

Московский физико-технический институт  
(национальный исследовательский университет)

На правах рукописи

**Сапегин Александр Андреевич**

**ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВОЛНОВОДОВ НА ДИСКРЕТНЫХ  
НАНОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕМЕНТАХ**

2.2.2. – Электронная компонентная база  
микро- и наноэлектроники, квантовых устройств

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель  
д.ф.-м.н.  
Барabanенков М.Ю.

Москва – 2024

## ОГЛАВЛЕНИЕ

	С.
Введение.....	4
Глава 1. Волноводы современных фотонных интегральных структур (обзор литературы) .....	12
1.1 Закон Мура, его аналоги и интегральная фотоника.....	12
1.2 Причина стагнации тактовой частоты процессоров .....	14
1.3 Электрические линии межъядерной коммутации.....	15
1.4 Коммутационные линии на основе волноводов.....	18
1.5 Технологические платформы интегральной фотоники.....	22
1.6 Плазмонные волноводы .....	26
1.7 CROW-волноводы .....	30
1.8 Метод квази-сепарабельного Т-оператора.....	33
1.9 Другие методы расчета дискретных волноводов .....	41
Глава 2. Задача о распространении ЭМ возбуждения вдоль конечной линейной цепочки частиц .....	47
2.1 Постановка задачи .....	47
2.2 Приближение ближайших соседей .....	50
2.3 Оценка вклада дальних соседей.....	58
2.4 Возбуждение двух крайних частиц цепочки .....	59
2.5 Выводы к главе 2 .....	60
Глава 3. Численные результаты для цепочек кремниевых и золотых частиц .....	61
3.1 Формулы и величины параметров для численного расчета.....	61
3.2 Результаты расчетов токов при возбуждении крайней частицы линейной цепочки частиц .....	62
3.3 Приближенный способ расчета параметра волнового взаимодействия соседних частиц цепочки .....	82

3.4 Результаты расчетов токов при возбуждении крайних частиц с двух концов линейной цепочки $S_i$ частиц.....	88
3.5 Выводы к главе 2 .....	96
Основные результаты и выводы .....	98
Список сокращений и условных обозначений.....	100
Список публикаций по теме диссертации .....	101
Список литературы .....	102
Приложение 1 Упрощение Т-оператора рассеяния в случае малых сферических частиц.....	110
Приложение 2 Расчет коэффициентов $M_i$ .....	119
Приложение 3 Частотная дисперсия диэлектрической проницаемости материала частиц .....	123
Приложение 4 Собственные моды димера.....	128

## ВВЕДЕНИЕ

### **Актуальность темы исследования.**

Прогресс во многих областях науки и техники напрямую связан со скоростью передачи и обработки информации. Дальнейшее увеличение скорости путем совершенствования топологии и уменьшения размеров элементов электронных интегральных схем (ИС) и коммутационных металлизированных линий достигает физического и технологического предела [1,2]. Увеличение же производительности путем применения многоядерных технологий ограничивается, опять же, эффективностью линий межъядерной коммутации. Эти обстоятельства обусловили создание концепций коммутационных элементов на других физических принципах, в частности, на принципах интегральной фотоники [3,4]. Фундаментальные преимущества оптических информационных линий, в том числе в виде полосковых волноводов, интегрируемых в структуры микроэлектроники на уровне «системы-на-кристалле» состоят в (а) отсутствии паразитных емкостных и индуктивных эффектов; (б) полном решении проблемы согласования импеданса в электронных цепях, (в) резком уменьшении рассеиваемой мощности, (г) использовании спектрального мультиплексирования, (д) повышении частотного порога дисперсионного расплывания электромагнитного (ЭМ) сигнала, (е) манипуляции временными характеристиками оптического сигнала; (ж) помехозащищенности оптических каналов. В итоге, динамический частотный диапазон ИС может быть расширен на 3-4 порядка вплоть до  $10^{15}$  Гц при широкой полосе модуляции оптического сигнала, а энергозатраты на передачу одного бита информации могут составить 1 пДж, что на порядок меньше, чем у полностью электронной ИС.

