

УДК 621.396.96



С. А. Горєлишев

ОБҐРУНТУВАННЯ ПАРАМЕТРІВ МЕТОДУ РОЗРАХУНКУ ХАРАКТЕРИСТИК ЕЛЕКТРОМАГНІТНОГО РОЗСІЮВАННЯ МЕТАЛЕВОЇ НАНОЧАСТИНКИ У ОПТИЧНОМУ ДІАПАЗОНІ

У статті розглянуто питання вибору та обґрунтування параметрів методу розрахунку характеристик електромагнітного розсіювання наночастинок благородних металів різного розміру в оптичному діапазоні, який ґрунтується на застосуванні системи інтегральних рівнянь типу Мюллера. Отримано необхідну кількість вузлів струму та шаг дискретизації на поверхні одної наночастинки, яка може мати різні розміри. Ці параметри забезпечують внутрішню збіжність та найкращу точність запропонованого обчислювального алгоритму.

К л ю ч о в і с л о в а : збіжність, точність, поверхня, радіус кривини, крок дискретизації, наночастинка.

Постановка проблеми. В умовах швидкого створення та запровадження інновацій на глобальному рівні зростає вплив нанотехнологій на економіку різних країн. Розвиток нанотехнологій з високою ймовірністю визначить майбутнє світової економіки [1]. Дослідження, що проводяться в нанорозмірному діапазоні, показали, що наночастинки речовини мають фізичні та хімічні властивості, відмінні від властивостей великих об'єктів з тієї ж речовини та від властивостей окремих атомів [2].

Розробки в галузі нанотехнологій вже сьогодні активно застосовуються, наприклад, у медицині, промисловості та у військовій справі. Лідерами інвестицій у нанорозробки є США, Євросоюз, Японія та Китай [1, 3, 4].

Структури з наночастинок благородних металів в оптичному діапазоні викликають великий інтерес при вирішенні практичних завдань побудови та використання оптичних антен та датчиків зв'язку, створенні сонячних батарей, покриттів для маскування об'єктів в оптичному діапазоні. У даний час проводяться інтенсивні дослідження резонансних ефектів при розсіянні та поглинанні світла такими нанорозмірними частинками.

Таким чином, отримання та аналіз характеристик електромагнітного (ЕМ) розсіювання структур з наночастинок у оптичному діапазоні на сьогодні є актуальним науково-практичним завданням.

Аналіз останніх досліджень та публікацій. Наразі існують як експериментальні методи дослідження характеристик ЕМ розсіювання наноструктур у оптичному діапазоні, так і методи математичного моделювання.

Для проведення фізичних експериментів з вивчення властивостей наночастинок металів дослідники використовують метод абсорбційної спектроскопії [5]. Значно поширені також методи скануючої мікроскопії як «прямі» методи дослідження наноматеріалів та оптичні методи (конфокальна мікроскопія, фотолюмінесценція, оптична спектроскопія тощо) [6, 7]. Очевидно експериментальні виміри є природнішими. Однак для виконання таких досліджень до відповідної апаратури висуваються дуже високі вимоги.

Методи математичного моделювання [8–15] не потребують значних фінансових витрат і матеріальних ресурсів, порівнюючи з методами натурного моделювання, тому їх розвиток і застосування є більш перспективними. Крім того, застосування методів математичного моделювання дозволяє без суттєвих витрат часу і ресурсів досліджувати характеристики ЕМ розсіювання наноструктур різних конфігурацій для різноманітних умов зондування, що має суттєве практичне

значення. Проте до таких математичних методів висуваються жорсткі вимоги щодо точності та забезпечення збіжності результатів розрахунку.

Метод інтегральних рівнянь (ІР) широко використовується для моделювання розсіювання від різних об'єктів із кінцевими діелектричними проникностями [12 – 15]. Але в оптичному діапазоні розсіювання на наночастинках як однорідних резонансних об'єктах з кінцевою діелектричною проникністю має свої особливості, що впливають на точність та збіжність алгоритму розрахунку, і це ще детально не вивчено.

Таким чином, проведений аналіз літературних джерел показує, що проблема вибору та обґрунтування параметрів методів математичного моделювання вторинних характеристик розсіювання наночастинки потребує подальшого дослідження.

Метою статті є вибір та обґрунтування параметрів методу розрахунку характеристик електромагнітного розсіювання металевих наночастинок різного розміру в оптичному діапазоні.

Виклад основного матеріалу. Металеву наночастинку, яка має розміри від десятків до сотень нанометрів, можна розглядати як резонансний розсіювач, наповнений однорідним матеріалом, що має комплексну діелектричну проникність. Тому для розв'язування тривимірних задач розсіювання на структурах із наночастинок в оптичному діапазоні (довжини хвиль λ від 300 нм до 900 нм) використовують чисельний метод, що ґрунтується на застосуванні системи інтегральних рівнянь типу Мюллера (СІРМ) [12, 14, 15, 16].

Рішення поверхневих ІР починається з дискретизації інтеграла. Як об'єкт дослідження розглядається структура з K однакових наночастинок, тому її поверхню S можна подати як суму поверхонь кожної наночастинки S_i :

$$S = \sum_{i=1}^K S_i. \quad (1)$$

Своєю чергою поверхня наночастинки апроксимується ділянками тривісних еліпсоїдів [14, 15, 16]. У результаті поверхня розсіювача S_i подається у вигляді суми N електрично малих ділянок s_n ($n = \overline{1, N}$). Кожній s_n відповідає точка $\vec{Q}_n = \{x_n, y_n, z_n\}$ (вузол струму).

