

Міністерство освіти, науки, молоді та спорту України  
Харківський національний університет радіоелектроніки

**Ілляшенко Людмила Миколаївна**

УДК 537.87

**ПЛАЗМОННІ РЕЗОНАНСИ  
СКЛАДНИХ НАНОСТРУКТУР**

**01.04.03 – радіофізика**

**АВТОРЕФЕРАТ**

дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Харків – 2012

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Харківському національному університеті радіоелектроніки Міністерства освіти і науки, молоді та спорту України.

**Науковий керівник:**

доктор фізико-математичних наук, професор  
**Нерух Олександр Георгійович**,  
Харківський національний університет радіоелектроніки  
Міністерства освіти і науки, молоді та спорту України,  
завідувач кафедри вищої математики.

**Офіційні опоненти:**

доктор фізико-математичних наук, професор  
**Просвірнін Сергій Леонідович**,  
Радіоастрономічний інститут НАН України,  
завідувач відділом теоретичної радіофізики (м. Харків)

доктор фізико-математичних наук, професор  
**Маслов Вячеслав Олександрович**,  
Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна  
Міністерства освіти і науки, молоді та спорту України,  
професор кафедри квантової радіофізики.

Захист відбудеться “\_\_\_\_\_” \_\_\_\_\_ 2012 р. о \_\_\_\_\_ годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 64.052.03 у Харківському національному університеті радіоелектроніки Міністерства освіти і науки, молоді та спорту України за адресою: 61166, м. Харків, просп. Леніна, 14.

З дисертацією можна ознайомитися у бібліотеці Харківського національного університету радіоелектроніки Міністерства освіти і науки, молоді та спорту України за адресою: 61166, м. Харків, просп. Леніна, 14.

Автореферат розісланий “\_\_\_\_\_” \_\_\_\_\_ 2012 р.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради



В.М. Безрук

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми.** В останній час чітко позначилася нова тенденція в розвитку сучасної радіофізики – це перехід до значно менших за розмірами антенних приладів з можливістю збереження принципів дії традиційних антен, таких як Уда-Ягі, рамкові та патч антени, але зі здатністю приймання та передачі електромагнітних сигналів з більшими частотами, включаючи мікрохвильові, інфрачервоні та навіть частоти оптичного випромінювання. Використання оптичних антен в порівнянні з традиційними дає ряд переваг, а саме, прилади стають легше, дешевше, компактніше. Зменшення розмірів стало можливим завдяки використанню нетрадиційних матеріалів з особливими електромагнітними властивостями, а саме діелектриків, напівпровідників та дорогоцінних металів, таких як золото, срібло і метали платинової групи. В наночастках таких металів можуть збуджуватися електромагнітні резонанси, які відомі як *плазмонні резонанси*. Тому оптичні антени стали відомими як *плазмонні наноантени*, а задачі, що включають дослідження процесів розповсюдження, розсіювання та поглинання оптичних хвиль в структурах при наявності плазмонних резонансів сформували нову галузь сучасної науки – *плазмоніку*. Завдяки значній чутливості таких резонансів до змін в зовнішньому середовищі найприоритетнішим напрямком розвитку цієї галузі стає використання плазмонно-резонансних структур та приладів в сучасній медицині, фармацевтиці, а також при створенні біологічних та хімічних сенсорів. Разом з тим, відомі наближені і строгі електродинамічні методи не задовольняють сучасним вимогам теорії і практики при їх використанні для розв'язку нових задач. Одні не мають достатньої точності, то му що при наявності плазмонних ефектів амплітуда поля може значно зростати в дуже маленькій комірці простору, лінійні розміри якої навіть менше довжини хвилі збудження резонансу. Інші не дозволяють враховувати ефекти взаємодії деталей в складних конфігураціях, тому що були розроблені для відособлених об'єктів складної форми або не дозволяють враховувати комплексно значні параметри плазмонних матеріалів, що залежать від довжини хвилі. Таким чином, для проектування нових приладів та систем на основі використання електромагнітних ефектів нетрадиційних матеріалів нагальною стала потреба в створенні ефективних методів дослідження електромагнітних полів в системах різноманітних конфігурацій наночасток, властивості яких залежать від довжини хвилі, що робить тему досліджень цієї дисертаційної роботи *актуальною*.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Дисертаційна робота пов'язана з виконанням планових науково-дослідних робіт кафедри вищої математики Харківського національного університету радіоелектроніки в межах держбюджетної теми: «Теоретичні основи мікроелектромеханічних систем, проектування і технології їх виробництва для гнучких інтегрованих систем» (номер держреєстрації 0110У002594) відповідно технічно ум завданню д/б № 2 4 8 «Моделювання нестационарних електромагнітних процесів в неоднорідних циліндричних діелектричних структурах». Частина роботи була виконана за планом проекту

інтернаціональної організації INTAS «Чисельне моделювання оптичних сенсорів та призмових елементів зв'язку з використанням методів інтегральних рівнянь» (номер реєстрації нагородної стипендії для молодих вчених YSF 2001/2-11, 2002-2004), а також за планом проекту швейцарського національного наукового фонду SNSF (грант 200021\_119976, 2008-2011) відповідно до теми «Спектральні методи Гальоркіна граничних інтегральних рівнянь для плазмонних наноструктур». Автор була виконавцем зазначених робіт.

**Мета і задачі дослідження.** *Метою роботи є дослідження особливостей розсіювання електромагнітних хвиль системами дисперсійних часток складної форми. Відповідно до поставленої мети потрібно вирішити наступні задачі:*

- розробити чисельно-аналітичні алгоритми та програмні засоби для моделювання поширення електромагнітних хвиль для різних типів конфігурацій наноструктур, в яких матеріальні параметри часток (діелектрики, напівпровідники та дорогоцінні метали), а також зовнішніх середовищ (біологічні рідини та дорогоцінні метали) мають бути залежними від довжини хвилі;
- побудувати метод параметризації границь, що дозволяє його застосування сумісно зі спектральним методом граничних інтегральних рівнянь (ГІР) для обчислення характеристик електромагнітного поля в ближній та дальній зонах;
- побудувати метод аналітичної регуляризації для випадку частки, заповненої диспергуючим середовищем, що подібна методам регуляризації, запропонованих Аткинсоном для різних інтегральних рівнянь;
- зробити спектральну дискретизацію, регуляризацію та параметризацію ГІР, зводячи їх до інтегральних рівнянь Фредгольму 2-го роду на колі, для яких система поліномів Фур'є є базисом при застосуванні метода Гальоркіна;
- чисельно дослідити збіжність всіх апроксимацій алгоритму окремо, та на основі аналізу похибки всього алгоритму знайти найкращий метод вибору сукупності числових параметрів задачі відповідно набору фізичних параметрів;
- провести порівняння точності результатів з результатами інших сучасних числових методів у випадках, коли можливе таке порівняння;
- застосувати розроблений алгоритм для розрахунку характеристик електромагнітних полів і дослідити особливості збудження резонансів різних типів в залежності від геометричних та матеріальних параметрів наноструктур.

*Об'єкт дослідження* – процеси, які виникають в наноструктурах завдяки електромагнітній взаємодії диспергуючих компонентів, включаючи періодичні та неперіодичні структури шаруватих та однорідних наночасток.

*Предмет дослідження* – електромагнітні характеристики дальнього і ближнього електромагнітного поля в наноструктурах.

*Методи дослідження.* Для розрахунку електромагнітних полів і вивчення їх особливостей розроблено спектральні методи Фур'є-Гальоркіна граничних інтегральних рівнянь. Для отримання контрольних результатів використано метод кінцевих різниць в часовій області (FDTD), метод кінцевих елементів (FEM), метод допоміжних джерел (MAS) та метод мультипольних джерел (MMP).

**Наукова новизна одержаних результатів.**

- Вперше для розв'язку задач з плазмонними матеріалами сформульовано інтегральні рівняння на базі непрямого методу ГІР з можливістю використання

спектральної схеми дискретизації Фур'є-Гальоркіна в комбінації з регуляризацією. Побудовано алгоритми розв'язання таких задач та розроблено програмний комплекс для автоматизації моделювання, який на відміну від інших сучасних пакетів прикладних програм дозволяє на базі єдиного підходу досліджувати ефекти взаємодії електромагнітного поля всіх можливих конфігурацій плазмонно-резонансних наноструктур.

– Вперше запропонована аналітична регуляризація отриманих сингулярних інтегральних ядер, що на відміну від інших, враховує дисперсійні властивості плазмонних матеріалів, заданих не тільки аналітичною функцією, а також експериментальними даними, та дозволяє звести всі параметризовані ГІР до рівнянь Фредгольму 2-го роду.

– Набула подальший розвиток теорія спектральних методів для задач з багатокутними границями та розроблено універсальний метод параметризації границі довільної форми з використанням відображення та склеювання частин різних параметризацій, що дозволило вперше застосувати спектральний метод Фур'є-Гальоркіна для аналізу таких структур.

– Вперше сформульовано метод ГІР для дослідження структур фотонних кристалів, який на відміну від розповсюджених методів з використанням періодичної формули Гріна, дозволив прийняти до уваги скінчене число елементів структури без обмежень на розміри, форми та орієнтацію кожного елемента.

– Вперше отримані аналітичні вирази для характеристик електромагнітного поля, що надало можливість ефективного пошуку резонансів в широкий смузі довжин хвиль з врахуванням дисперсійних властивостей плазмонних матеріалів та встановлення їх залежності від розмірів, форми, властивостей матеріалів та зовнішнього середовища, що дало можливість запропонувати засоби зсування резонансної довжини хвилі в інші смуги довжин хвиль. Вперше показана поява нових резонансів іншого походження та збільшення амплітуди резонансно-розсіяного поля в шаруватих частках складної форми.

