Задания

1 Задачи

Для решения следующих задач необходимо разобраться с соответствующими методами и написать программы. Каждый студент выбирает себе одну из задач. Программы желательно написать на одном из следующих языков: C/C++, Fortran, Pascal. Допускаются также Python, Java, Haskell. Допускается использовать сторонние библиотеки для быстрого преобразования Фурье, расчетов специальных функций, и матричных вычислений.

1. Написать программу для расчета рассеяния плоской волны на ограниченной кубической решетке, в узлах которой расположены диполи. В качестве примера рассмотреть систему из $50 \times 50 \times 50$ диполей, распространение плоской волны вдоль координаты Z, и построить график поляризации слоев решетки вдоль этой координаты.

2. Написать программу для расчета оптических свойств планарной многослойной структуры методами S- и T-матриц (квантовомеханический аналог - решение стационарного уравнения Шредингера для одномерного потенциала произвольной формы). Написать программу для расчета комплексных полюсов S-матрицы (см. задачу 5) и посчитать константы распространения и распределения полей плоского волновода.

3. Написать программу для расчета рассеяния плоской волны на шаре - рассеяния Ми (квантовомеханический аналог - решение стационарного уравнения Шредингера для атома водорода). Программа должна рассчитывать амплитуды полей в ближней и дальней зонах излучения, сечения рассеяния, поглощения и экстинкции. Изучить сходимость решения при различных показателях преломления сферы и отношения радиуса сферы к длине волны. Численного продемонстрировать асимптотики сечения экстинкции для больших и малых сфер.

4. Написать программу для решения задачи дифракции плоской волны на синусоидальной дифракционной решетке методом Рэлея. Исследовать сходимость решения в зависимости от глубины решетки при использовании одинарной и двойной точности.

5. Написать программу для быстрого расчета запрещенных зон фотонных кристаллов (квантовомеханический аналог - задача об электроне в периодическмо потенциале). В качестве примера рассмотреть задачу о кубическом фотонном кристалле.

6. Написать программу для расчета дифракции на решетках Фурье-модальным методом. Написать программу для расчета комплексных полюсов S-матрицы (см. задачу 2) посчитать пример резонансного пропускания волноводной решеткой.

2 Пояснения к задаче 1

Метод связанных диполей применяется в различных задачах для моделирования оптического отклика систем нанчастиц, которые в первом приближении часто можно рассматривать как взаимодействующие диполи. При этом решается самомогласованная задача о нахождении поляризуемости всех диполей во внешнем поле.

Поле осциллирущего диполя, излучащего на длине волны λ, момент которого равен $\mathbf{p}$, в точке с радиус-вектором $\mathbf{r}$ есть

$$\mathbf{E}^{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \left[\mathbf{p}\left(\frac{k^2}{r} + \frac{ik}{r^2} - \frac{1}{r^3}\right) + \mathbf{n}(\mathbf{n}\cdot\mathbf{p})\left(-\frac{k^2}{r} - \frac{3ik}{r^2} + \frac{3}{r^3}\right)\right]\exp(ikr) \tag{1}$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$, а $k = 2\pi/\lambda$. Здесь и далее неявно подразумевается гармоническая зависимость от времени $\exp(-i\omega t)$. Тогда, если рассматривается система из N точечных диполей, расположенных в точках $\mathbf{r}_k$, $k = 0, .., N-1$, электрическое поле в любой точке пространства есть сумма падающего внешнего поля и полей всех диполей:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{inc}(\mathbf{r}) + \sum_k \mathbf{E}_k^{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \tag{2}$$

Для нахождения самосогласованного поля необходимо потребовать, чтобы момент каждого из диполей системы определялся суммой внешнего поля и поля от остальных диполей в точке нахождения данного диполя при известных поляризуемостях α_k:

$$\mathbf{p}_k = \alpha_k \mathbf{E}(\mathbf{r}_k). \tag{3}$$

Тогда, записывая поле (2) в точках нахождения каждого из диполей и используя (1) и (3), можно прийти к самосогласованной системе линейных уравнений на неизвестные компоненты электрического поля в точке нахождения каждого из диполей, либо на неизвестные компоненты поляризуемостей N диполей. Размер этой системы будет $3N$, и ее можно записать в виде

$$(I - AT)E = E^{inc}. \tag{4}$$

Здесь I - единичная матрица, матрица A - диагональная, и она содержит поляризуемости диполей, а компоненты матрицы T получаются на основании уравнения (1). Можно заметить, что, если диполи расположены в узлах регулярной сетки, и если выделить в матрице T блоки 3×3, соответствующие трем компонентам полей, то состав этих блоков зависит только от разности индексов. Матрицы, элементы которых зависят от разности индексов $\{a_{mn}\} = \{a_{m-n}\}$, называют Теплицевыми. Умножение такой матрицы на вектор можно осуществить с помощью быстрого преобразования Фурье (БПФ) с асимптотической сложностью $O(N\log N)$ [1]. В рассматриваемой задаче матрица T получается трехмерной Теплицевой, поэтому для ее умножения на вектор нужно применять трехмерное БПФ. Тогда, если решать систему уравнений итерационным методом, например, методом бисопряженных градиентов, требующим на каждой итерации одного или двух матрично-векторных умножений, сложность решения всей задачи также будет $O(N\log N)$. Более подробное описание метода можно найти в разделе III статьи [2].

Поляризуемость диполей можно выбрать из физических соображений. Если рассматривается система металлических наночастиц, форма которых близка к сферической, а размер много меньше длины волны падающего излучения, можно показать, что поляризуемость должна определяться первым коэффициентом разложения в ряде Ми (см. задачу 3):

$$\alpha = 3V\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2}, \tag{5}$$

где V - объем частицы, а ε - ее диэлектрическая проницаемость.

Для решения задачи нужно написать программу для расчета поляризуемостей системы диполей, расположенных в узлах регулярной трехмерной сетки, используя решение системы уравнений с помощью БПФ. В качестве примера рассмотреть кубическую решетку диполей $50 \times 50 \times 50$, с шагом по каждой координате в 10 раз меньше длины волны и построить график зависимости поляризации слоев при возбуждении системы плоской волной.

3 Пояснения к задаче 2

4 Пояснения к задаче 3

Теория Ми описывает рассеяние плоской монохроматической электромагнитной волны на шаре с произвольным показателем преломления. Несмотря на идеализацию, это решение применяется повсеместно от атмосферной оптики до микрофлуидики и технологий оптических пинцетов для оценки величин электромагнитных полей, рассеянных различными частицами, в дальней и ближней зонах излучения. Такая популярность обусловлена простотой реализации программы для расчета полей и весьма малыми вычслительными затратами на получения решений.

Теория Ми основана возможности разделения переменных в уравнении Гельмгольца в сферических координатах (например, см. гл. 5 в [3], а также файл “mie theory.pdf”).

5 Пояснения к задаче 4

6 Пояснения к задаче 5

7 Пояснения к задаче 6

Список литературы

[1] A. Townsend, “Matrix-vector multiplication using the fft.” `http://math.mit.edu/icg/resources/teaching/18.085-spring2015/toeplitz.pdf`.

[2] G. W. Mulholland, C. F. Bohren, and K. A. Fuller, “Light scattering by agglomerates: coupled electric and magnetic dipole method,” *Langmuir*, vol. 10, p. 2533, 1994.

[3] . . К. Борен, *Поглощение и рассеяние света малыми частицами.* Москва, Мир, 1986.