Визначимо метод задання вузлів струму та їх кількості N на поверхні S_i одної наночастинки, які забезпечують внутрішню збіжність та найкращу точність обчислювального алгоритму, за допомогою математичного моделювання характеристик ЕМ розсіювання металеві наночастинки. Для моделі з K наночастинок кількість вузлів струму на поверхні S збільшується у K разів.

Під внутрішньою збіжністю чисельного алгоритму будемо розуміти його властивість, яка полягає в тому, що при збільшенні кількості вузлів токів N на поверхні S_i значення характеристик ЕМ розсіювання металеві наночастинки σ_N прагне до фіксованого значення σ_{N_c} [17]:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sigma_N = \sigma_{N_c}, \quad (2)$$

і, починаючи з деяких значень $N = N_a$, виконується умова

$$\frac{|\sigma_N - \sigma_{N_a}|}{\sigma_{N_c}} \cdot 100\% \leq \delta_a, \quad (3)$$

де σ_{N_a} , σ_{N_c} – значення характеристик ЕМ розсіювання металеві наночастинки, обчислювані для кількості вузлів N_a та N_c відповідно;

$$N_c > N_a.$$

Внутрішня збіжність алгоритму розрахунку характеристик ЕМ розсіювання залежить від розмірів та форми наночастинок. У розрахунках за запропонованим чисельним методом кількість вузлів N , в яких обчислювалася щільність струму, була вибрана таким чином, щоб існувала внутрішня збіжність алгоритму, що характеризується заданим значенням δ_a від 1 % до 3 %. Відстань між вузлами струму r_a вибирається залежно від радіусів кривини елементів поверхні. На ділянках з меншими радіусами кривини крок дискретизації r_a також вибирається меншим. Тобто ділянкам поверхні S з меншими радіусами кривини відповідають елементарні ділянки s_n меншого розміру. Як показано у статті [18], задля забезпечення величини δ_a від 1 % до 3 % на достатньо гладких ділянках поверхні середня відстань між вузлами струму має становити величину $r_a = (0,005...0,02)\lambda$. На елементах поверхні з малими радіусами кривини крок вибирається меншим і задля забезпечення такої самої точності δ_a від 1 % до 3 % має становити величину $r_a \approx 0,002\lambda$.

У цьому дослідженні проведені розрахунки внутрішньої збіжності алгоритму для двох різних наночастинок, що мають розміри півосей $a_x = a_y = 75$ нм, $a_z = 25$ нм та $a_x = a_y = 100$ нм, $a_z = 20$ нм відповідно. У розрахунках використано експериментальні дані для комплексної діелектричної проникності срібла $\epsilon_2 = \epsilon_2' + i\epsilon_2''$ (де i – уявна одиниця), табульованої у праці [19], у поєднанні з алгоритмом інтерполяції сплайнів для довільних значень довжини хвилі. Згідно з цими даними проникність ϵ_2 срібла коливається у межах від 1 до -40 при довжині хвилі від 300 нм до 900 нм.

Як характеристики ЕМ розсіювання металевої наночастинки срібла σ_N будемо розглядати два показники.

Перший показник – переріз повного розсіювання (ППР)

$$\begin{aligned} \sigma_{sc} &= \int_{\Omega} \left\{ \left| \vec{p}_1 \cdot \vec{E}^{sc} \right|^2 + \left| \vec{p}_2 \cdot \vec{E}^{sc} \right|^2 \right\} r^2 \sin(\theta_1) d\theta_1 d\varphi_1 = \\ &= \frac{1}{k_1^2} \int_{\Omega} \left\{ \left| F_1(\theta_1, \varphi_1) \right|^2 + \left| F_2(\theta_1, \varphi_1) \right|^2 \right\} \sin(\theta_1) d\theta_1 d\varphi_1, \end{aligned} \quad (4)$$

де

$$\begin{aligned} F_{\alpha}(\theta_1, \varphi_1) &= -\frac{k_1^2}{4\pi s_i} \int \left[\vec{J}^e(\vec{Q}) \cdot (\vec{p}_{\alpha} - \vec{r}^0 (\vec{p}_{\alpha} \cdot \vec{r}^0)) \right] \zeta_0 + \\ &+ \vec{J}^m(\vec{Q}) \cdot (\vec{p}_{\alpha} \times \vec{r}^0) \exp[ik_0(\vec{r}^0 \cdot \vec{Q})] ds_Q; \end{aligned} \quad (5)$$

\vec{p}_1 і \vec{p}_2 – два взаємно ортогональні одиничні вектори, дотичні до хвильової сфери Ω великого радіусу r та ортогональні до вектору прийому \vec{r}^0 ;

θ_1, φ_1 – кути, які використовуються для параметризації поверхні сфери Ω ;

\vec{E}^{sc} – розсіяна хвиля на великій відстані;

$k_1 = \omega\sqrt{\epsilon_0\epsilon_1\mu_0} = 2\pi/\lambda$ – хвильове число у вільному просторі;

λ – довжина хвилі у вільному просторі;

$\epsilon_0 = (36\pi)^{-1} \times 10^{-9}$ Ф/м, $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$ Гн/м – абсолютні діелектрична та магнітна проникності вільного простору;

$\epsilon_1 = 1$, ζ_0 – відносна діелектрична проникність та імпеданс вільного простору;

$\vec{J}^e(\vec{Q})$ та $\vec{J}^m(\vec{Q})$ – еквівалентні щільності струмів у точці параметризації \vec{Q} .