– Вперше показана експоненційна залежність похибки розв'язку від кожного параметру, а саме числа Фур'є гармонік, точок інтерполяції та усічення матриці та показана можливість розв'язку задач с багатокутними областями спектральним методом ГІР, що приводить до експоненційної збіжності розв'язку.

### **Практичне значення одержаних результатів.**

– Створений в роботі пакет прикладних програм дозволяє ефективно розраховувати електромагнітні поля, а також досліджувати процеси збудження резонансів та поширення електромагнітних хвиль в різноманітних конфігураціях систем, що складаються з взаємодіючих діелектричних, напівпровідникових або плазмонних елементів та знаходяться в різноманітних середовищах.

– Результати роботи можуть бути використані як у наукових дослідженнях, так і при виробництві наноструктур, при моделюванні оптичних антен, а також в інших галузях, де експлуатуються прилади, принцип дії яких засновано на використанні резонансів в частках металів та

діелектриків. Це можуть бути пристрої контролю стану зовнішнього середовища, продуктів харчування та безпеки при їх виробництві; ідентифікації біологічно шкідливих агентів; телекомунікаційні, інформаційні та обчислювальні технології; фотодетектори, сонячні елементи, оптичні та електрохімічні сенсори; відеотехніка та нанолітографія; авіаційні, космічні та оборонні застосування; нанохімія, каталіз, медична діагностика та терапія, пошкодження клітин злоякісних пухлин за рахунок лазерного нагріву введених в них наночасток, їх використання як флуоресцюючих біомаркерів в мікроскопії та контрастуючих агентів в томографії.

– Дослідження похибки чисельного розв'язку дозволило розробити техніку збалансованого вибору параметрів для отримання *найточнішого* рішення.

– Запропоновані засоби зсунення резонансної довжини хвилі металевої частини завдяки встановленим в дисертаційній роботі залежностям від розмірів, форми, властивостей матеріалів та зовнішнього середовища практично необхідні для ефективного синтезу наноструктури, так щоб резонансна довжина хвилі ідеально відповідала лазеру для збудження її резонансів.

– Запропоновані засоби маніпулювати електромагнітним полем наночасток, дозволяють спеціальний синтез структур, а саме: інтенсивне поглинання енергії світла наночастками приводить до їх швидкого нагріву, що дозволяє використовувати резонансно-поглинаючі частки для терапії різних захворювань; а інтенсивне розсіювання дозволяє їх побачити та навіть ідентифікувати резонансну довжину хвилі за кольором, що дає змогу використовувати резонансно-розсіювачі частки для надчутливої візуалізації різних процесів.

**Особистий внесок здобувача.** Основні результати дисертації, перш за все створення нових спектральних методів Фур'є-Гальоркіна для параметризованих ГПР, їх реалізація у вигляді пакету комп'ютерних програм та використання для дослідження електромагнітних полів в складних структурах, включаючи плазмонно-резонансні наноструктури, були одержані дисертантом особисто.

В роботах [1, 16, 17, 18], опублікованих в співавторстві, особистий внесок автора полягає в розробці спектрального методу Чебишова-Гальоркіна для розв'язку задач розсіяння хвиль на багатокутному циліндрі.

В роботах [2, 3, 22], виконаних **особисто** автором, поставлені та розв'язані електродинамічні задачі для діелектричних ізольованих часток (без дисперсії), розроблено спектральний алгоритм Фур'є-Гальоркіна, за допомогою якого обчислені характеристики електромагнітних полів в дальній та в ближній зонах.

В роботах [4, 19, 20, 25, 26], опублікованих в співавторстві, автором були поставлені та розв'язані задачі дослідження електромагнітних процесів за допомогою модифікації чисельно-аналітичного алгоритму, розробленого в [2, 3].

В роботах [5-7, 27, 28, 29, 30], виконаних **особисто** автором, поставлені та розв'язані задачі дослідження оптичних ефектів в структурах з дисперсійних матеріалів, розроблені нові спектральні методи Фур'є-Гальоркіна та проведено чисельний аналіз властивостей ізольованих плазмонних часток складної форми та систем взаємодіючих часток з GPP (Gap Plasmon Polariton).

В роботах [8, 9, 34], опублікованих в співавторстві, автором проведено дослідження ефективності її алгоритмів, розроблених для розв'язку задач

плазмонікі, в порівнянні з методами співавторів. Поставлені та розв'язані тестові задачі з ефектами SPP (Surface Plasmon Polariton), виконані обчислення характеристик поля в дальній та в ближній зонах. Дисертант також приймала участь в проведенні фізичного та чисельного аналізу отриманих результатів і формулюванні висновків.

– В роботах [10, 36], опублікованих в співавторстві, автором були поставлені та розв'язані задачі дослідження ефектів WPP (Wedge Plasmon Polariton) та CPP (Channel Plasmon Polariton) за допомогою модифікації алгоритму, розробленого в [6], за рахунок подальшого розвитку методу конформних відображень для параметризації границь.

В роботах [11, 12, 39, 40], опублікованих в співавторстві, автором були поставлені та розв'язані задачі дослідження систем наночасток, за допомогою модифікації алгоритму, розробленого в [7], за рахунок його комбінації з методом мультипольних джерел, розробленого співавтором. Дисертант приймала участь в обговоренні результатів, формулюванні висновків та підготовці публікації.

В роботах [13, 14, 41, 43, 44], опублікованих в співавторстві, дисертантом були поставлені та розв'язані задачі дослідження плазмонних ефектів в шаруватих структурах, розроблено новий чисельно-аналітичний алгоритм та доведено його переваги в порівнянні з методом MMP співавтора. Дисертант також приймала участь в обговоренні результатів та підготовці публікацій.

В роботі [15], виконаній **особисто** автором, були розв'язані задачі дослідження плазмонних ефектів золотих нанорамок в різних біологічних рідинах.

В роботах [21, 23, 24], виконаних в співавторстві, автором були розв'язані задачі дослідження процесів розповсюдження хвиль в структурах фотонних кристалів, розроблено чисельно-аналітичний алгоритм та створена комп'ютерна програма для аналізу довільної сукупності багатокутних циліндрів.

В роботах [31-33, 35, 37, 38, 42, 45] були розроблені інші прямі та непрямі спектральні методи ГПР та з'ясовано їх переваги для різних галузей науки.

**Апробація результатів дисертації.** Результати роботи доповідалися і обговорювалися на наступних міжнародних конференціях і симпозіумах:

International Conferences on Mathematical Methods in Electromagnetic Theory ММЕТ-2000 (Україна, Харків, 12 – 15 вересня 2000 р.) та ММЕТ-2002 (Україна, Київ, 10 – 13 вересня 2002 р.); 3<sup>rd</sup> и 4<sup>th</sup> International Conference on Transparent Optical Networks ICTON 2001 (Польща, Краків, 18 – 21 червня 2001 р.) и ICTON 2003 (Польща, Варшава, 29 червня – 3 липня 2003 р.); 7<sup>th</sup> International Workshop on Acoustics of Non-Homogeneous Media (Росія, Новосибірськ, 20 – 23 квітня 2002 р.); 11<sup>th</sup> International Workshop on Optical Waveguide Theory and Numerical Modeling OWTNM 2003 (Чехія, Прага, 3 – 5 квітня 2003 р.); Mediterranean Microwave Symposium MMS (Єгипет, Каїр, 6 – 8 травня 2003 р.); 8<sup>th</sup> International Workshop on Direct and Inverse Problems of Electromagnetic and Acoustic Wave Theory DIPED-2003 (Україна, Львів, 23 – 25 вересня 2003 р.); 4<sup>th</sup> International Conference on Antenna Theory and Techniques ICATT'03, (Україна, Севастополь, 9 – 12 вересня 2003 р.); 6<sup>th</sup> European conference on Numerical Mathematics and Advanced Applications ENUMATH 2005, (Іспанія, Сантьяго де Компостела, 18 –

22 липня 2005 р.); 3<sup>rd</sup> International Workshop on Numerical Methods for Optical Nano Structures, (Швейцарія, Цюрих, 9 – 10 липня 2007 р.); 5<sup>th</sup>, 6<sup>th</sup>, 7<sup>th</sup> и 8<sup>th</sup> Workshops on Fast Boundary Element Methods in Industrial Applications, (Австрія, Соеллерхауз, 5 – 8 жовтня 2007 р., 2 – 5 жовтня 2008 р., 15 – 18 жовтня 2009 р., 30 вересня – 3 жовтня 2010 р.); International Symposium on Optomechatronic Technologies ISOT 2007, (Швейцарія, Лозанна, 8 – 10 жовтня 2007 р.); 5<sup>th</sup> European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering ECCOMAS 2008 (Венеція, Італія, 30 червня – 5 липня 2008 р.); 5<sup>th</sup> International Workshop BEM on the SAAR, (Німеччина, Саарбрюккен, 26-29 травня 2008 р.); 2<sup>nd</sup> International Workshop on Theoretical and Computational Nanophotonics (TaCoNa-Photonics 2009), (Німеччина, Бад-Хоннеф, 28 – 30 жовтня 2009 р.).