В настоящее время классические полосковые волноводы, пересечения волноводов и другие элементы коммутации на их основе уже нашли применения в первых фотонных ИС (ФИС) (Intel, GlobalFoundries, IBM) [5,6]. Однако, перекрестные помехи близкорасположенных стандартных полосковых волноводов ограничивают степень интеграции ФИС [7]. Для устранения перекрестных помех

был предложен переход от классических объемных волноводных мод к структурам, поддерживающим более локализованные в поперечном направлении поверхностные ЭМ волны типа поверхностных плазмон-поляритонов (ППП) [8,9]. Оказалось, что ППП на телекоммуникационной длине волны 1,55 мкм распространяются вдоль металлодиэлектрического волновода до 3 мм в теории [10] и до 500 мкм в эксперименте [11,12]. Затухание происходит вследствие существенных омических потерь волны в металлической части волновода.

Альтернативным подходом являются дискретные волноводы, состоящие из нанорезонаторов, взаимодействующих волновым образом [13,14]. Цепочки нанорезонаторов известны в научной периодике как Coupled Resonator Optical Waveguide (далее – CROW) [15]. Они имеют ряд преимуществ по сравнению с регулярными волноводами. Во-первых, возможна реализация изгибов CROW под большими углами с малыми потерями и практически без отражений. Во-вторых, возможна реализация компактных оптических линий задержки на основе эффекта т.н. «медленного света» в CROW. В-третьих, возможно усиление нелинейных эффектов вследствие низкой групповой скорости и существенных амплитуд ЭМ поля в локализованных модах. В-четвертых, если при изготовлении нанопроволок достаточной длины имеются существенные технологические сложности, то к настоящему времени разработаны эффективные и достаточно дешевые приемы изготовления цепочек наночастиц различной геометрии и длины - от димеров до протяженных областей [16-18].

**Цель работы:** исследование распространения электромагнитного возбуждения вдоль конечной линейной цепочки немагнитных изотропных диэлектрических или металлических сферических малых в масштабе длины волны частиц при возбуждении крайней частицы цепочки или крайних частиц на противоположных концах цепочки внешним коллимированным электромагнитным излучением, поляризованным перпендикулярно оси цепочки.

**Задачи исследования:**

Решение задачи о распространении электромагнитного возбуждения вдоль конечной периодической линейной цепочки немагнитных изотропных диэлектрических или металлических частиц, взаимодействующих волновым образом, следует провести на основе уравнения для наведенных в частицах самосогласованных токов. Это уравнение выведено ранее методом квантово-механического квазисепарабельного  $T$ - оператора рассеяния в теории многократного рассеяния ЭМ волн в плотных ансамблях частиц произвольного размера и формы. Для получения аналитических результатов следует ограничиться учетом электрического дипольного взаимодействия малых в масштабе длины волны сферических частиц конечной цепочки. В работе поставлены следующие задачи:

- в приближении волнового взаимодействия ближайших соседей рассчитать самосогласованные токи, возбуждаемые в частицах цепочки с учетом частотной дисперсии диэлектрической проницаемости ряда материалов частиц;
- исследовать точное резонансное условие формирования моды дальнего распространения с точки зрения возбуждения собственных мод димера;
- рассчитать и сопоставить условия формирования моды дальнего распространения вдоль цепочки металлических и диэлектрических частиц на примере частиц золота и кремния;
- провести расчеты радиационных потерь в линейной цепочке частиц посредством расчета коллективного сечения экстинкции цепочки в приближении ближайших соседей;
- провести расчеты токов, наведенных в частицах короткой цепочки, при возбуждении крайних частиц на противоположных концах цепочки;
- рассчитать в первом порядке теории возмущений вклад волнового взаимодействия дальних соседей в амплитуду токов, наведенных в частицах линейной цепочки.