У обчисленнях урахується залежність векторів \vec{p}_{α} ($\alpha = 1, 2$) та \vec{r}^0 від кутів θ_1, φ_1 , які параметризують сферу Ω .

Другий показник – переріз загасання (ПЗ)

$$\sigma_{ext} = -\frac{4\pi}{k_1^2} \operatorname{Re} \left\{ (\vec{p}_0 \cdot \vec{p}_1) F_1(\theta, \varphi)_{\vec{R}^0} + (\vec{p}_0 \cdot \vec{p}_2) F_2(\theta, \varphi)_{\vec{R}^0} \right\}, \quad (6)$$

де функції $F_\alpha(\theta, \varphi)$ обчислюються в напрямку спадання плоскої ЕМ хвилі \vec{R}^0 .

Кут $\theta = 0$ відповідає напрямку «на просвіт».

На рисунку 1 наведені залежності нормованих значень ППР $\sigma_{sc}/(\pi a^2)$ і ПЗ $\sigma_{ext}/(\pi a^2)$ однієї наночастинки розміром $a = a_x = a_y = 75$ нм, $a_z = 25$ нм від кута місця θ , азимут $\varphi = 0^\circ$ при значеннях кількості вузлів N (604, 724, 850 і 992) та горизонтальній (а, б) і вертикальній (в, г) поляризації на довжині падаючої хвилі $\lambda = 300$ нм.

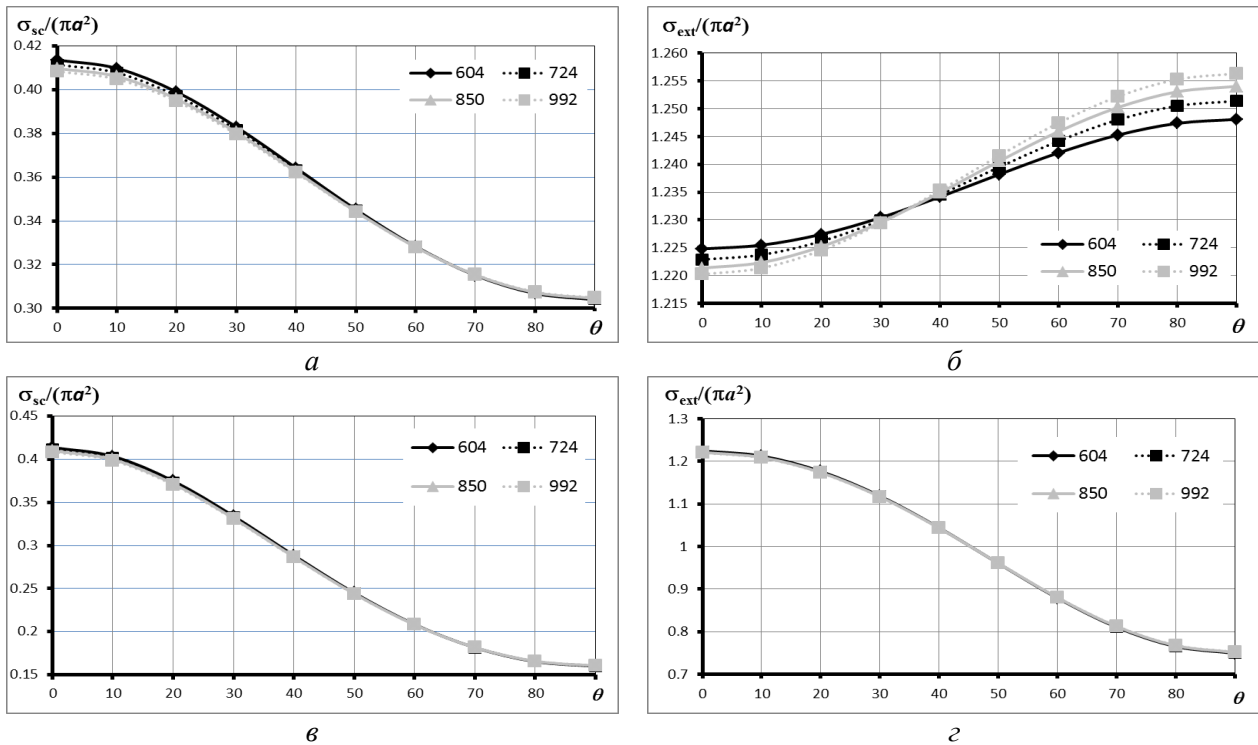


Рисунок 1 – Залежність нормованих значень ППР σ_{sc} (а, в) та ПЗ σ_{ext} (б, г) наночастинки розміром $75 \text{ нм} \times 75 \text{ нм} \times 25 \text{ нм}$ від кута місця θ для різних значень кількості вузлів та поляризації (а, б – горизонтальна; в, г – вертикальна)

На рисунку 2 показані залежності нормованих значень ППР $\sigma_{sc}/(\pi a^2)$ і ПЗ $\sigma_{ext}/(\pi a^2)$ наночастинки від азимута φ при фіксованому куті місця $\theta = 50^\circ$ та значеннях кількості вузлів N (604, 724, 850 і 992) та різної поляризації на довжині падаючої ЕМ хвилі $\lambda = 300$ нм.

Для визначення необхідної кількості вузлів N як еталон поверхня еліпсоїда поділена на $N_0 = 1140$ вузлів (для забезпечення $\delta_a \leq 1\%$). Потім для кожного значення кута місця θ та кожного азимуту φ визначалася відносна похибка

$$\delta_{N_{\theta, \varphi}}(N_0) = \left| \frac{\sigma_N(N_0) - \sigma_N(1140)}{\sigma_N(1140)} \right| \cdot 100\%, \quad (7)$$

де $\sigma_N(N_0)$ – обчислене значення ППР та ПЗ для заданих $N_0 = 600 \dots 1140$.