SPIE Europe Congresses: Conference on Optical Systems Design (Великобританія, Глазго, 2 – 5 вересня 2008 р.); Conference on Metamaterials (Франція, Страсбург, 7 – 11 квітня 2008 р.); Conference on Optical Modelling and Design & Nanophotonics conference (Бельгія, Брюссель, 12-16 квітня 2010 р.); Conference on Security + Defence (Франція, Тулуза, 20 – 23 вересня 2010 р.); Conference on Microtechnologies & Conference on Optics + Optoelectronics (Чехія, Прага, 18 – 20 квітня 2011 р.). Науковий семінар ім. М.А. Хижняка "Интегральные уравнения макроскопической электродинамики" (26 січня 2012 р., м. Харків).

**Публікації.** Основні наукові результати дисертації опубліковані в 45 наукових роботах, серед яких статей в фахових журналах і збірниках наукових праць – 15, тез доповідей на наукових конференціях – 30.

**Структура і обсяг дисертації.** Дисертація складається із вступу, п'яти розділів, висновків, списку використаних джерел (172 найменувань), списку публікацій автора и трьох додатків. Повний обсяг роботи - 192 с., з них основного тексту - 135 с., 1 таблиця, 182 рисунка, з них 34 на 13 окремих сторінках.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми, сформульовано мету та задачі досліджень, визначені об'єкт, предмет та методи досліджень, а також зв'язок дисертаційної роботи з науковими програмами, планами та темами, показано наукову новизну та практичну цінність одержаних результатів, наведено дані про їх апробацію та публікацію, висвітлено особистий внесок автора в публікаціях, виконаних в співавторстві, наведено структуру та анотацію розділів роботи.

В **першому розділі** «Огляд літератури і вибір напрямку дослідження» наводиться огляд сучасного стану техніки антенних пристроїв, принципів моделювання нових оптичних антен з плазмонами резонансами, різноманітність плазмонних ефектів в залежності від геометричних конфігурацій та властивостей матеріалів, з'ясовано інші галузі можливого використання плазмонних структур.

Зазначені розв'язані на сьогодні задачі, визначене коло нерозв'язаних питань, показано що всі нерозв'язані задачі даної категорії можуть бути описані за допомогою рівнянь Максвелла з комплекснозначними параметрами матеріалів  $\varepsilon(\lambda)$ ,  $\mu(\lambda) \in \mathbb{C}$ , що залежать від довжини хвилі  $\lambda$ . Проаналізовані існуючі числові та аналітичні методи дослідження фізичних особливостей поширення,



розсіювання та поглинання електромагнітних хвиль, а також пояснюється значення та переваги чисельно-аналітичних методів, до категорії яких належать *спектральні методи*. Основна увага приділялася методам вивчення поширення електромагнітних хвиль в складних наноструктурах з можливістю появи плазмонних резонансів. Обговорені методи поділялися на методи, що базуються на дискретизації області та методи, що базуються на дискретизації границь. Вказано недоліки існуючих підходів. Обґрунтовується неефективність використання методів дискретизації області для аналізу резонансно-розсіяних полів, а саме алгоритмів, побудованих за допомогою FDTD та FEM, тому що вони потребують допоміжних зусиль для виконання на штучній границі умов, еквівалентних умові Зомерфельда, і це також впливає на точність чисельного розв'язку задач. Показано перспективність і ефективність використання як прямих, так і непрямих методів граничних інтегральних рівнянь (ГІР) при розв'язанні задач в необмежених областях. З'ясовано, що спектральна дискретизація ГІР може дозволити зменшити комп'ютерні витрати та збільшити точність чисельного результату у порівнянні з класичними засобами дискретизації, на яких базуються методи граничних елементів. Наведені три категорії спектральних схем дискретизації та з'ясовані переваги спектральних методів Гальоркіна над методами Тау та колюцій для розв'язку задач електродинаміки. Доведено необхідність вибору базисних функцій в залежності від геометрії структури. Показано, що перспективним підходом є використання поліномів Фур'є. На основі цього виділено напрямки, що вимагають подальшого дослідження для розробки нових спектральних методів ГІР та створення чисельно-аналітичних алгоритмів на їх основі для розв'язку актуальних задач дослідження розповсюдження резонансно-розсіяних хвиль в складних наноструктурах взаємодіючих часток з дисперсією.

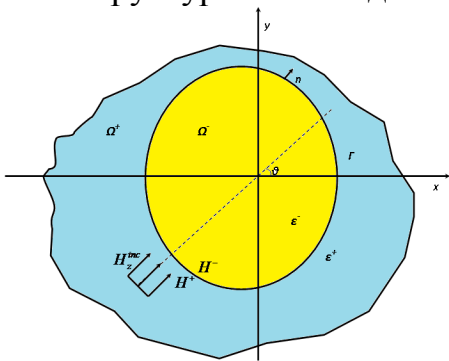


Рис. 1. Геометрія задач розсіяння хвиль у випадку Н-поляризації для однорідної частки°.

У **другому розділі** «Спектральний метод Фур'є-Гальоркіна для електромагнітних полів в середовищі з однорідним лінійним діелектриком» наведені основні положення розробленого методу та з'ясовано принципи побудови чисельно-аналітичного алгоритму на його основі. У першому підрозділі загальна електродинамічна задача сформульована у вигляді хвильових рівнянь для поперечних та повздовжніх компонент поля з крайовими умовами на границі області  $\Gamma = \bar{\Omega}^-$ , де  $\Omega^-$  позначає внутрішню область, та умовою Зомерфельду на нескінченності. Середовище у внутрішній та в зовнішній області  $\Omega^+ = \mathbb{R}^2 \setminus \bar{\Omega}^-$

характеризується хвильовими числами  $k^\pm = k\sqrt{\varepsilon^\pm \mu^\pm}$ . З'ясовано різні шляхи зведення крайової задачі до системи ГІР за допомогою функцій Гріна  $G^\pm(\vec{r}, \vec{r}')$ , серед яких прямі та непрямі методи ГІР. Проаналізовані властивості криволінійних інтегралів, що з'являються в кожному випадку. Обрано *непрямий метод*, що базується на представленні полів у вигляді потенціалів

$S^\pm$  простого шару (1) з невідомими функціями щільностей розподілу  $\sigma^\pm(\vec{r})$  на границі  $\Gamma$ . В порівнянні з іншими методами він приводить до системи ГПР (2), чисельний розв'язок якої можна отримати з найменшою кількістю алгебраїчних дій завдяки найменшій кількості інтегралів в цілому, можливості регуляризації (1) та відсутності сингулярностей в (3) при наявності параметризації границь та відомих функцій  $f(\vec{r})$  та  $g(\vec{r})$  відповідно до джерела випромінювання.

$$(S^\pm \sigma^\pm)(\vec{r}) = \int_{\Gamma} \sigma^\pm(\vec{r}') G^\pm(\vec{r}, \vec{r}') d\Gamma' = \frac{i}{4} \int_{\Gamma} \sigma^\pm(\vec{r}') H_0^{(1)}(k^\pm |\vec{r} - \vec{r}'|) d\Gamma', \quad \vec{r} \in \Gamma, \quad (1)$$

$$\begin{pmatrix} \frac{-S^-}{p^-} \left( \frac{I}{2} - K^- \right) & \frac{S^+}{p^+} \left( \frac{I}{2} + K^+ \right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma^-(\vec{r}) \\ \sigma^+(\vec{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(\vec{r}) \\ g(\vec{r}) \end{pmatrix}, \quad \vec{r} \in \Gamma, \quad (2)$$

$$(K^\pm \sigma^\pm)(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} \sigma^\pm(\vec{r}') \frac{\partial}{\partial \vec{n}(\vec{r})} H_0^{(1)}(k^\pm |\vec{r} - \vec{r}'|) d\Gamma' = \frac{-k^\pm}{4\pi} \int_{\Gamma} \sigma^\pm(\vec{r}') \frac{\vec{n}(\vec{r})(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} H_1^{(1)}(k^\pm |\vec{r} - \vec{r}'|) d\Gamma'. \quad (3)$$

У другому підрозділі наведені засоби *параметризації* границь та розроблено новий універсальний метод, за допомогою відображень, включаючи конформне відображення зовнішності контурів частки на зовнішність кола, та склеювання частин різних параметризацій так, щоб  $\vec{r} = (x(t), y(t)) : [0, 2\pi) \rightarrow \Gamma \subset \mathcal{R}^2$ ,  $|\vec{r}'(t)| \neq 0$ , та з'явилась можливість використання поліномів Фур'є для дискретизації ГПР.

Розглянуті та проаналізовані різні шляхи регуляризації сингулярностей інтегральних ядер. Найкращою та найбільш придатною виявлено *аналітичну регуляризацію*, яка базується на використанні потенціалів простого шару для представлення полів у зовнішності / внутрішності диску з врахуванням розмірів самої частки та дисперсійних властивостей плазмонних матеріалів, що дозволяє проводити дослідження оптичних властивостей структур в широкий смугі довжин хвиль. За допомогою *спектральної дискретизації Фур'є-Гальоркіна* системи параметризованих ГПР зведено до системи лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР), елементи якої обчислено за допомогою швидкого перетворення Фур'є (FFT). Отримано аналітичні вирази для характеристик поля в дальній та ближній зоні з використанням розв'язку СЛАР та параметризації границь, що надало можливість прискорити обчислення всіх характеристик шляхом додаткового використання FFT.

В додатку детально описана реалізація розробленого алгоритму у вигляді пакету програм для автоматизації дослідження електромагнітних властивостей наноструктур. Програми дозволяють одночасно виконувати декілька числових експериментів застосовуючи різні розрахункові модулі та одночасно будувати візуалізацію даних, серед яких є ті, що використовуються декілька разів без змін, та зберігаються у процесі обробки та накопичення результатів.

