять численно по квадратурам наивысшей точности, Это сделано, например, в [19], [20]. Однако расстояние между УНТ может быть много меньше, чем их длина. В этом случае резко возрастает порядок квадратур и время счета. Поэтому в (17) выделим статическую часть и используем интегральное представление

$$\frac{1}{R}=\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}K_0(\gamma\,r)e^{i\gamma(z-z')}d\gamma\ ,$$

$$g_0(x,x',y,y',z,z')=g_{01}(x,x',y,y',z,z')+g_{02}(x,x',y,y',z,z')=$$

$$=\frac{1}{4\pi}\left[\frac{e^{-ik_1R}-1}{R}+\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}K_0(\gamma\,r)e^{i\gamma(z-z')}d\gamma\right]$$

Интегралы с ФГ g_{01} теперь легко находятся численно при любых *R*. Матричные элементы с g_{02} выражаются теперь через интеграл Фурье. Преобразования этих матричных элементов, в том числе улучшение сходимости интегралов аналогичны приведенным выше. Так как они не зависят от частоты, то их достаточно вычислить один раз. Такой способ вычисления сокращает время счета в десятки раз.

Аналогично решается более сложное ИДУ для нановибратора, лежащего на подложке [5].

Металлические оптические антенны

Для моделирования ОА (рис.1) используем известное трехмерное ИДУ для диэлектрического тела [21]:

$$\mathbf{E}(x,y,z) = \left[graddiv + k^2\right]\iint_V \tau\,\mathbf{E}(x',y',z')g(R)dv' + \mathbf{E}^{ext}(x,y,z); \tag{18}$$

где $g(R)$ - функция Грина (ФГ), $\tau = \varepsilon_s - \varepsilon$, ε_s - диэлектрическая проницаемость тела, ε - диэлектрическая проницаемость окружающего тело диэлектрика, k - волновое число в нем.

Комплексная диэлектрическая проницаемость металлов и показатель преломления ZnO в оптическом диапазоне длин волн приведены на сайте [22]. Эти экспериментальные результаты для металлов хорошо аппроксимирует формула для диэлектрической проницаемости плазмы

$$\varepsilon_s{}' = 1 - \left(\lambda/\lambda_p\right)^2,\ \varepsilon_s{}'' = -\lambda^3 G/(2\pi c\lambda_p^2),\ \varepsilon_s = \varepsilon_s{}' - i\varepsilon_s{}'',$$

где λ_p - плазменная длина волны, G - частота соударений электронов. Для меди - λ_p=151.9нм и G=-0.25*10^{15}Гц, для серебра - λ_p=147нм и G=-0.135*10^{15}Гц [23].

Рассмотрим диэлектрический цилиндр радиусом *a* и длинной *2l* расположенный вдоль оси *z* с центром в начале координат (рис.1). В случае $a << l$ можно положить, что напряженность электрического поля имеет одну параллельную оси *z* компоненту и зависит только от координат *r, z*. В этом случае (18) сводится к двухмерному ИДУ

$$\frac{j(r,z)}{\tau(r)} = E^{ext}(r,z) + \left[\frac{d^2}{dz^2} + k^2\right]\int_{-l}^{l}\int_0^a j(r',z')g(r,r',z,z')rdr'dz' \tag{19}$$

где $j(r,z) = \tau(r)E(r,z)$, а функция Грина имеет вид (6) для ОА, расположенной перпендикулярно подложке и (7) для ОА без подложки.

Рассмотрим вначале ОА без подложки. Ядро ИДУ (19) $G(r,r',z,z')$ имеет логарифмическую особенность. Представим его, как и для УНТ в виде интеграла Фурье

$g(R) = \dfrac{1}{4\pi^2}\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} K_0(\delta\kappa)e^{-i\rho(z-z')}d\rho$, где $\kappa = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr'\cos\varphi}$, $\delta = \sqrt{\rho^2 - k^2}$. Тогда

$$g(r,r',z,z') = \frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{g}(r,r',\gamma)\,e^{-i\gamma(z-z')}d\gamma, \tag{20}$$

где

$$\tilde{g}(r,r',\gamma) = \begin{cases} I_0(r\delta)K_0(r'\delta), r \le r' \\ I_0(r'\delta)K_0(r\delta), r \ge r' \end{cases}. \tag{21}$$