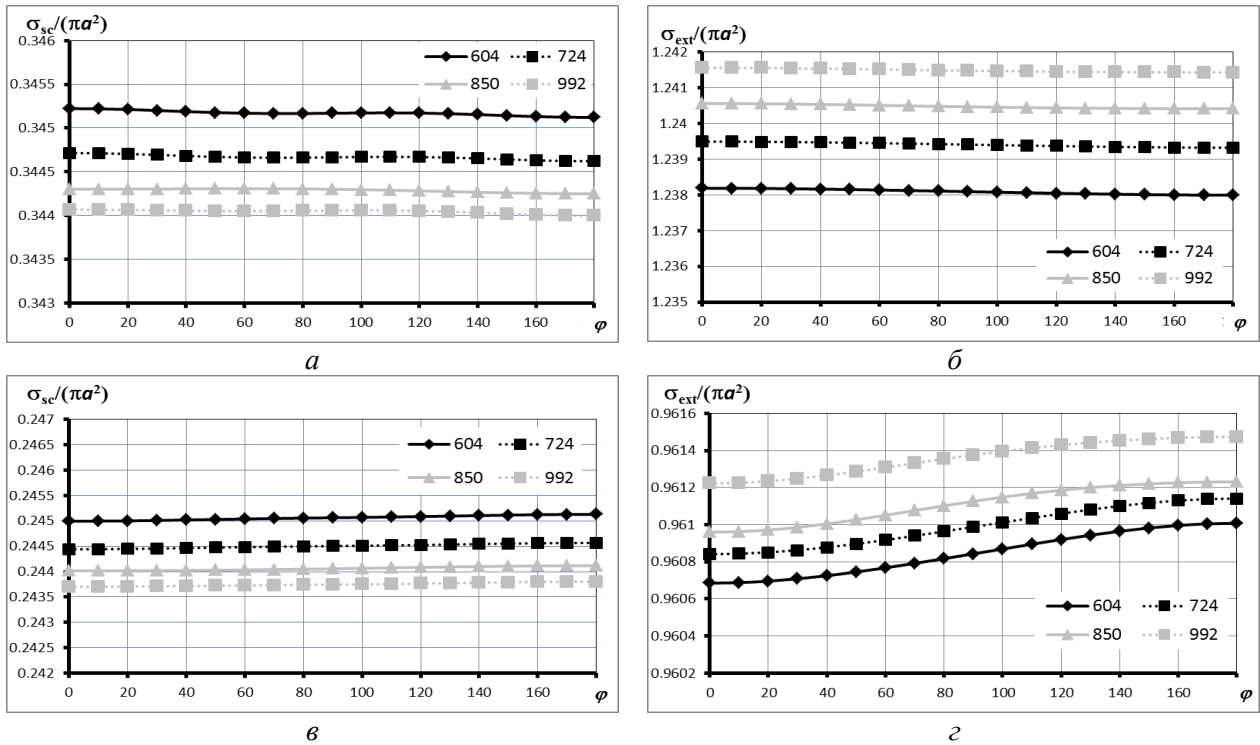


Рисунок 2 – Залежність нормованих значень ППР σ_{sc} (a , v) та ПЗ σ_{ext} (b , z) наночастинки розміром $75 \text{ nm} \times 75 \text{ nm} \times 25 \text{ nm}$ від азимута φ для різних значень кількості вузлів та поляризації (a , b – горизонтальна; v , z – вертикальна)

Розраховуємо максимальну відносну похибку кожного значення N_0 за кутом місця θ та азимуту φ

$$\delta_{N_a}(N_0) = \max[\delta_{N_{\theta, \varphi}}(N_0)] \quad (8)$$

та отримуємо залежності для вибору кількості вузлів N на поверхні даної наночастинки. Залежності δ_{N_a} для значення ППР (a) та ПЗ (b) від кількості вузлів N_0 показані на рисунку 3.

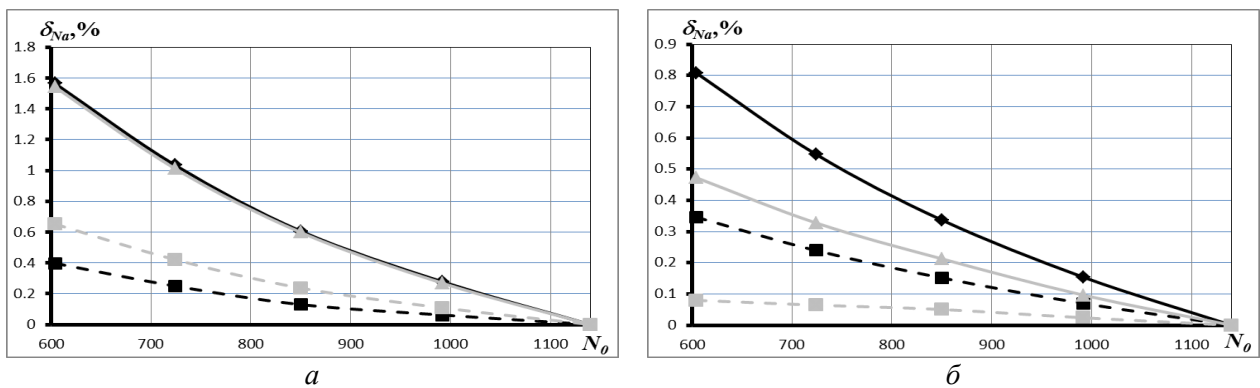


Рисунок 3 – Залежність δ_{N_a} ППР σ_{sc} (a) та ПЗ σ_{ext} (b) наночастинок від кількості вузлів N_0

По осі ординат відкладається значення відносної похибки δ_{N_a} у відсотках, по осі абсцис – кількість вузлів N_0 . Чорним кольором показані залежності $\delta_{N_a}(N_0)$ для горизонтальної поляризації

падаючої хвилі, сірим – для вертикальної поляризації. Суцільна лінія відображає залежність від кута місця θ , а пунктирна – від азимута φ .