**Третій розділ** «Електромагнітні поля в однорідних діелектричних частках довільної форми» присвячений числовій реалізації розробленої моделі, дослідженню та аналізу електромагнітних ефектів у конкретних діелектричних та плазмонних структурах, що застосовуються на практиці при побудові оптичних приладів.

У першому підрозділі розв'язана задача дифракції електромагнітних хвиль на діелектричних призмах. Розглянуті рівнобічні, опуклі та угнуті призми. Отримані та проаналізовані діаграми напрямленості розсіяного поля та поперечники повного та оберненого розсіювання. В результаті проведеного аналізу з'ясовані засоби мінімізації енергії розсіювання хвиль структурою за рахунок вибору форми та орієнтації по відношенню до джерела випромінювання. Показано можливість обчислення резонансних довжин хвиль діелектричних структур та амплітуд резонансно-розсіяного поля в ближній зоні за допомогою модифікації розробленого алгоритму, та наведені результати розрахунків.

У другому підрозділі побудовано чисельно-аналітичний алгоритм для аналізу властивостей плазмонних часток, коли залежність їх діелектричної проникності від довжини хвилі задана аналітично. Досліджені властивості електромагнітних полів круглих та еліптичних стержнів, призм різної форми, серповидні нанотрубки, а також прямокутні антени с V-дефектами, перспективи використання яких з'ясовано. Спочатку проведено порівняння результатів запропонованого спектрального методу з найпоширенішими на сьогодні обчислювальними методами електродинаміки для дослідження плазмонних ефектів, а саме FDTD, FEM, MMP. В усіх випадках отримано збіг результатів, що свідчить про коректність запропонованої моделі та її числової реалізації. Показано, що перевагами нового спектрального методу є більш природний опис поведінки електромагнітного поля біля границь наночасток, а також можливість моделювання плазмонних часток в різних типах зовнішніх середовищ, у тому числі біологічних рідинах та навіть плазмонних металах, за допомогою одного и того ж самого алгоритму завдяки автоматичному урахуванню умови Зомерфельду.

З результатів розрахунків розробленим алгоритмом, представлених на рис. 2, вбачається можливість збільшити амплітуду розсіяного поля завдяки вибору форми. В даному випадку це показано на прикладі зменшення товщини та пошкодження симетрії, поступово переходячи від круглої форми до еліптичної та серповидної зі збереженням усіх інших параметрів.

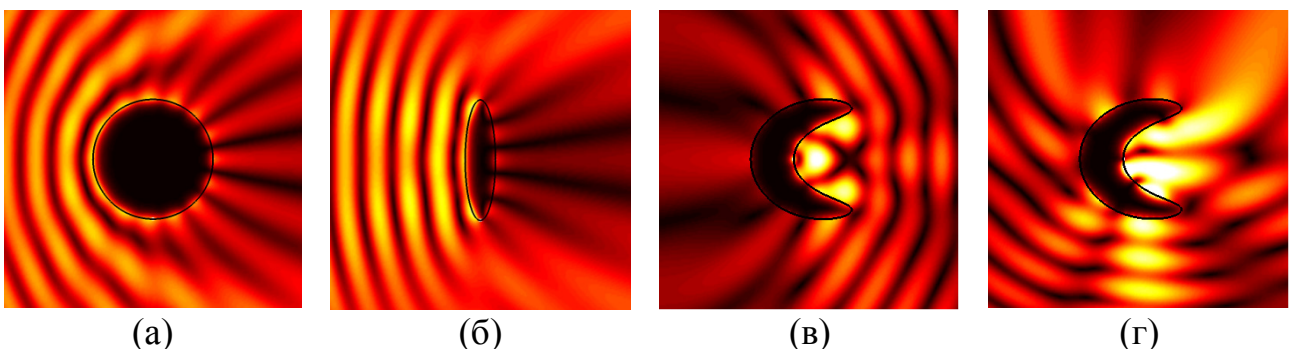


Рис. 2. Амплітуда магнітного поля для срібних часток ( $r=400$  нм,  $\lambda=413$  нм,  $\varepsilon=-4.42+0.73i$ ). Залежність від форми: (а) круглий, (б) еліптичний, (в) & (г) серповидний поперечні розрізи. Залежність від орієнтації по відношенню до джерела випромінювання: (а) & (б)  $\gamma=0^\circ$ , (в)  $\gamma=180^\circ$ , (г)  $\gamma=74^\circ$ .

При цьому показано, що серповидна форма надає додаткові можливості збільшення амплітуди завдяки присутності заглиблення та загострення кінців в одній структурі, що також можна дослідити обраховуючи характеристики поля в залежності від напрямку випромінювання, як на рис. 3 (а).

Плазмонний резонанс часто ідентифікують, обчислюючи характеристики поля як функції від довжини хвилі, рис. 3 (б-г). В роботі з'ясовано, що в кожній точці простору залежність амплітуди поля від довжини хвилі різна, і максимальні значення цієї функціональної залежності зсунуті суттєво, що показано для зони освітлення срібної еліптичної трубки на рис. 3 (в) та зони її тіні на рис. 3 (г).

Енергія поля, розсіяна в ліву півплощину, в праву півплощину та повний поперечник розсіювання також мають різні максимуми, рис. 3 (б), тому недостатньо обраховувати лише одну з цих характеристик для того щоб робити висновки про резонансно-розсіяне поле плазмонної наноструктури. Потрібен аналіз всіх таких залежностей, що можливе лише при наявності швидкого та надійного алгоритму обчислень.

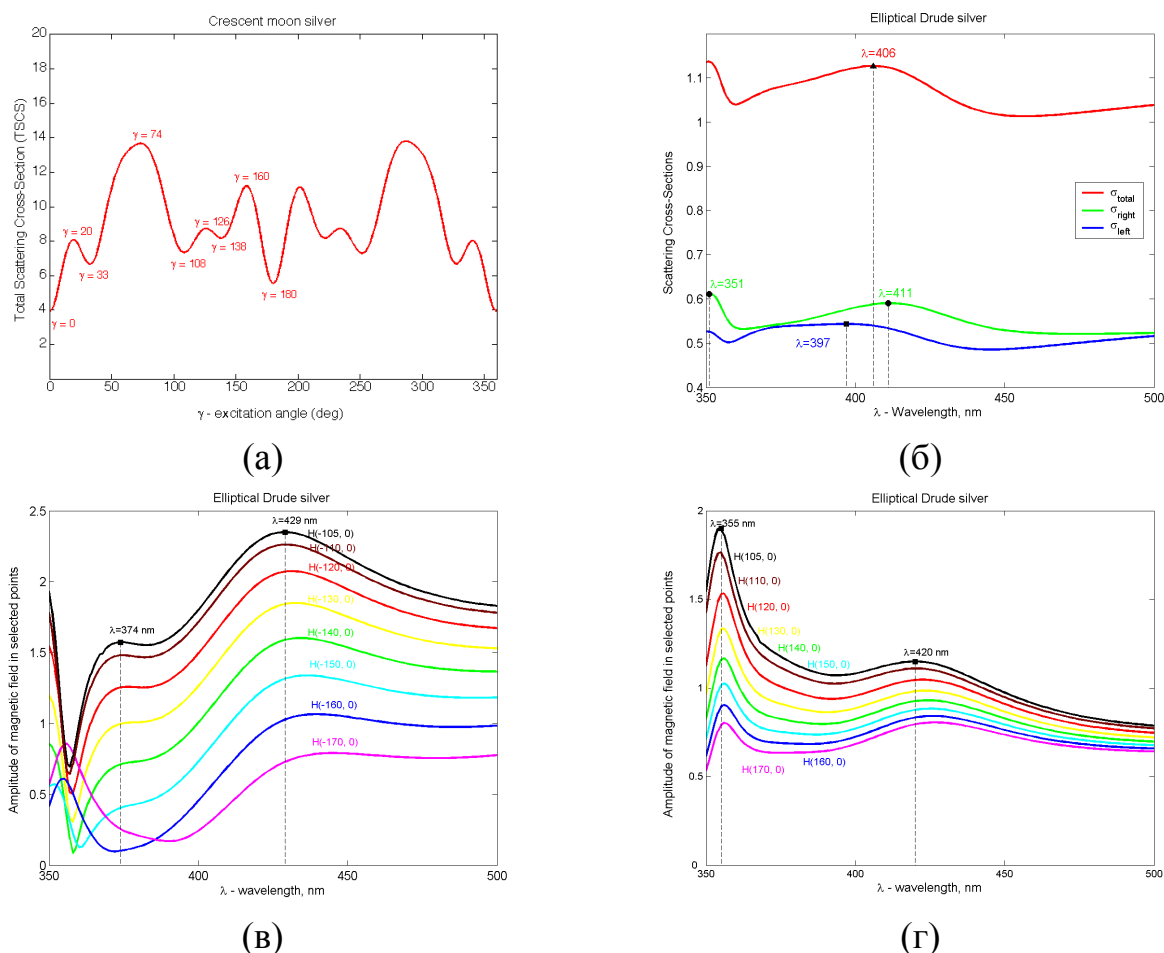


Рис. 3. Повний поперечник розсіювання (а) для срібної трубки з серповидним ( $r=400$  нм,  $\epsilon=-4.42+0.73i$ ) поперечним розрізом як функція від напрямку хвилі  $\lambda=413$  нм джерела випромінювання; (б) для еліптичного стержня ( $a=100$  нм,  $b=400$  нм) та розсіювання в ліву та праву півплощини, як функції від довжини хвилі, коли плоска електромагнітна хвиля напрямлена вздовж вектору (1,0). Амплітуда магнітного поля в декількох обраних точках на осі X, як функції від довжини хвилі джерела випромінювання в зоні максимумів (в), мінімумів (г).