### **Научная новизна.**

1. На основе аналитического исследования резонансного поведения комплексного параметра волнового взаимодействия соседних частиц впервые показано, что мода дальнего распространения, возбуждаемая перпендикулярно поляризованным светом в линейной конечной цепочке сферических металлических частиц с дипольным взаимодействием ближайших соседей, отсутствует в цепочке диэлектрических /полупроводниковых частиц.
2. Впервые дано физическое объяснение связи условия появления моды дальнего распространения электромагнитного возбуждения в цепочке частиц с дипольным взаимодействием ближайших соседей с условием возбуждения собственных мод димера.
3. Впервые в первом порядке теории возмущений показан относительный вклад электрического дипольного волнового взаимодействия дальних соседей в амплитуду моды дальнего распространения в линейной цепочке частиц.
4. Впервые предложен принцип функционирования цепочки частиц в режиме оптического компаратора. В частности, установлен характер зависимости токов, наведенных в короткой цепочке кремниевых частиц, от отношения амплитуд электрического поля в двух пучках электромагнитного излучения, возбуждающих крайние частицы цепочки.

### **Научная и практическая значимость.**

**Научная значимость работы** заключается в качественном и количественном объяснении условий появления неизлучающей моды дальнего распространения электромагнитного возбуждения в цепочках частиц. Кроме того, рассчитан и показан вклад волнового взаимодействия дальних соседей в амплитуду неизлучающей моды в линейной цепочке частиц. **Практическая ценность результатов диссертации** заключается в том, что математическая модель и её программная реализация позволяют рассчитать амплитуды токов, наведенных в частицах цепочки и, тем самым, найти частоту моды дальнего распространения ЭМ возбуждения, или указать на отсутствие такой моды, а также количественно исследовать

возможность реализации режима оптического компаратора в цепочках частиц. Данные результаты могут быть полезны экспериментальным научным группам для создания волноводов и систем оптических межсоединений на основе линейных цепочек наночастиц.



**На защиту выносятся следующие положения:**

1. Электромагнитная мода дальнего распространения, возбуждаемая перпендикулярно поляризованным светом в линейной конечной цепочке малых сферических изотропных немагнитных металлических частиц, с электрическим дипольным взаимодействием ближайших соседей, отсутствует в цепочке диэлектрических /полупроводниковых частиц.
2. Точное резонансное условие формирования моды дальнего распространения в цепочке малых сферических частиц с дипольным взаимодействием ближайших соседей совпадает с условием возбуждения собственных мод пары частиц (димера).
3. При электромагнитном возбуждении двух крайних частиц короткой цепочки число частиц может быть подобрано так, что величины возбуждаемых в частицах токов будут линейным образом зависеть от соотношения амплитуд возбуждающих пучков.
4. Вклад взаимодействия дальних соседей в величины наведенных токов в частицах линейной цепочки практически не зависит от номера частицы в цепочке за исключением осциллирующего характера вклада на краях цепочки, где взаимодействие дальних частиц обуславливает уменьшение амплитуды токов по сравнению с учетом взаимодействия только ближайших соседей.

**Степень достоверности и апробация результатов.**

Основные положения и выводы диссертации доложены на 5 международных и 4 всероссийских научных конференциях:

1. Российская конференция и школа молодых ученых по актуальным проблемам полупроводниковой фотоэлектроники "ФОТОНИКА 2017", доклад: «Моделирование элементов интегрированных структур радиофотоники», 11-15 сентября 2017 г., Новосибирск, Россия;
2. Международный форум "Микроэлектроника-2017". 3-я Международная научная конференция "Электронная компонентная база и электронные модули",

- доклад: «Интегрированные в структуры микроэлектроники волноводы на дискретных наноразмерных элементах», 2-7 октября 2017, Алушта, Россия;
3. 60-ая Всероссийская научная конференция МФТИ, доклад: «Применение волноводных пересечений с использованием дискретных элементов в интегральной фотонике», 20-26 ноября 2017, Долгопрудный, Россия;
  4. Международная конференция "Micro- and Nanoelectronics – 2018" (ICMNE-2018), доклад: «Theory and numerical modeling of nanoresonators, discrete waveguides, and modulators of planar radio-photonics assemblies», 1-5 октября 2018, Звенигород, Россия
  5. Международная конференция Nanophotonics and Micro/Nano Optics 2019 "NANOP 2019", доклад: «Linear chain of nanoparticles for two optical signals processing», 4-6 сентября 2019, Мюнхен, Германия;
  6. Международный форум "Микроэлектроника-2019". 5-я Международная научная конференция "Электронная компонентная база и электронные модули", доклад: «Субволновой интерферометр Фабри – Перо на основе линейной цепочки наночастиц», 30 сентября – 5 октября 2019, Алушта, Россия;
  7. XXI Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике, доклад: «Оптический компаратор на основе цепочки наночастиц», 25–29 ноября 2019, Санкт-Петербург, Россия
  8. Международный форум "Микроэлектроника-2020". 6-я Международная научная конференция "Электронная компонентная база и электронные модули", доклад: «Физические принципы построения оптической нанометки на основе треугольного кластера наночастиц», 28 сентября – 3 октября 2020, Алушта, Россия;
  9. Российская конференция и школа молодых ученых по актуальным проблемам полупроводниковой фотоники (с участием иностранных ученых) «ФОТОНИКА 2023», доклад: «Резонансное поведение коллективного сечения