Проведені розрахунки показують, що для задоволення умови $\delta_a \leq 1\%$ можна обмежити значення $N = 724$ для будь-яких кутів опромінення наночастинок заданого розміру і будь-якої поляризації. Максимальна відносна похибка у всьому діапазоні розглянутих кутів та будь-якої поляризації для $N = 724$ буде складати 0,91 %.

Величину $N = 724$ можна здавати достатньо великою для частки з розмірами 1/10 довжини хвилі. Проте точність розрахунку характеристик ЕМ розсіювання металевої наночастинки срібла залежить не тільки від розміру розсіювача (зокрема його найбільшого діаметра), але також від його кривини.

Аналогічні дослідження були проведені для наночастинок розміром $a = a_x = a_y = 100$ нм, $a_z = 20$ нм. На рисунку 4 наведені залежності нормованих значень ППР $\sigma_{sc}/(\pi a^2)$ та ПЗ $\sigma_{ext}/(\pi a^2)$ наночастинки від кута місця θ , азимут $\varphi = 0^\circ$, для значень числа N (1140, 1296, 1464 та 1646) і горизонтальної (a, \bar{b}) та вертикальної (\bar{v}, \bar{z}) поляризації на довжині падаючої хвилі $\lambda = 300$ нм.

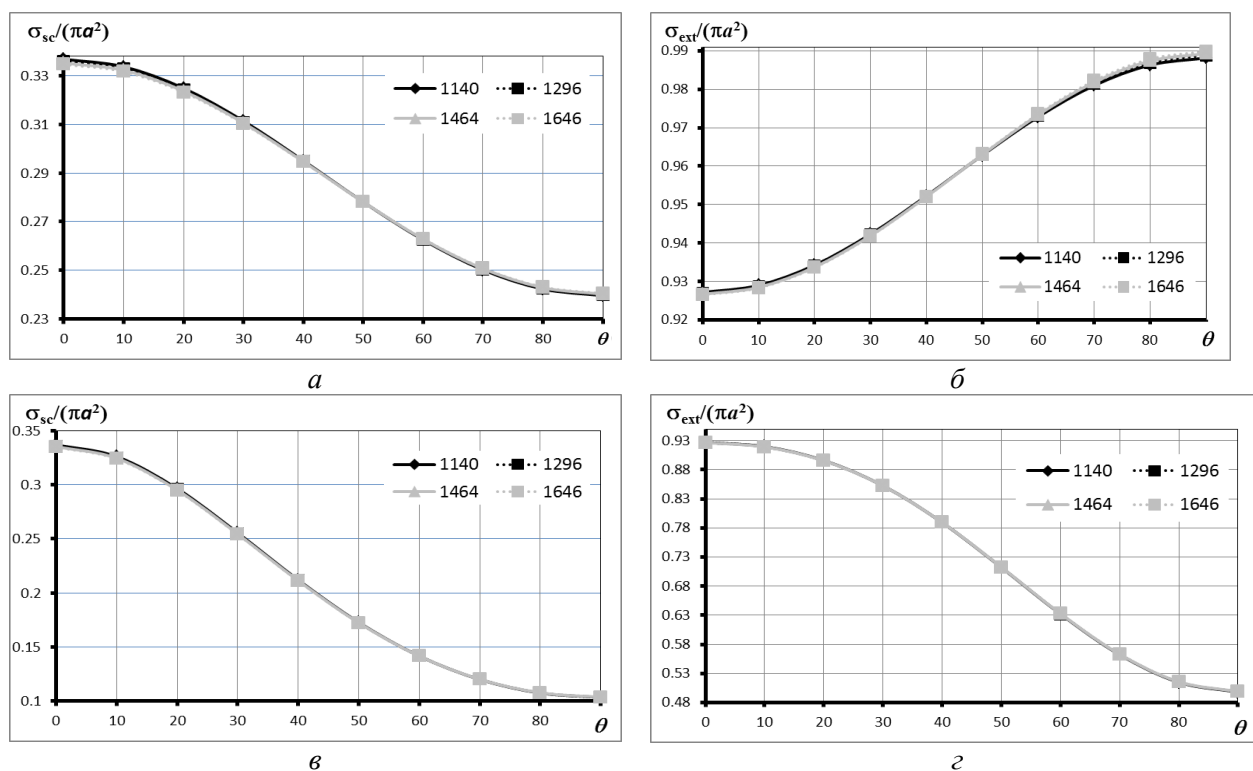


Рисунок 4 – Залежність нормованих значень ППР σ_{sc} (a, \bar{v}) і ПЗ σ_{ext} (\bar{b}, \bar{z}) наночастинки розміром 100 нм×100 нм×20 нм від кута місця θ для різних значень кількості вузлів та поляризації (a, \bar{b} – горизонтальна, \bar{v}, \bar{z} – вертикальна)

На рисунку 5 показані залежності нормованих значень ППР $\sigma_{sc}/(\pi a^2)$ і ПЗ $\sigma_{ext}/(\pi a^2)$ наночастинки від азимута φ при фіксованому куті місця $\theta = 50^\circ$ для різних значень кількості вузлів N (1140, 1296, 1464 та 1646) та різної поляризації на довжині падаючої ЕМ хвилі $\lambda = 300$ нм.