У третьому підрозділі дослідженні особливості поведінки електромагнітних полів в дисперсійних частках, коли залежність матеріальних параметрів від довжини хвилі задано таблично, відповідно до експериментальних даних. Завдяки доведеній перспективі використання виступів та заглиблень в одній структурі, досліджено частки з формами зірок, заданих параметрично формулами  $x(t) = r(t) \sin t$ ,  $y(t) = r(t) \cos t$ ,  $r(t) = R(1 + d \cos \alpha t)(1 + d)$ , з різними параметрами  $d$  та  $\alpha$  для того щоб з'ясувати залежність оптичних характеристик від форми. Використано матеріальні параметри і золота, і срібла для того, щоб додатково з'ясувати залежність від властивостей обраних матеріалів. З аналізу результатів розрахунків, вбачається збільшення енергії розсіяного поля в дальній зоні при зменшенні товщини “променів” та збільшенні заглиблень. При дослідженні властивостей поля в ближній зоні в усіх випадках вбачається значне збільшення амплітуди поля *локально* в околі заглиблень та виступів. Також з'ясовано, що срібні зірки можна зробити більш яскравими, ніж золоті, тому їх використання для моделювання оптичних приладів більш перспективно, в той час коли використання золотих нанозірок більш придатне для медичних досліджень завдяки їх хімічним властивостям.

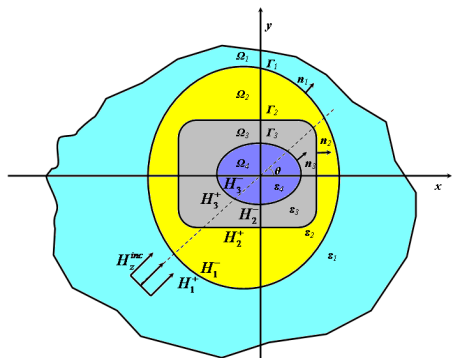


Рис. 4. Геометрія задач розсіяння хвиль у випадку Н-поляризації для шаруватої частки<sup>о</sup>.

В четвертому розділі «Електромагнітні поля в шаруватих структурах» розроблено спектральний алгоритм Фур'є-Гальоркіна для розв'язку загальної задачі (рис. 4), коли комплекснозначні частотно-залежні діелектричні функції матеріалів для кожного шару надані і чисельно, і аналітичними функціями. Алгоритм реалізовано для дослідження розповсюдження, розсіювання то поглинання хвиль в плазмонно-діелектричних, біметалевих та плазмонних рамкових структурах. Досліджені резонансні явища, індуковані збудженням локалізованих плазмонів та плазмонно-екситоною взаємодією, а також

розмірні ефекти та їх вплив на спектральні характеристики шаруватих структур. Знайдено такі параметри ядра, при яких з'являються ефекти значного зменшення енергії розсіяного поля (рис. 5 в). Ці ефекти не проявляються для структур з іншими розмірами діелектричного ядра (рис. 5 б) та взагалі не з'являються для біметалевих структур (рис. 5 д). З результатів розрахунків, представлених на рис. 5 г, видно, що різниця оптичних характеристик біметалевих структур при різних значеннях радіусу ядра є суттєвою лише при значеннях довжин хвиль  $\lambda \leq 580$  нм, а саме, в тому діапазоні, де уявна частина діелектричної проникності двох плазмонних металів відрізняється суттєво. При дослідженні рамкових золотих нанозірок з'ясовано, що зменшення товщини шару приводить до підсилення плазмонно-резонансних ефектів и навіть появи нових резонансів. Проведено дослідження фізичних особливостей інших структур з резонансами типу SPP, WPP, GPP, CPP. В усіх випадках показано, що амплітуда поля значно збільшена в тонкому околі границь наночасток та швидко зменшується подалі від них, як показано на рис. 5 е.

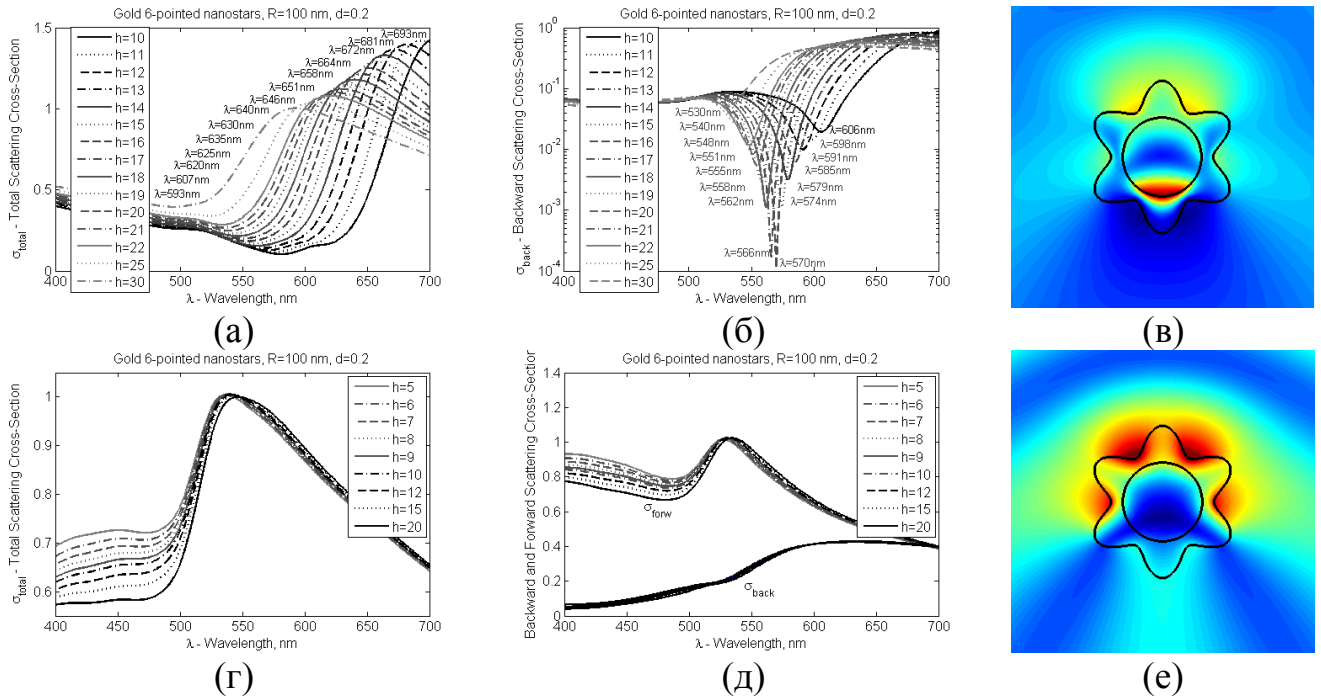


Рис. 5. Поперечники розсіювання як функції від довжини хвилі джерела випромінювання для оболонкових наностержнів в формі зірки та круглим ядром для різних параметрів  $h=(R(1-d)/(1+d)-r)$ . Повна енергія розсіяного поля (а)  $Au/SiO_2$ , (г)  $Au/Ag$ . Енергія розсіяного поля у напрямку, оберненому до джерела випромінювання: (б)  $Au/SiO_2$ , (д)  $Au/Ag$ . Амплітуда магнітного поля (в) з мінімальним розсіюванням в напрямку, оберненому до джерела  $Au/SiO_2$ ,  $\lambda=658$  нм,  $d=0.2$ ,  $h=15$  нм, (е) при резонансі  $Au/Ag$ ,  $\lambda=532$  нм,  $d=0.2$ ,  $h=15$  нм.

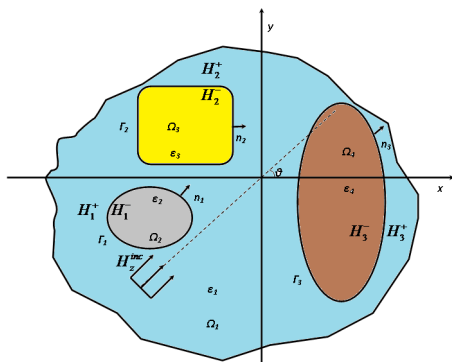


Рис. 6. Геометрія задач розсіювання хвиль у випадку Н-поляризації для системи взаємодіючих часток.

В п'ятому розділі «Системи взаємодіючих часток» розроблено спектральний алгоритм Фур'є-Гальоркіна для розв'язку задачі, геометрія якої представлена на рис. 6. Передбачалося періодичне та неперіодичне розташування часток в структурах. Викладено результати розрахунків характеристик конкретних елементів оптичних пристроїв, виконаних з використанням взаємодіючих часток. В якості таких елементів було вибрано: димери багатокутних часток, шестикутний резонатор з призмовим елементом зв'язку зовнішнього поля збудження (рис. 7 а), плазмонна оболонка з різною кількістю ядер (рис. 7 б), фотонні кристали. Результати розрахунків діаграм на рис. 7 в доводять можливість покращити напрямленість розсіяного поля за рахунок використання суперпризми, з системи взаємодіючих шестикутних елементів замість однорідної призми з того ж самого матеріалу. При дослідженні розповсюдження поля вздовж лінійного дефекту фотонного кристалу на рис. 7 г показано, що відбувається зменшення амплітуди поля. Зазначена обставина є наслідком поглинання поля при його розповсюдженні, що можна дослідити

(рис. 7 б), фотонні кристали. Результати розрахунків діаграм на рис. 7 в доводять можливість покращити напрямленість розсіяного поля за рахунок використання суперпризми, з системи взаємодіючих шестикутних елементів замість однорідної призми з того ж самого матеріалу. При дослідженні розповсюдження поля вздовж лінійного дефекту фотонного кристалу на рис. 7 г показано, що відбувається зменшення амплітуди поля. Зазначена обставина є наслідком поглинання поля при його розповсюдженні, що можна дослідити

лише коли прийняти до уваги реальну кількість часток та їх розташування, що і зроблено за допомогою розробленого алгоритму.