экстинкции треугольного кластера малых частиц с электрическим дипольным рассеянием», Новосибирск, 4-8 сентября 2023 г.

**Публикации.** Материалы диссертации опубликованы в 13 научных работах, в том числе в 9 тезисах докладов конференций и 4 статьях. Из них, в список ВАК входят 2 публикации, индексируются системами Web of Science (Core Collection) и Scopus – 2 публикации.

**Личный вклад соискателя.** Разработка физико-математической модели, весь объем численного моделирования и обработка полученных результатов выполнялись автором лично. В том числе, автором выполнено аналитическое исследование режимов распространения электромагнитного возбуждения, разработка и реализация численных алгоритмов; автором предложен принцип функционирования цепочки частиц в режиме оптического компаратора, проведены численные расчеты зависимости амплитуд токов в таком компараторе. Автор выражает благодарность научному руководителю в части постановки исследовательских задач, ценных замечаний и исправлений.

**Структура и объём диссертации.** Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения и списка литературы. Диссертация изложена на 129 страницах, содержит 53 рисунка, 2 таблицы и 4 приложения. Список литературы содержит 140 наименований.

## ГЛАВА 1. ВОЛНОВОДЫ СОВРЕМЕННЫХ ФОТОННЫХ ИНТЕГРАЛЬНЫХ СТРУКТУР (ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ)

### 1.1 Закон Мура, его аналоги и интегральная фотоника

Магистральным направлением развития оптики сегодня является миниатюризация и интеграция оптических устройств в микросистемную технику. Можно сказать, что фотоника вступает в эпоху конкуренции с кремниевой микроэлектроникой. Действительно, одним из основных направлений развития микроэлектроники сегодня является увеличение скорости передачи и обработки информации. При этом увеличение скорости путем совершенствования электронных интегральных схем (ИС) достигает физического и технологического предела [1]. Передовые топологические нормы на данный момент составляют десятки нанометров. Дальнейшее уменьшение размера транзистора приближает его к размеру нескольких атомов, что обуславливает существенный вклад квантовых эффектов в параметры транзисторов. Фактически, эпоха улучшения параметров современных вычислительных систем за счёт действия Закона Мура подходит к концу [2].

Неоднократно предпринимались попытки модифицировать закон Мура (см. формулу (1.1.1)), для сохранения темпов роста производительности вычислительных систем. Так, в [19] был предложен закон Куми, выбирающий в качестве основного параметра энергоэффективность вычислений, исчисляемую в единицах бит в секунду на Джоуль (1.1.2). Словесно закон был сформулирован следующим образом: «Объем вычислений на киловатт энергии при статической нагрузке удваивается каждые полтора года». Однако, уже к 2015 году данный закон перестал выполняться. Аналогичные проблемы испытал так называемый «принцип Макимото» (Makimoto's Wave) [20], учитывающий стоимость интегральных чипов (см. рис. 1 и формулу 1.1.3).