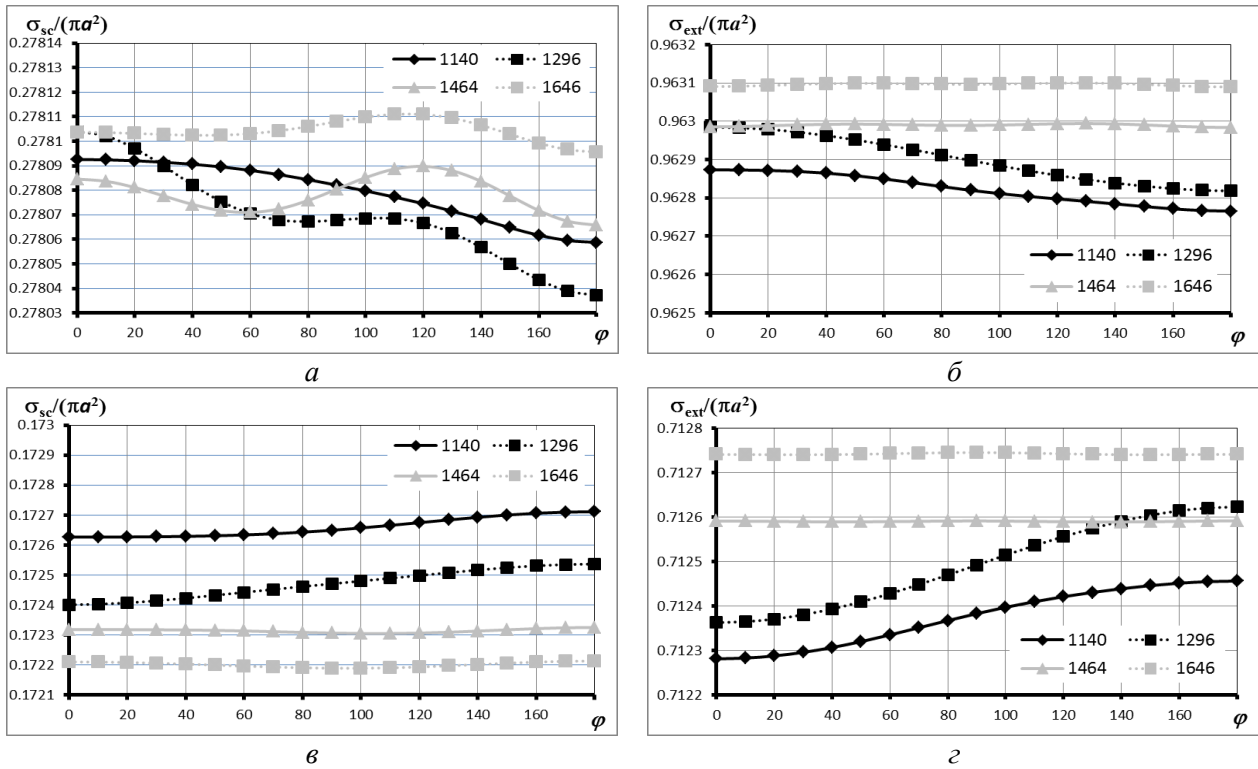


Рисунок 5 – Залежність нормованих значень ППР σ_{sc} (а, в) та ПЗ σ_{ext} (б, г) наночастинки розміром $100 \text{ nm} \times 100 \text{ nm} \times 20 \text{ nm}$ від азимута φ для різних значень кількості вузлів та поляризації (а, б – горизонтальна, в, г – вертикальна)

Як еталон поверхня еліпсоїда поділена на $N_0 = 2468$ вузлів (для забезпечення $\delta_a \leq 1\%$). Залежності δ_{N_a} для значення ППР (а) та ПЗ (б) від кількості вузлів N_0 від 1100 до 2468 показані на рисунку 6.

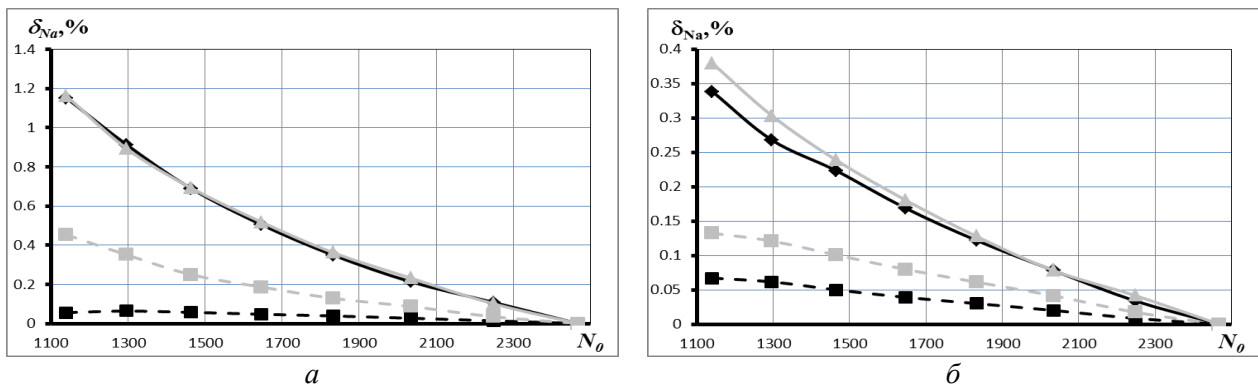


Рисунок 6 – Залежність δ_{N_a} ППР σ_{sc} (а) і ПЗ σ_{ext} (б) наночастинок від кількості вузлів N_0

Чорним кольором показані залежності $\delta_{N_a}(N_0)$ для горизонтальної поляризації падаючої хвилі, сірим – для вертикальної поляризації. Суцільна лінія відображає залежність від кута місця θ , а пунктирна – від азимута φ .