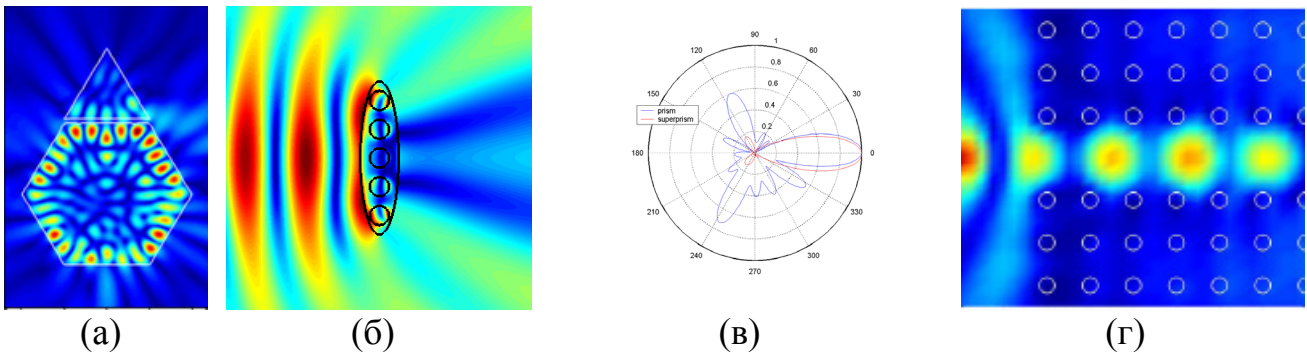


Рис. 7. Елементи оптичних пристроїв з використанням взаємодіючих часток.

В доданку чисельно досліджена збіжність всіх апроксимацій алгоритму. Для різних форм обчислено похибки дискретизації поліномами Фур'є, похибки інтерполяції (Quadrature error), похибки усічення матриці СЛАР (Truncation error). В усіх випадках вбачається експоненційна збіжність чисельного розв'язку. Це свідчить про коректність запропонованої моделі та її числової реалізації. (рис. 8). З'ясовано, що збіжність залежить від властивостей границь і може бути різною навіть для однієї і тієї ж форми, якщо використовуються різні види її параметризації. Таким чином, для параметризації багатокутника розробленим методом конформних відображень, як показано на рис. 8 а, збіжність значно краще, ніж при використанні того ж самого алгоритму з параметризаціями суперквадриків, як показано на рис. 8 б. На рис. 8 в показана поточкова збіжність результатів з результатами ММР, що тестувався шляхом порівняння з результатами експериментальних вимірювань. Середнє значення похибки 0.00016%. Знайдено, що збіжність з результатами ММР погіршується в декількох точках в області границь, з найбільшим значенням 7%. Зазначена обставина є наслідком дискретизації сингулярних ГР допоміжними джерелами в ММР, що не дозволяє їх розташування близько до границь, та збільшує похибку ММР розрахунків для тих точок, що знаходяться біля границь частки.

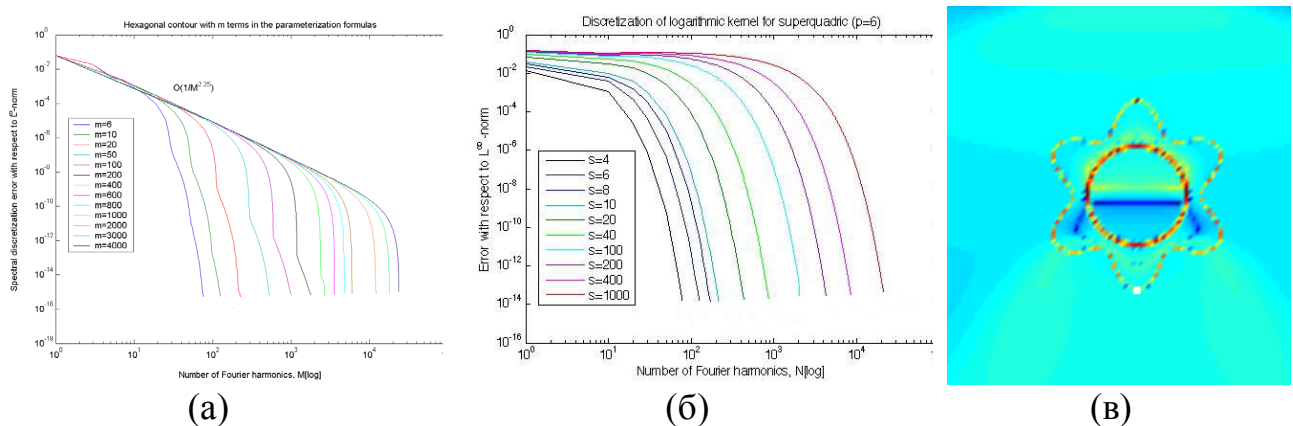


Рис. 8. Чисельна ефективність спектрального алгоритму для різних параметризацій шестикутного контуру (а) конформне відображення, (б) суперквадрик, (в) в порівнянні з ММР для розподілу амплітуди магнітного поля для  $Au/Ag$  оболонкової трубки при резонансі ( $\lambda=657$  нм,  $d=0.2$ ,  $h=15$  нм).

## ВИСНОВКИ

В дисертаційній роботі розв'язані актуальні науково-прикладні задачі дослідження процесів розповсюдження та розсіювання електромагнітних полів в діелектричних, напівпровідникових та плазмонних структурах, включаючи періодичні та неперіодичні системи однорідних та шаруватих наночасток. Для розв'язку задач розроблено спектральні методи Фур'є-Гальоркіна параметризованих граничних інтегральних рівнянь з аналітичною регуляризацією та швидким перетворенням Фур'є. Реалізація нових методів у вигляді пакету прикладних програми, на відміну від більшості сучасних пакетів, дозволяє на базі одного підходу проводити аналіз та моделювання нових оптичних приладів та їх систем завдяки можливості розрахунку електромагнітних характеристик в широкій смузі довжин хвиль як в ближній зоні, так і в дальній зоні, як з аналітично заданими, так і з експериментально наданими параметрами різних матеріалів та засобами збудження електромагнітного поля. Окрім розрахунку кількісних характеристик, запропоновані методи дозволяють також проводити візуалізацію електромагнітних процесів, які важко отримати при експериментальних дослідженнях таких наноструктур.

При цьому отримані наступні наукові та практичні результати:

1. Вперше для структур, включаючи ізольовані частки складної форми, шаруваті частки та системи взаємодіючих часток, знайдені резонансні довжини хвиль та встановлені їх залежності від геометричних та матеріальних параметрів, що дає змогу побудови нових приладів на основі використання таких резонансів.

2. Вперше проведено дослідження характеристик електромагнітного поля різноманітних резонансно-розсіюючих наночасток, що доводить можливість збільшення контрастності візуалізації, а також чутливості до змін властивостей зовнішнього середовища за рахунок підбору їх форми та матеріалів для розробки нових методів діагностики та ідентифікації біологічно шкідливих агентів.

3. Вперше показано, що зменшення відстані між взаємодіючими однорідними частками, а також зменшення товщини шару неоднорідних часток приводять до підсилення плазмонно-резонансних ефектів та навіть появи нових резонансів, що дає змогу зменшити розміри приладів та одночасно покращити їх характеристики.

4. В результаті досліджень знайдено засоби зсуву резонансної довжини хвилі плазмонних наночасток в іншу смугу частот за рахунок підбору їх форми та розмірів, що надає можливість розробити наноструктури ідеально відповідаючі характеристикам випромінювання, що застосовується для збудження їх резонансів.

5. Доведено що, навіть при збереженні зовнішньої форми золотої нанозірки, існує можливість зсуву резонансної довжини хвилі в напрямі червоної частини електромагнітного спектру за рахунок вживлення діелектричного ядра, та зсуву в напрямі блакитної частини спектру за рахунок вживлення ядра з іншого плазмонного матеріалу, що дає можливість їх використання для медичних цілей.

6. Отримала подальший розвиток теорія спектральних методів завдяки розробленому в цій роботі методу аналітичної регуляризації для наночасток з дисперсійними матеріалами та параметризації складних границь, що надало змогу її використання для розв'язку нових задач з експоненціальною збіжністю результатів.



7. На основі проведеного чисельного аналізу всіх типів апроксимації розроблених спектральних алгоритмів знайдено засіб підбору параметрів дискретизації, інтерполяції та усічення СЛАР, що приводить до найшвидшого розв'язку з найкращою точністю результату.

Достовірність результатів, отриманих розробленими методами підтверджується збігом результатів з точними аналітичними розв'язками тестових задач, відповідністю чисельних розв'язків фізичним картинам явищ, що досліджуються, експоненціальною збіжністю чисельних розв'язків, збігом результатів при застосуванні різних алгоритмів цієї роботи для досягнення розв'язків тих же самих тестових задач, збігом з чисельними результатами отриманими за допомогою FEM та FDTD алгоритмів для простих структур, з результатами інших методів ГР, включаючи MAS та MMP, результати яких також перевірено та підтверджено результатами експериментальних досліджень.

