UN MODELLO NUMERICO VELOCE PER L'ANALISI DI ARRAY DI NANOPARTICELLE METALLICHE

L. Dal Negro[1]*, G. Miano*[2]*, G. Rubinacci*[2]*, A. Tamburrino*[3]*, S. Ventre*[3]*, F. Villone*[3]

[1]Department of Electrical and Computer Engineering, Boston University, Boston, MA, USA
[2]DIEL, Università Federico II di Napoli, Via Claudio 21, 80125, Napoli
[3]DAEIMI, Università di Cassino, Via Di Biasio 43, 03043 Cassino (FR)

Questa memoria descrive un modello numerico veloce per il calcolo dei modi plasmonici quasi-elettrostatici in array di nanoparticelle.

I Surface plasmons-polaritons (SPP), cui sono collegati i modi plasmonici, sono oscillazioni collettive degli elettroni localizzate sulla superficie di strutture metallico-dielettriche [1]. Sotto condizioni opportune gli SPP possono accoppiarsi in modo risonante con il campo elettromagnetico a frequenze ottiche o possono essere fortemente localizzati all'interfaccia di nano strutture metalliche su scale molto al di sotto della lunghezza d'onda. Tra le applicazioni peculiari degli SPP menzioniamo l'optical sensing ad intensificazione di campo e il subwavelength guiding in guide d'onda plasmoniche [2]. Gli array di nano particelle metalliche hanno avuto un ruolo molto importante sin dall'inizio dello studio della plasmonica e sono, tuttora, molto promettenti in termini di potenziali applicazioni. Per questo motivo, la modellistica numerica dell'interazione tra gli array di nano particelle metalliche ed il campo elettromagnetico ha un ruolo molto importante in questo contesto.

Tra i metodi numerici più diffusi menzioniamo l'approssimazione discreta a dipolo e le differenze finite nel dominio del tempo. Tuttavia, per studiare accuratamente le proprietà spettrali, nonché la distribuzione del campo elettromagnetico vicino e dentro nanoparticelle di forma arbitraria, è opportuno avere a disposizione dei metodi numerici 3D accurati e veloci.

Il metodo proposto in questa memoria si basa su una formulazione integrale full 3D del problema dell'interazione tra l'array di nanoparticelle, modellato come un dielettrico con opportuna costante dielettrica, ed il campo elettromagnetico. L'incognita del problema è la corrente di spostamento $\mathbf{J}(\mathbf{r}) = j\omega(\varepsilon - \varepsilon_0)\mathbf{E}(\mathbf{r})$, non nulla solo nel dominio occupato dall'array. Nello studio del comportamento di queste strutture per lunghezze d'onda molto maggiori delle scale di interesse del problema, per evitare forti instabilità numeriche è necessario scomporre l'incognita nella somma di una componente solenoidale $\mathbf{J}^L$ e di una componente non solenoidale $\mathbf{J}^S$ come descritto in [3, 4]. Per lunghezze d'onda molto maggiori delle scale di interesse del problema, se il campo elettrico incidente è essenzialmente irrotazionale, il modello numerico associato all'equazione integrale per $\mathbf{J}$ è $\left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon-\varepsilon_0}\underline{\underline{A}} + \underline{\underline{D}}^{(0)}\right)\left(\frac{\underline{I}_S}{j\omega}\right) = \varepsilon_0 \underline{V}_S$ dove $\underline{I}_S$ è il vettori dei coefficienti dei gradi di libertà che descrive $\mathbf{J}^S$, $\underline{\underline{A}}$ e $\underline{\underline{D}}^{(0)}$ sono opportune matrici e $\underline{V}_S$ è il vettore dei termini noti [3, 4]. I modi plasmonici si ottengono risolvendo il problema omogeneo ($\underline{V}_S$=$\underline{0}$) il quale è equivalente al problema agli autovalori generalizzato $\underline{\underline{D}}^{(0)}\underline{U} = \lambda\underline{\underline{A}}\underline{U}$. Il calcolo degli autovalori è una sfida che diventa impegnativa, in termini di costo computazionale, al crescere del numero di elementi dell'array. In particolare, in [5] il problema è stato affrontato utilizzando un algoritmo iterativo basato su una variante del metodo di Lanczos (libreria ARPACK). L'algoritmo iterativo in questione richiede che l'utente fornisca un algoritmo per il calcolo del prodotto $\underline{y} = \underline{\underline{D}}^{(0)}\underline{x}$ e della soluzione del sistema $\underline{\underline{A}}\underline{w} = \underline{y}$, dove $\underline{x}$ è un vettore arbitrario. La soluzione di $\underline{\underline{A}}\underline{w} = \underline{y}$ può essere ottenuta efficacemente considerando che $\underline{\underline{A}}$ è una matrice diagonale a blocchi (un blocco per ogni singola particella) e che, se le particelle sono uguali, tutti i blocchi sono uguali. Il problema complesso, invece, è il calcolo di $\underline{y} = \underline{\underline{D}}^{(0)}\underline{x}$ in quanto la matrice $\underline{\underline{D}}^{(0)}$ è piena. Questo problema è stato trattato con un algoritmo di tipo SVD ricorsivo a blocchi in grado di ridurre il costo computazionale ad una funzione crescente solo linearmente con il numero di incognite [6]. Nelle figure 1-3 si riportano degli esempi numerici relativi ad un array regolare e quasi-periodico (Fibonacci) costituito da 145 nanoparticelle.