ИДУ (19) решаем методом Галеркина. Разложим неизвестную функцию $j(r,z)$ по взвешенным полиномам Чебышева второго рода:

$$j(r,z) = \sum_{m=0}^{\infty} Z_m(r)\overline{U}_m(\frac{z}{l}), \qquad \overline{U}_m(\frac{z}{l}) = i^m\frac{1}{\pi l}\frac{1}{m+1}(l^2 - z^2)^{1/2}U_m(\frac{z}{l});. \tag{22}$$

В (22) $Z_m(r)$ неизвестные функции, в отличие от (12), где X_n – неизвестные коэффициенты.

Подставим (22) в (19), проектируем на $\overline{U}_n(\frac{z}{l})$. В результате получим систему интегральных уравнений (ИУ)

$$\sum_{m=0}^{\infty}\frac{Z_m(r)D_{nm}}{\tau(r)} = B_n(r) + \frac{1}{2\pi}\sum_{m=0}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}(\gamma^2-k^2)\frac{J_{m+1}(\gamma l)}{\gamma}\frac{J_{n+1}(\gamma l)}{\gamma}d\gamma\int_0^{\infty} r' Z_m(r')\tilde{g}(r,r',\gamma)dr' \ , \tag{23}$$

m=0,1, 2…

где

$$D_{nm} = \int_{-l}^{l}\overline{U}_n(\frac{z}{l})\overline{U}_m(\frac{z}{l})dz = \begin{cases} 0, m\ и\ n \text{ разной четности} \\ \frac{1}{\pi^2}\cos\left(q\frac{\pi}{2}\right)\frac{1}{m}\frac{1}{n}\left[\frac{1}{p^2-1}-\frac{1}{q^2-1}\right], \ m\ и\ n \text{ одной четности,} \\ q=m-n,\ p=m+n \end{cases}$$

$$B_n(r) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}d\varphi\int_{-l}^{l}\overline{U}_m(\frac{z}{l})E^{ext}(r,z)dz = E_0\sin\theta J_0(k_{\perp}r_q)\frac{J_{n+1}(k_z l)}{k_z}, k^2_{\perp} = k_x^2+k_y^2 \ ,$$

ИУ (23) решаем методом коллокации. Используем квадратуру $\int_0^a r'f(r')dr' = \sum_{p=1}^{P}\overline{A}_p f(r_p)$ и требуем выполнения (23) в квадратурных узлах. Введем обозначения $\overline{A}_p Z_m(r_p) = X_{mp}$ - неизвестные коэффициенты, $B_{nq} = B_n(r_q)$. Учтем в (23) первые *M* уравнений. В результате получим систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)

$$\sum_{m=0}^{M}X_{mp}\frac{D_{nm}}{\overline{A}_q\tau(r_q)} = B_{nq} + \sum_{m=0}^{M}\sum_{p=1}^{P}X_{mp}A_{nm}^{qp}, \quad n=0,1,...M,\ q=1,...P \tag{24}$$

где

$$A_{nm}^{qp} = \begin{cases} \frac{1}{\pi}\int_0^{\infty}\left(\gamma^2-k^2\right)\frac{J_m(\gamma l)}{\gamma}\frac{J_n(\gamma l)}{\gamma}\tilde{g}\left(r_p,r_q,\gamma\right)d\gamma, \ m\ и\ n \text{ одной четности} \\ 0, m\ и\ n \text{ разной четности} \end{cases} . \tag{25}$$

Использование интегрального представления особого ядра (20) также как м в предыдущем случае позволяет обойти трудности, связанные с вычислением интегралов от бисингулярных функций. Особенность ядра ИДУ в этом случае проявляется в медленной сходимости интегралов в спектральном пространстве (25). Улучшить сходимость интегралов вышеописанным методом проще, чем провести регуляризацию.

Решив полученную СЛАУ (24), найдем неизвестную функцию $j(r,z)$.

Нетрудно получить выражение для расчета поля в дальней зоне:

$$E_{\vartheta} = H_{\varphi}Z_0 \approx \frac{e^{-ikr}}{4\pi\, {}^{r}\!/_{l}}F(\vartheta) \ ,$$

где $F(\vartheta) = \dfrac{2\pi k^2}{l}\int_0^a r'\tau(r')J_0(r'\sin\vartheta)dr'\int_{-l}^{l}j(r',z')e^{ik\cos\vartheta z'}dz'$, ϑ - угол наблюдения, отсчитывается от вибратора, $F(\vartheta)$ - безразмерная диаграмма рассеяния.