Результати дисертаційної роботи було впроваджено в науково-дослідній роботі для виконання перспективних проектів міжнародних організацій.

## СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Ильяшенко Л. Н. Дифракция звуковых волн на проницаемом многоугольном цилиндре / Л. Н. Ильяшенко, А. И. Носич // Динамика сплошной среды: Сб. науч. тр. / Новосиб. гос. техн. ун-т – 2002. – Т. 19, № 121. – С. 132 – 135.

2. Ильяшенко Л. Н. Решение задач дифракции волн на диэлектрическом цилиндре с применением теории конформного отображения / Л. Н. Ильяшенко // Радиофизика и электроника: Сб. науч. тр. / ИРЭ НАНУ. – 2002. – Т. 7, № 3. – С. 468 – 473.

3. Ильяшенко Л. Н. Численное моделирование призматических элементов оптоэлектронных приборов / Л. Н. Ильяшенко // Радиоэлектроника и информатика. – 2003. – Т. 25, № 4. – С. 23 – 26.

4. Illyashenko-Raguin L. A boundary integral equation method for the numerical modeling of particles of arbitrary shape / L. Illyashenko-Raguin, P. Arbenz // Proc. Appl. Math. Mech. – 2005. – Vol. 5, № 7. – P. 769 – 770.

5. Illyashenko-Raguin L. Spectral boundary integral equation method for the characterization of novel photonic nanomaterials / L. Illyashenko-Raguin // Proc. SPIE. – 2007. – Vol. 6717. – P. 611707.

6. Illyashenko-Raguin L. Analysis of channel plasmon-polariton nanoantennas based on a meshless boundary integral equation approach / L. Illyashenko-Raguin // Proc. SPIE. – 2008. – Vol. 6987. – P. 698732.

7. Illyashenko-Raguin L. Plasmon resonances and optical near-field enhancement in coupled nanosystems / L. Illyashenko-Raguin // Proc. SPIE. – 2008. – Vol. 6988. – P. 698844.

8. Raguin L. Improved performance of numerical simulation algorithms for nanoscale electromagnetics / L. Raguin, J. Smajic, M. Mishrikey, Ch. Hafner // Proc. SPIE. – 2008. – Vol. 7100. – P. 710008.

9. Smajic J. Comparison of numerical methods for the analysis of plasmonic structures / J. Smajic, Ch. Hafner, L. Raguin, K. Tavzarashvili, M. Mishrikey // *J. Comput. Theor. Nanoscience.* – 2009. – Vol. 6, № 3. – P. 763-774.
10. Raguin L. Design of surface plasmon polariton enhanced nanoantennas / L. Raguin, Ch. Hafner, R. Vahldieck // *Proc. SPIE.* – 2009. – Vol. 7366. – P. 73660F.
11. Samrowski T. Modelling light propagation in plasmonic nanostructures / T. Samrowski, L. Raguin, Ch. Hafner, R. Vahldieck // *Proc. SPIE.* – 2010. – Vol. 7717. – P. 771707.
12. Raguin L. Plasmon resonances of gold nanostars / L. Raguin, T. Samrowski, Ch. Hafner, R. Vahldieck // *Proc. SPIE.* – 2010. – Vol. 7712. – P. 77120P.
13. Raguin L. Plasmon resonances of bimetal nanostructures with tunable optical properties / L. Raguin, T. Samrowski, Ch. Hafner // *Proc. SPIE.* – 2010. – Vol. 7838. – P. 783818.
14. Raguin L. Boundary integral equation method for the analysis of tunable light scattering properties of plasmonic core-shell nanoparticles / L. Raguin, P. Leuchtmann, Ch. Hafner // *J. Comput. Theor. Nanoscience.* – 2011. – Vol. 8, № 8. – P. 1590 – 1599.
15. Illyashenko-Raguin L. Plasmon resonances of hollow gold nanoparticles and their applications in imaging, sensing, biology and medicine / L. Illyashenko-Raguin // *SPIE Newsroom Proc. SPIE.* – submitted for publication.
16. Illyashenko L. N. Numerical method of solving the singular integral equations in wave scattering by a penetrable polygonal cylinder / L. N. Illyashenko, A. I. Nosich // *Proc. of Int. Conf. on Mathematical Methods in Electromagnetic Theory (MMET-2000)* – 2000. – P. 429 – 431.
17. Illyashenko L. N. Wave scattering by a penetrable polygonal cylinder / L. N. Illyashenko, A. I. Nosich // *Proc. Int. Conf. on Transparent Optical Networks (ICTON 2001).* – Krakow (Poland), June 18 – 21, 2001. – P. 230 – 233.
18. Illyashenko L. N. Diffraction of acoustic waves on a polygonal cylinder / L. N. Illyashenko, A. I. Nosich // *Proc. 7<sup>th</sup> Int. Workshop on Acoustics of Non-Homogeneous Media.* – Novosibirsk (Russia), April 20 – 23, 2002. – P. 122 – 124.
19. Illyashenko L. N. Electromagnetic backscattering from a triangular dielectric cylinder / L. N. Illyashenko, A. I. Nosich // *Proc. Int. Conf. on Mathematical Methods in EM Theory (MMET 02).* – Kiev (Ukraine), April 10 – 13, 2002. – P. 592 – 593.
20. Illyashenko L. N. Integral equation analysis of a polygonal semiconductor microcavity / L. N. Illyashenko, A. I. Nosich, T. M. Benson // *Proc. Int. Conf. on Numerical Simulation of Semiconductor Optoelectronic Devices (NUSOD 02).* – Zurich (Switzerland), April 20 – 23, 2002. – P. 72 – 73.
21. Illyashenko L. N. Modeling of 2D photonic crystals by using the method of integral equations / L. N. Illyashenko, A. I. Nosich, T. M. Benson, P. Sewell // *Proc. 11<sup>th</sup> International Workshop on Optical Waveguide Theory and Numerical Modeling (OWTNM 2003).* – Prague (Czech Republic), April 3 – 5, 2003. – P. 124.
22. Illyashenko L. N. Accurate numerical modeling of wavelength-scale microwave prism sensors and couplers / L. N. Illyashenko // *Proc. of Mediterranean Microwave Symposium (MMS 2003)* – Cairo (Egypt), May 6 – 8, 2003. – P. 16 – 17.

23. Illyashenko L. N. Analysis of the rod shape dependence in finite-size two-dimensional photonic crystals / L. N. Illyashenko, T.M. Benson, P. Sewell // Proc. Int. Conf. on Transparent Optical Networks (ICTON 2003). – Warsaw (Poland), June 29 – July 3, 2003. – P. 261 – 264.

24. Illyashenko L. N. The method of boundary integral equations for numerical investigation of prism and superprism effects in photonic crystals / L. N. Illyashenko, T. M. Benson, P. Sewell // Proc. 8<sup>th</sup> Int. Workshop Direct and Inverse Problems of Electromagnetic and Acoustic Wave Theory (DIPED-2003). – Lviv (Ukraine), September 23 – 25, 2003. – P. 55 – 58.

25. Illyashenko L. N. Minimization of the backward scattering from dielectric structures / L.N. Illyashenko, T.M. Benson, P. Sewell // Proc. 4<sup>th</sup> Int. Conf. Antenna Theory and Techniques (ICATT'03). – Sevastopol (Ukraine), September 9 – 12, 2003. – P. 696 – 700.

26. Illyashenko-Raguin L. A boundary integral equation method for the numerical modeling of particles of arbitrary shape / L. N. Illyashenko-Raguin, P. Arbenz // Proc. 6<sup>th</sup> European conference on Numerical Mathematics and Advanced Applications (ENUMATH 2005). – Santiago de Compostela (Spain), September 9 – 12, 2005.

27. Illyashenko-Raguin L. A spectral boundary integral equation method for optical response of plasmon resonant nanoparticles with non-smooth boundaries / L. N. Illyashenko-Raguin // Proc. 5<sup>th</sup> Workshop on Fast BEM in Industrial Applications. – Soellerhaus (Austria), October 5 – 8, 2007. – P. 17.

28. Illyashenko-Raguin L. Spectral boundary integral equation method for the characterization of novel photonic nanomaterials / L. N. Illyashenko-Raguin // International Symposium on Optomechatronic Technologies (ISOT 2007). – Lausanne (Switzerland), October 8 – 10, 2007.

29. Illyashenko-Raguin L. Analysis of channel plasmon-polariton nanoantennas based on a meshless boundary integral equation approach / L. N. Illyashenko-Raguin // SPIE Europe: Photonics Europe, Metamaterials. – Strasbourg (France), April 7 – 11, 2008.

30. Illyashenko-Raguin L. Plasmon resonances and optical near-field enhancement in coupled nanosystems / L. N. Illyashenko-Raguin // SPIE Europe: Photonics Europe, Nanophotonics. – Strasbourg (France), April 7 – 11, 2008.

31. Illyashenko-Raguin L. Three-dimensional spectral boundary integral analysis of plasmon polaritons enhanced optical nanoantenna / L. N. Illyashenko-Raguin, Ch. Hafner, R. Hiptmair // 5<sup>th</sup> European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2008). – Venice (Italy), June 30 – July 5, 2008. – P. 17.

32. Illyashenko-Raguin L. Spectrally accurate numerical algorithm for surface plasmon polaritons enhanced optical nanoantenna / L. N. Illyashenko-Raguin, Ch. Hafner, R. Vahldieck, R. Hiptmair, // Proc. 5<sup>th</sup> Int. Workshop BEM on the SAAR. – Saarbrücken (Germany), May 26 – 29, 2008. – P. 17.