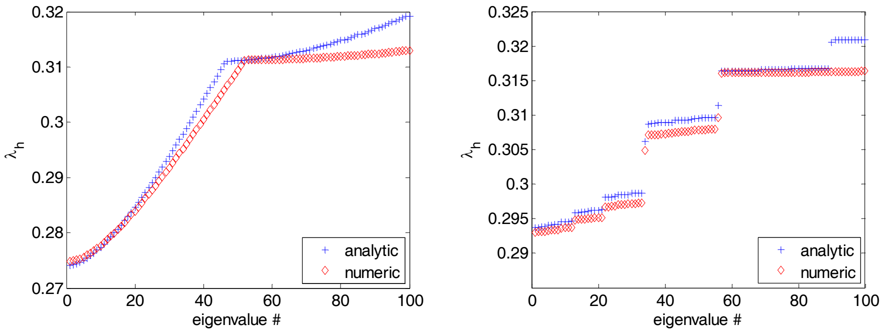

Figura. 1 Diagramma di dispersione dei modi plasmonici per l'array regolare (sinistra) e quasi-periodico (destra). Il problema è stato discretizzato con 296960 elementi per un totale di 55535 incognite per $\mathbf{J}^S$ e 566225 incognite per $\mathbf{J}^L$.

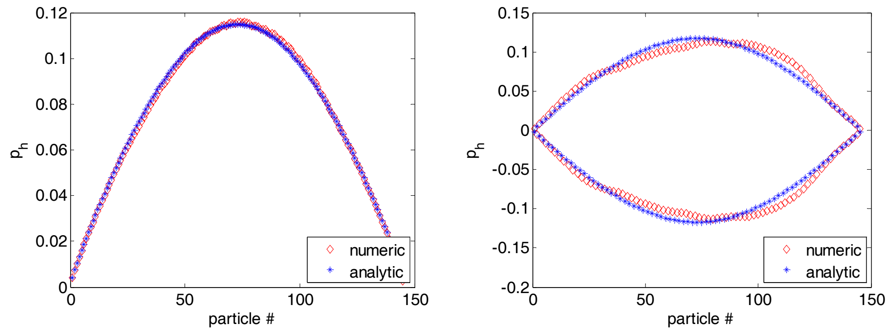

Fig. 2 Oscillazioni di dipolo corrispodenti al primo modo longitudinale (sinistra) ed al primo modo trasversale (destra).

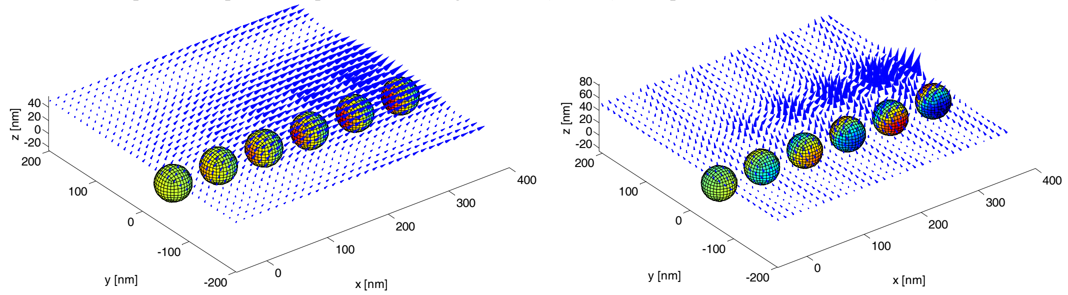

Figura 3. Andamento del campo elettrico per il primo modo longitudinale (sinistra) ed il primo modo trasversale (destra).

REFERENZE

[1] S. Lal, S. Link, N. Halas. *Nature Photonics*, 1, 641 (2007).

[2] Ning-Ning Feng, M. L. Brongersma and L Dal Negro, *IEEE J. of Quantum Electronics*, 43, pp. 479 (2007)

[3] G. Rubinacci, A. Tamburrino, *IEEE Trans. On Antennas and Propagation*, 54, pp. 2977-2989 (2006).

[4] G. Miano, G. Rubinacci, A. Tamburrino. *Compel*, 26, pp. 586-599 (2007).

[4] L. Dal Negro, G. Miano, G. Rubinacci, A. Tamburrino, S. Ventre, presentato alla *IEEE Conference on Electromagnetic Field Computation* (CEFC), Atene (Grecia), 2008.

[5] A. Maffucci, G. Rubinacci, A. Tamburrino, S. Ventre, F. Villone, proceedings of the *23rd Annual Review of Progress in Applied Computational Electromagnetics* (ACES), Verona (Italy), pp. 1652-1657, 2007.