Решение ИДУ (19) для ОА на подложке аналогична. Особая часть ФГ (6) - в первом члене, который является ФГ для решенной выше задачи.

Полученное решение легко обобщается на случай дифракции на нескольких диэлектрических цилиндрах.

Планарные металлические оптические антенны

Исследуемая ОА - система из N прямоугольных тонких металлических вибраторов, напыленная на диэлектрическую подложку.

Введем декартовую систему координат. Плоскость $y=0$ - поверхность подложки. Вибраторы параллельны оси z . Ось x перпендикулярна к ним. Полагаем, что диэлектрическая проницаемость подложки ε_2, а диэлектрика над ней $\varepsilon_1=1$. Рассмотрим падение сверху плоской монохроматической волны. Рассмотрим вначале один вибратор длиной $2l$ и шириной $2a,\ a<<l$. Полагаем, что плотность тока на вибраторах имеет только продольную компоненту j_z.

Избежать процесса вычисления полей внутри металлических пленок возможно при использовании метода приближённых граничных условий (ПГУ) для диэлектрического слоя [24]. Полагаем, что на металле выполняются приближенные граничные условия:

$$E_z=-i\tau\, j_z, \tag{26}$$

где $\tau=\dfrac{Z_0}{k\,\delta}$, $\delta=(\varepsilon_s-\varepsilon_1)t$, Z_0,k - волновое сопротивление и волновое число в вакууме, ε_s, t – диэлектрическая проницаемость и толщина вибраторов. Введем понятие «внешнее электромагнитное поле» $\vec{E}^{ext}$, под которым будем полагать поле падающей волны плюс поле волн прошедшей и отраженной от подложки без полосок.

С помощью двухмерного преобразования Фурье нетрудно получить выражения для компонент электромагнитного поля, в частности,

$$E_x(x,y,z)=\frac{iZ_0}{4\pi^2k}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\alpha\gamma U_e(\rho)\tilde{j}_z(\alpha,\gamma)\exp[i(\alpha x+\gamma z)]V_1(\rho,y)d\alpha d\gamma,$$

$$E_y(x,y,z)=\frac{Z_0}{4\pi^2k}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\gamma U_e(\rho)\tilde{j}_z(\alpha,\gamma)\exp[i(\alpha x+\gamma z)]V_2(\rho,y)d\alpha d\gamma,$$

$$E_z(x,y,z)=\frac{iZ_0}{4\pi^2k}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\left[\gamma^2U_e-k^2U_m\right]\tilde{j}_z(\alpha,\gamma)\exp[i(\alpha x+\gamma z)]V_1(\rho,y)d\alpha d\gamma, \tag{27}$$

где

$$U_e(\rho)=\frac{1}{\varepsilon_1\beta_2+\varepsilon_2\beta_1},U_m(\rho)=\frac{1}{\beta_1+\beta_2},\ \beta_{1,2}=\sqrt{\rho^2-k^2\varepsilon_{1,2}},\ \rho=\sqrt{\alpha^2+\beta^2},$$

$\tilde{j}_z(\alpha,\gamma)$ - двухмерное преобразование Фурье от $j_z(x,z)$,

$$V_1(\rho,y)=\begin{cases}\exp(-\beta_1y), y\geq 0,\\ \exp(\beta_2y), y\leq 0,\end{cases}\quad V_2(\rho,y)=\begin{cases}-\beta_2\exp(-\beta_1y), y\geq 0,\\ \beta_1\exp(\beta_2y), y\leq 0,\end{cases}.$$

Подставляем (27) в ПГУ (26):

$$-\frac{iZ_0}{k}\left[\frac{d^2}{dz^2}\int\limits_{-l}^{l}\int\limits_{-a}^{a}j(x',z')g_e(x,x',z,z')dx'dz'+k^2\int\limits_{-l}^{l}\int\limits_{-a}^{a}j(x',z')g_m(x,x',z,z')dx''dz'\right]+$$

$$+E_z^{ext}(x,z)=-i\tau\, j_z(x,z),\ |x|\leq a,\ |z|\leq l, \tag{28}$$

где

$$g_{e,m}(x,x',z,z')=\frac{1}{4\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}U_{e,m}(\rho)\exp[i(\alpha\bar{x}+\gamma\bar{z})]d\alpha d\gamma, \bar{x}=x-x', \bar{z}=z-z'.$$