Проведені розрахунки показують, що для задоволення умови $\delta_a \leq 1\%$ можна обмежити значення $N = 1296$ для будь-яких кутів опромінення наночастинок заданого розміру і будь-якої поляризації.

Максимальна відносна похибка у всьому діапазоні розглянутих кутів та будь-якої поляризації для $N = 1296$ буде складати 0,89 %.

Наночастинки таких розмірів будуть використовуватися як базові у побудові різних структур. Тому для забезпечення внутрішньої збіжності та потрібної точності $\delta_a \leq 1\%$ розрахунку характеристик ЕМ розсіювання структур, які складаються з K наночастинок, кількість вузлів струму $N_{\text{стр}}$ на поверхні структури S розраховується за допомогою формули $N_{\text{стр}} = N \cdot K$. Наприклад, для еквідистантної ґрати з 16 наночастинок розміром $75 \text{ нм} \times 75 \text{ нм} \times 25 \text{ нм}$ кількість вузлів струму буде дорівнювати $N_{\text{стр}} = 724 \cdot 16 = 11584$, а для квадрата з чотирьох наночастинок розміром $100 \text{ нм} \times 100 \text{ нм} \times 20 \text{ нм}$ відповідно $N_{\text{стр}} = 1296 \cdot 4 = 5184$.

Таким чином, за допомогою наведеного підходу визначені та обґрунтовані параметри методу розрахунку характеристик ЕМ розсіювання наночастинок срібла різного розміру в оптичному діапазоні.

Висновки

1. Металеву наночастинку, яка має розміри від десятків до сотень нанометрів, можна розглядати як резонансний розсіювач, наповнений однорідним матеріалом, що має комплексну діелектричну проникність. Для розв'язання тривимірних задач розсіювання на структурах із наночастинок в оптичному діапазоні використовують чисельний метод, що ґрунтується на застосуванні СІРМ. Як характеристики ЕМ розсіювання металеві наночастинки срібла розглядаються такі показники, як повний переріз розсіювання та переріз загасання.

2. Запропонований метод задання вузлів струму та їх кількості N на поверхні S_i однієї наночастинки, які забезпечують внутрішню збіжність та найкращу точність обчислювального алгоритму за допомогою математичного моделювання характеристик ЕМ розсіювання металеві наночастинки.

3. Проведені розрахунки внутрішньої збіжності алгоритму для двох різних наночастинок, що мають розміри півосей $a_x = a_y = 75 \text{ нм}$, $a_z = 25 \text{ нм}$ та $a_x = a_y = 100 \text{ нм}$, $a_z = 20 \text{ нм}$. Отримано, що для першої наночастинки для задоволення умови $\delta_a \leq 1\%$ кількість вузлів струму на поверхні дорівнює $N = 724$ для будь-яких кутів опромінення і будь-якої поляризації. Максимальна відносна похибка у всьому діапазоні розглянутих кутів та будь-якої поляризації складає 0,91 %. Для другої наночастинки кількість вузлів струму на поверхні дорівнює $N = 1296$, а максимальна відносна похибка складає 0,89 %.

Напрямом подальшого дослідження є отримання та аналіз характеристик ЕМ розсіювання різних структур із наночастинок срібла для різних умов опромінювання та поляризації падаючої ЕМ хвилі.

Перелік джерел посилання

1. Roco Mihail C. The long view of nanotechnology development: the National Nanotechnology Initiative at 10 years. *Journal of Nanoparticle Research*. 2011. Vol. 13. Pp. 427 – 445. DOI:<https://doi.org/10.1007/s11051-010-0192-z>

2. Drexler E. K., Peterson C. H., Pergamit G. Unbounding the future: The nanotechnology revolution. New York, 1993. 215 p.

3. Innovations in Nanotechnology at the NSECs and NNIN, Highlights of Achievements. June 2011. *National Science Foundation*. URL: www.cein.ucla.edu/PDFs/NSF-report-NSEC=NNIN-June-2011.pdf (дата звернення: 20.05.2024).

4. David P., Scott John T. The Economic Impacts of Early Stage Consensus Standards Development: A Case Study of Nanotechnology Documentary Standards. May, 2015. *National Institute of Standards and Technology*. URL: <http://surl.li/tjfon> (дата звернення: 20.05.2024).

5. Алемасова А. С., Роқун А. Н., Шевчук І. О. Аналітична атомно-абсорбційна спектроскопія. Донецьк : ДНУ, 2003. 308 с.