33. Raguin L. Spectral Fourier methods with projectors of Calderón type for surface plasmon polaritons enhanced nanostructures / L. N. Raguin, Ch. Hafner, R. Vahldieck, R. Hiptmair // Proc. 6<sup>th</sup> Workshop on Fast BEM in Industrial Applications. – Soellerhaus (Austria), October 2 – 5, 2008. – P. 19 – 20.

34. Raguin L. Improved performances of numerical simulation algorithms for nanoscale electromagnetics / L. Raguin, J. Smajic, M. Mishrikey, Ch. Hafner // SPIE Europe: Optical Systems Design. – Glasgow (United Kingdom), September 2 – 5, 2008.
35. Raguin L. Optical nanoantennas composed on multiple plasmonic nanoparticles / L. Raguin, M. Mishrikey, T. Sannomiya, Ch. Hafner, R. Vahldieck // SPIE Europe: Optics and Optoelectronics. – Prague (Czech Republic), September 9 – 12, 2009.
36. Raguin L. Design of surface plasmon polariton enhanced nanoantennas / L. N. Raguin, Ch. Hafner, R. Vahldieck // SPIE Europe: Microtechnologies for the New Millenium Photonic Materials, Devices, and Applications. – Dresden (Germany), May 3 – 5, 2009. – P. 19 – 20.
37. Raguin L. Spectral boundary integral equation methods for engineering moonlit night at nanoscale / L. N. Raguin, D. Bowler, Ch. Hafner, R. Vahldieck // Proc. 7<sup>th</sup> Workshop on Fast BEM in Industrial Applications. – Soellerhaus (Austria), October 15 – 18, 2009. – P. 20.
38. Raguin L. Engineering moonlit night at nanoscale / L. N. Raguin, D. Bowler, Ch. Hafner, R. Vahldieck // AIP Conf. Proc. 2nd International Workshop: Theoretical and Computational Nanophotonics (TaCoNa-Photonics 2009). – Bad Honnef (Germany), October 28 – 30, 2009. – P. 152 – 153.
39. Samrowski T. Modelling light propagation in plasmonic nanostructures / T. Samrowski, L. Raguin, Ch. Hafner, R. Vahldieck // SPIE Photonics Europe: Optical Modelling and Design. – Brussels (Belgium), April 12 – 16, 2010.
40. Raguin L. Plasmon resonances of gold nanostars / L. Raguin, T. Samrowski, Ch. Hafner, R. Vahldieck // SPIE Photonics Europe: Nanophotonics. – Brussels (Belgium), April 12 – 16, 2010.
41. Raguin L. Plasmon resonances of bimetal nanostructures with tunable optical properties / L. Raguin, T. Samrowski, Ch. Hafner // SPIE Europe: Security + Defence. – Toulouse (France), September 20 – 23, 2010.
42. Raguin L. Spectral Galerkin method for surface integral equations on nanoparticles in three dimensions / L. Raguin, R. Vogelgesang, Ch. Hafner // Proc. 8<sup>th</sup> Workshop on Fast BEM in Industrial Applications. – Soellerhaus (Austria), September 30 – October 3, 2010. - P. 20 – 21.
43. Raguin L. Plasmon resonances of hollow gold nanoparticles and their applications in imaging, sensing, biology and medicine / L. Raguin, Ch. Hafner, P. Leuchtmann // SPIE Microtechnologies: Nanotechnology. – Prague (Czech Republic), April 18 – 20, 2011.
44. Illyashenko-Raguin L. Dependence of the plasmon sensitivity on nanoparticle shape and material composition / L. Illyashenko-Raguin, Ch. Hafner, P. Leuchtmann // SPIE Microtechnologies: Integrated Photonics: Materials, Devices and Applications. – Prague (Czech Republic), April 18 – 20, 2011.
45. Hafner Ch. Effects of shape, size and orientation on plasmonic coupling in an asymmetric nanoparticle dimmer / Ch. Hafner, P. Leuchtmann, L. Illyashenko-Raguin // SPIE Optics + Optoelectronics. – Prague (Czech Republic), April 18 – 20, 2011.

## АНОТАЦІЯ

**Ілляшенко Л.М. Плазмонні резонанси складних наноструктур.** – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.03 – радіофізика. – Харківський національний університет радіоелектроніки. – Харків, 2012.

Робота присвячена дослідженню особливостей поширення, розсіювання та поглинання електромагнітних хвиль в нових нанотехнологічних структурах для створення сучасних оптичних приладів та пристроїв, принцип дії яких будується на використанні плазмонних резонансів, а також взаємодії електромагнітних полів діелектричних, напівпровідникових та плазмонних структурних елементів. На підставі аналізу літературних джерел зроблено висновок про необхідність створення спектральних методів граничних інтегральних рівнянь для обчислення характеристик дальнього та ближнього електромагнітного поля в широкій смузі довжин хвиль збудження в залежності від геометричних та матеріальних параметрів кожного компоненту наносистем та їх структурних особливостей. На основі спектрального методу Фур'є-Гальоркіна розроблені чисельно-аналітичні схеми, що реалізовані у прикладних програмах, та дозволили розв'язати зазначені актуальні задачі та чисельно обґрунтувати експоненціальну збіжність розв'язку.

**Ключові слова:** плазмонні резонанси, складні наноструктури, ефекти взаємодії електромагнітних полів нанодеталей структури, дисперсія матеріалів, спектральні методи Граничних Інтегральних Рівнянь.

## АННОТАЦИЯ

**Ильяшенко Л.Н. Плазмонные резонансы в сложных наноструктурах.** –

Рукопись.

Диссертация посвящена исследованию особенностей распространения, рассеяния и поглощения электромагнитных волн в новых нанотехнологических структурах для создания современных оптических приборов и устройств, принцип действия которых основан на использовании плазмонных резонансов, а также взаимодействия электромагнитных полей диэлектрических, полупроводниковых и плазмонных элементов структуры. На основании анализа литературы сделаны выводы о необходимости создания спектральных методов граничных интегральных уравнений для вычисления характеристик дальнего и ближнего электромагнитного поля в широкой полосе длин волн излучения в зависимости от геометрических и материальных параметров их деталей и структурных особенностей систем. При использовании спектральных методов Фурье-Галеркина разработаны численно-аналитические схемы и реализованы в прикладных программах, использование которых позволило решить указанные актуальные задачи и численно доказать экспоненциальную сходимость результатов.

**Ключевые слова:** плазмонные резонансы, сложные наноструктуры, электромагнитные эффекты взаимодействия нанодеталей, дисперсия материалов, спектральные методы граничных интегральных уравнений.

**ABSTRACT**

**Ilyashenko L.N. Plasmon Resonances of Complex Nanostructures.** – Manuscript.

Thesis for PhD degree in Physics and Mathematics (candidate in physical and mathematical sciences) with specialty 01.04.03 – radiophysics. – Kharkiv National University of Radio Electronics, Kharkiv, 2012.

This thesis is devoted to study of electromagnetic wave propagation, scattering and absorption in new nanotechnological structures for design of novel optical devices. This research is driven by the desire of optical device miniaturization exploiting plasmon resonances and various coupling induced effects for electromagnetic fields of their structural details, including dielectric, semiconductors and plasmonic nanoparticles.

To solve challenging problems, conclusions about needs to develop new Spectral Boundary Integral Equation (BIE) methods for efficient calculations of far- and near-field characteristics in wide spectrum of electromagnetic wavelengths are made after the review of literature. Development of new spectral Fourier-Galerkin algorithms and their implementation in novel numerical simulation tool is conducted. All possible geometrical configurations of plasmonic nanorods, including periodic and aperiodic structures of homogeneous and layered nanoparticles are considered based on the same approach, that lead to solving the Maxwell's equations with material properties presented by frequency dependent complex valued dielectric permittivity. Novel technique of parameterization for boundaries to be used in conjunction with spectral Fourier methods is invented. The use of parameterizations allows converting the BIE along arbitrary curve to BIE over a circle, so that Fourier harmonics provide basis for their discretization. It also permits regularization of integral kernels using a singularity subtraction technique, leading to integrals with smooth kernels to be evaluated by Fast Fourier Transforms (FFT). These techniques also convert all equations to the Fredholm equations of the second kind for which a numerical stability is guaranteed. Exponential convergence rate of results is proved. Therefore, all algorithms developed in this work may be seen as FFT enhanced spectral Fourier Galerkin methods for parameterized BIE with singularity subtraction.

Code validation was done through the comparison with results of BEM, presented in literature, and numerical results for testing cases obtained with FEM, FDTD, MAS and MMP, that were also validated through the comparison with results of experimental research. The set of numerical experiments clearly demonstrates performances of developed BIE tool, that allows to solve a lot of new challenging problems. The dependence of resonating wavelength on various parameters, including shape, size, material properties and coupling induced properties of nanodetails, such as interparticle distance, orientation, and position of the light source in novel configurations was found. This permits adjusting the mentioned above parameters in the most beneficial way to make it possible to build novel devices with dramatically improved performance covering a wide range of desired properties.

**Key words:** plasmon resonances, complex nanostructures, coupling-induced electromagnetic effects, dispersive materials, spectral boundary integral equation methods.

Підп. до друку 20.08.12.      Формат 60x84 1/16.      Спосіб друку – ризографія.  
Умов. друк. арк. 1,2.      Облік. вид. арк. 1,1      Тираж 100 прим.  
Ціна договірна      Зам №2-709

---

ХНУРЕ. Україна. 61166, Харків, просп. Леніна, 14

---

Віддруковано в навчально-науковому  
видавничо-поліграфічному центрі ХНУРЕ  
61166, Харків, просп. Леніна, 14