Представим неизвестную функцию $j_z(x,z)$ в виде

$$j_z(x,z)=I(z)\Big/\left(\pi\sqrt{a^2-x^2}\right), \tag{29}$$

где $I(z)$ - ток на полоске. Особенность на краю полосок вида $1\Big/\sqrt{a^2-x^2}$ характерна для идеально проводящего металла. У импедансных полосок ток также возрастает к краям. Как показывают численные эксперименты [16] учет особенности в виде $1\Big/\sqrt{a^2-x^2}$ дает хорошую внутреннюю сходимость решения и для импедансных полосок. Кроме того, этот вид особенности позволяет упростить аналитические преобразования интегралов Фурье.

Подставим (29) в ИДУ (28), потребуем выполнения ИДУ при $x=0$. В результате получим

$$-\frac{iZ_0}{k}\left[\frac{d^2}{dz^2}\int_{-l}^{l}I(z')\tilde{g}_e(z,z')dz'+k^2\int_{-l}^{l}I(z')g_m(z,z')dz'\right]+E_z^{ext}(0,z)=$$

$$=-i\tau I_z(z)/(\pi a),\ |z|\le l, \tag{30}$$

где

$$\tilde{g}_{e,m}(z,z')=\frac{1}{4\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}U_{e,m}(\rho)J_0(\alpha a)\exp(i\gamma\bar{z})d\alpha d\gamma.$$

ИДУ (30) решаем методом Галеркина с базисными функциями (13). В результате решения получим систему линейных алгебраических уравнений.

Вычисление МЭ СЛАУ аналогично описанному выше.

Нетрудно записать систему ПИУ и получить ее решение методом Галеркина для системы из нескольких вибраторов.

Для вычисления диаграммы рассеяния к компонентам поля, выраженных через интегралы Фурье (27) применена асимптотическая формула [6]

$$\frac{1}{4\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}f(\alpha,\gamma)\frac{\exp(-\beta_1 y)}{\beta_1}\exp[i(\alpha x+\gamma z)]d\alpha d\gamma\approx f(\alpha_a,\gamma_a)\frac{\exp\left(-ik\sqrt{\varepsilon_1}r\right)}{2\pi r},$$

где $\alpha_a=-k\sqrt{\varepsilon_1}\sin\theta\cos\varphi, \gamma_a=-k\sqrt{\varepsilon_1}\cos\theta,\ r,\theta,\varphi$ сферические координаты, угол θ отсчитывается от вибратора, а φ - от подложки. Затем были найдены компоненты поля в сферической системе координат $E_{\theta,\varphi}(r,\theta,\varphi)=F_{\theta,\varphi}(\theta,\varphi)\dfrac{\exp\left(-ik\sqrt{\varepsilon_1}r\right)}{4\pi r/l}$.

Заключение

1. Разработаны оригинальные математические методы, алгоритмы и программы на языке С++ в среде Microsoft Visual Studio 2008 для теоретического исследования радиофизических характеристик нановибраторов.

   a. Решение краевой задачи о возбуждении вибраторов – углеродной нанотрубки на диэлектрической подложке сведено к решению парных интегральных уравнений. Использование парных интегральных уравнений предпочтительней, чем использование интегродифференциальных уравнений, так как функция Грина задачи выражается через интеграл Фурье. Методом Галеркина с Чебышевским базисом решение парных интегральных уравнений приведено к решению систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), матричные элементы которой также выражены в виде интегралов Фурье. Такое представление ядер и матричных элементов позволяет легко обойти трудности, связанные с особенностью ядер. Особенность ядра интегродифференциальных уравнений при решении парных интегральных уравнений проявляется в медленной сходимости интегралов в матричных элементах полученных СЛАУ. Улучшена сходимость этих интегралов. Показана быстрая внутренняя сходимость решения. Программы, разработанные на основе решения парных интегральных уравнений, позволяют проводить расчеты на порядок быстрее, чем программы, реализующие модифицированный метод коллокации [25- 27].