6. Encyclopedia of Condensed Matter Physics / ed. Franco Bassani, Gerald L. Liedl and Peter Wyder. Elsevier Academic Press, 2005. 458 p. URL: <https://books.google.com.ua/books?id=fEG5QgAACAAJ> (дата звернення: 20.05.2024).
7. Evanoff D. D., Chumanov G. Synthesis and Optical Properties of Silver Nanoparticles and Array. *ChemPhysChem*. 2005. Vol. 6. No 7. Pp. 1221–1231. DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.200500113>
8. Cheng Q., Jiang W. X., Cui T. J. Investigations Of The Electromagnetic Properties Of Three-Dimensional Arbitrarily-Shaped Cloaks. *Progress In Electromagnetics Research*. 2009. Vol. 94. Pp. 105–117. DOI: <https://doi.org/10.2528/PIER09060705>
9. Alù A., Engheta N. Multifrequency optical cloaking with layered plasmonic shells. *Physical Review Letters*. 2008. Vol. 100 (11) : 113901. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.113901>
10. Silva-Macedo J. A., Romero M. A., Borges B.-H. V. An extended FDTD method for the analysis of electromagnetic field rotators and cloaking devices. *Progress In Electromagnetics Research*. 2008. Vol. 87. Pp. 183–196.
11. Schurig D., Pendry J. B., Smith D. R. Calculation of material properties and ray tracing in transformation media. *Optics Express*. 2006. Vol. 14 (21). Pp. 9794–9804. DOI: <https://doi.org/10.1364/OE.14.009794>.
12. Müller C. Foundations of the Mathematical Theory of Electromagnetic Waves, Springer, Berlin, 1969. 356 p. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-662-11773-6>
13. Surface Integral Equation-Based Characteristic Mode Formulation for Penetrable Bodies / Ylä-Oijala P., Wallén H., Tzarouchis D., Sihvola A. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*. 2018. Vol. 66. No. 7. Pp. 3532 – 3539. DOI: <https://doi.org/10.1109/TAP.2018.2835313>.
14. Sukharevsky O. I., Zalevsky G. S., Vasilets V. A. Modeling of ultrawideband impulse scattering by aerial and subsurface resonant objects based on integral equations. *Advanced UWB Radar: Signals, Targets, and Applications* / in J. D. Taylor (ed.). Boca Raton : CRC Press. 2016. Pp. 195 – 235.
15. Applied Problems in the Theory of Electromagnetic Wave Scattering / in O. I. Sukharevsky (ed.). IOP Publishing, Bristol. 2022. 350 p.
16. Zalevsky G. S., Sukharevsky O. I. Calculation of Scattering Characteristics of Aerial Radar Objects of Resonant Sizes Based on Iterative Algorithm. *Radioelectronics and Communications Systems*. 2014. Vol. 57. No. 6. Pp. 244–253. DOI: <https://doi.org/10.3103/S0735272714060028>.
17. Ковальчук Б. В., Шіпка Й. Г. Основи математичного аналізу : підручник : у 2-х ч. Львів : Вид. центр ЛНУ ім. І. Франка, 2010. 418 с.
18. Залевский Г. С. Метод расчета характеристик рассеяния диэлектрических объектов резонансных размеров. *Збірник наукових праць Харківського університету Повітряних Сил*. Харків, 2014. Вип. 2 (39). С. 66–69.
19. Johnson P. B. Christy R. W. Optical constants of the noble metals. *Physical Review B 50th Anniversary Milestones*. 1972. Vol. 6. Issue 12. Pp. 4370–4379.

Стаття надійшла до редакції 02.04.2024 р.

UDC 621.396.96

S. Horielyshev

JUSTIFICATION OF CALCULATION METHOD PARAMETERS CHARACTERISTICS OF ELECTROMAGNETIC SCATTERING OF A METALLIC NANOPARTICLE IN THE OPTICAL RANGE

Structures of nanoparticles of noble metals in the optical range are of great interest in solving practical problems of building and using optical antennas and sensors for communication, creating solar cells, coatings for masking objects in the optical range and their detection. Currently, intensive research is being carried out on resonance effects during the scattering and absorption of light by such nanosized particles. There are both experimental methods of studying the characteristics of electromagnetic scattering of nanostructures in the optical range, and methods of mathematical modeling. Mathematical methods are subject to strict requirements regarding accuracy and ensuring the convergence of calculation results.

The method of integral equations is widely used to model scattering from various objects with finite dielectric constants. At the same time, in the optical range, scattering on nanoparticles, as homogeneous resonant objects, has its own characteristics that affect the accuracy and convergence of the calculation algorithm.

The article examines the issue of choosing and justifying the parameters of the method for calculating the characteristics of electromagnetic scattering of nanoparticles of noble metals of different sizes in the optical range, which are based on the application of a system of Müller integral equations.

The internal convergence of the algorithm for calculating electromagnetic scattering characteristics depends on the size and shape of nanoparticles. When calculating according to the proposed numerical method, the number of nodes in which the current density was calculated was chosen in such a way that there was an internal convergence of the algorithm characterized by a given value $\approx 1...3\%$.

The required number of current nodes and the discretization step on the surface of one nanoparticle of two sizes (75x75x25 and 100x100x20) were obtained, which ensure internal convergence and the best accuracy of the proposed computational algorithm. Nanoparticles of these sizes will be used as the basis for the construction of various structures.

The direction of further research is obtaining and analyzing the characteristics of electromagnetic scattering of various structures made of silver nanoparticles under different conditions of irradiation and polarization of the incident electromagnetic wave.

K e y w o r d s : convergence, accuracy, surface, radius of curvature, discretization step, nanoparticle.

Горєлишев Станіслав Анатолійович – кандидат технічних наук, доцент, провідний науковий співробітник науково-дослідного центру Національної академії Національної гвардії України.
<https://orcid.org/0000-0003-1689-0901>