b. Решение краевой задачи о дифракции электромагнитных волн оптического диапазона на металлодиэлектрическом вибраторе - нанокристалле сведено к решению интегродифференциальных уравнений для неоднородного диэлектрического цилиндра, ядра которых представлены в виде интеграла Фурье. ИДУ решены методом, сочетающим методы Галеркина и коллокации.

c.С помощью метода приближенных граничных условий для тонкого диэлектрического слоя с учетом конечного значения диэлектрической проницаемости металлов в оптическом диапазоне, решение краевой задачи о дифракции на металлическом нановибраторе сведено к решению парных интегральных уравнений. Парные интегральные уравнения решены методом Галеркина. В полученных СЛАУ матричные элементы выражены в виде интегралов Фурье. Для обоснования достоверности и оценки точности полученных результатов получено и решено методом, сочетающим методы Галеркина и коллокации, интегральное уравнение для диэлектрического эллиптического цилиндра конечной длины.

2. Результаты исследований УНТ – нановибраторов в миллиметровом и субмиллиметровом диапазонах.

a.В миллиметровом и субмиллиметровом диапазонах имеются резонансы на АЧХ при длинах вибраторов-УНТ намного меньших длины волны в вакууме. С увеличением длины наноантенны увеличивается количество резонансов в исследуемом диапазоне частот, одновременно эффективность излучения падает. Параметры антенны - нанотрубки приближаются к параметрам обычного металлического вибратора. Таким образом, простым увеличением размеров нанотрубки добиться эффективного излучения в сантиметровом диапазоне не представляется возможным.

b. Исследовано влияние подложки на амплитудно-частотные характеристики антенны - углеродной нанотрубки. Показано, что эти характеристики можно описать, введя эффективную диэлектрическую проницаемость $\varepsilon_{ef} = \left(\varepsilon_1 + \varepsilon_2\right)/2$, только при низких частотах и малых диэлектрических проницаемостях подложки. Отмечено принципиальное изменение диаграммы направленности нановибраторов на подложке по сравнению с уединенными нановибраторами.

c.Исследованы свойства конечной решетки нановибраторов. При сближении УНТ возрастают и резонансная частота, и амплитуда рассеянного поля. Зависимость амплитуды от количества нановибраторов – нелинейная. Показано, что в см и мм диапазонах нельзя создать направленную антенную решетку из УНТ, имеющую наноразмеры .

d. Исследования частотно избирательной поверхности на основе двухмерно периодической решетки нановибраторов – УНТ показали возможность получения большого коэффициента отражения.

3. Теоретически исследованы свойства в оптическом диапазоне металлических нановибраторов и нанокристаллов - вибраторов, покрытых металлической пленкой.

a.Зависимость рассеянного поля от частоты носит резонансный характер, причем резонансные длины волн нановибраторов больше резонансных длин волн идеально проводящего вибратора такого же размера. Резонансы наблюдаются даже при толщине металлической пленки, покрывающей нанокристалл в 3-5 нм.

b. Показана возможность создания направленной антенны оптического диапазона, состоящей из конечной решетки планарных нановибраторов.

Список литературы:

1. *Дьячков П.Н.* Электронные свойства и применение нанотрубок. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний.. 2010.
2. *Slepyan G.Ya. , Maksimenko S.A. , Lakhtakia A., Yevtushenko O.M. , and Gusakov A.V.* Electrodynamics of carbon nanotubes: Dynamic conductivity, impedance boundary conditions and surface wave propagation, Phys. Rev. B 60, 17136-17149 (1999).
3. *Hanson G.W.* Fundamental Transmitting Properties of Carbon Nanotube Antennas. //IEEE Transactions on antennas and propagation, Vol.53, N.11, 2005, p. 3426-3435.
4. *Slepyan G. Ya., Shuba M. V., Maksimenko S. A., Lakhtakia A.* Theory of optical scattering by achiral carbon nanotubes, and their potential as optical nanoantennas, Phys. Rev. B 73, 195416 (2006).
5. *Лерер А.М.* Радиопередающие свойства углеродной нанотрубки - вибратора, расположенной на границе раздела диэлектриков // Вестник МУ. Серия 3. 2010. №5. С.43-49.
6. *Лерер А.М., Синявский Г.П.* Дифракция электромагнитной волны на конечной решетке углеродных нанотрубок - вибраторов, расположенных на границе раздела диэлектриков // Вестник МУ. Серия 3. 2010. №6. С. 48-53.
7. *Bharadwaj P., Deutsch B., Novotny L.* Optical Antennas. Advances in Optics and Photonics. 2009. **1.** P. 438.
8. *Климов В.В.* Наноплазмоника. Физматлит. - М.: 2010, 480 с.
9. *Климов В.В.* Наноплазмоника. Успехи физических наук. 2008. **178.** №8. С. 875.
10. *Kempa K., Rybczynski J., Huang Z., Gregorczyk K., Vidan A., Kimball B., Carlson J., Benham G., Wang Y., Herczynski A., Ren Zh.* Carbon nanotubes as optical antennae. Adv. Mater. 2007. **19.** P. 421.
11. *Salandrino A., J.Li, Engheta N.* Shaping light beams in the nanometer scale: A Yagi-Uda nanoantenna in the optical domain. Phys. Rev. B . 2007. **76.** P 245403.
12. *Huang J.S., Feichtner T., Biagioni P., Hecht B.* Impedance matching and emission properties of nanoantennas in an optical nanocircuit. Nano Lett. 2009. 9. No. 5. P. 1897.
13. *Zuev V.S., Zueva G.Ya.* Nanodipoles for an optical phased array. J. of Russian Laser Research. 2007. **28.** № 3. P. 272.
14. *Li J., Engheta N.* Core-shell nanowire optical antennas fed by slab waveguides. IEEE Trans. on Anten. and Prop. 2007. **55**. № 11. P. 3018.
15. *Kern A.M., Martin O.J.F.* Surface integral formulation for 3D simulations of plasmonic and high permittivity nanostructures. J. Opt. Soc. Am. 2009. **26**. № 4. P. 732.
16. *Лерер А.М., Махно В.В., Махно П.В., Ячменов А.А.* Применение метода приближённых граничных условий для расчета металлических периодических наноструктур. Радиотехника и электроника , 2007, т.52, №4, с. 424-430.
17. *Головачева Е.В., Лерер А.М., Пархоменко Н.Г.* Дифракция электромагнитных волн оптического диапазона на металлическом нановибраторе // Вестник МУ. Серия 3. 2011. №1. С. 6-11.
18. Лерер А.М. . Исследование свойств планарных металлических нановибраторов в оптическом диапазоне. // Радиотехника и электроника. 2011. №3. С.295-303.
19. *Лерер А.М., Клещенков А.Б., Лерер В.А., Лабунько О.С.* Методика расчета характеристик системы параллельных вибраторов при стационарном и импульсном возбуждении. // Радиотехника и электроника, 2008, т.53. № 4, С. 423.
20. *Кравченко В.Ф., Лабунько О.С., Лерер А.М., Синявский Г.П.* Вычислительные методы в современной радиофизике. М.: Физматлит. 2009. – 464 с.
21. *Хижняк Н.Г.* Интегральные уравнения макроскопической электродинамики. Наукова думка. Киев. 1986. 279 с.
22. http://www.luxpop.com
23. *Махно П. В.* Электродинамический анализ наноструктур оптического и рентгеновского диапазонов.: Дис. …канд. физ.-мат. наук. Ростов – на – Дону, Южный фед. ун-т, 2008. 151 с.
24. *Вайнштейн Л.А.*. Теория дифракции и методы факторизации. – М.: Советское Радио, 1966.– с. 432.
25. *Lerer A.M., Makhno V.V., Makhno P.V.* Calculation of properties of carbon nanotube antennas. // International Journal of Microwave and Wireless Technologies. 2010. Special issue of RF CNT. 2010, 2(6), P. 457-462.
26. *Лерер А.М., Махно В.В., Махно П.В., Шуров Г.А.* Расчет параметров наноантенн - углеродных нанотрубок.// Электромагнитные волны и электронные системы, 2010, Т. 15. № 2. с. 64-67.
27. *Лерер А.М., Махно В.В., Махно П.В.* Электродинамический анализ наноантенн миллиметрового, оптического и рентгеновского диапазонов. Lambert Academic Publishing, 2011. 192 с.