$$\text{Закон Мура} = \text{количество транзисторов} \quad (1.1.1)$$

$$\text{Закон Куми} = \frac{\text{Вычислительная мощность} \left[ \frac{\text{бит} \times \text{с}}{\text{Джоуль}} \right]}{\text{энергия}} \quad (1.1.2)$$

$$\text{Принцип Макимото} = \frac{\text{Число операций в архитектурном решении}}{\text{размер} \times \text{цена} \times \text{энергопотребление}} \left[ \frac{\text{MIPS}}{\text{мм}^3 \times \$ \times \text{Ватт}} \right] \quad (1.1.3)$$

$$\text{CLEAR} = \frac{\text{Число операций в архитектурном решении}}{\text{время задержки} \times \text{энергопотребление} \times \text{объем} \times \text{затраты на внедрение}} \left[ \frac{\text{MIPS}}{\text{с} \times \text{мм}^3 \times \$ \times \text{Ватт}} \right] \quad (1.1.4)$$

Предложенный в 2020 году [21] закон CLEAR – «Computational Latency and Energy-Aware Reconfigurable Computing» на данный момент предлагает наиболее удачную аппроксимацию развития вычислительных систем, начиная с 1940-ых годов. При этом, авторы новой метрики рассматривают интегральную фотонику как основную возможность дальнейшего интенсивного развития вычислительных систем (см. рис. 1.1).

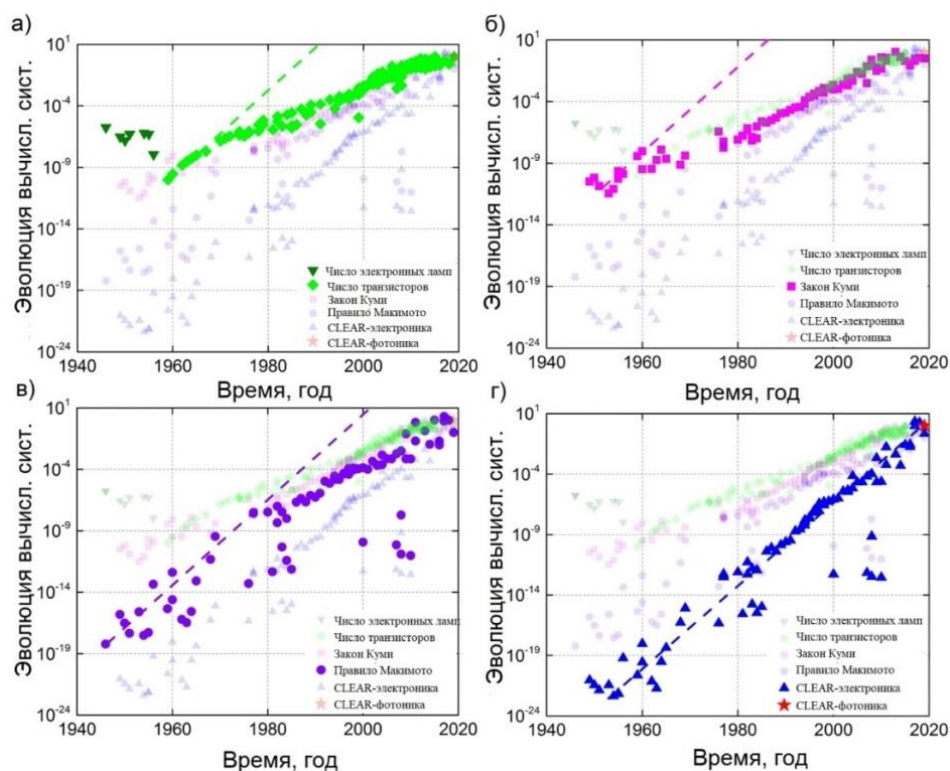


Рисунок 1.1 – Законы, описывающие эволюцию вычислительных систем. Под соответствующими пунктами подкрашены точки на временной шкале, описывающие: а) число транзисторов (Закон Мура), б) – Закон Куми, в) – Правило Макимото, г) – закон CLEAR для электроники и интегральной фотоники.

## 1.2 Причина стагнации тактовой частоты процессоров

Как известно, в неспециализированных процессорах за один такт выполняется, в среднем, одна команда. Следовательно, при рассмотрении одноядерной архитектуры, единственным физическим способом повышения производительности остается повышение тактовой частоты. В то же время, согласно регулярно обновляемым аналитическим данным [22], тактовая частота процессоров растет крайне незначительно в течение последних 10 лет.

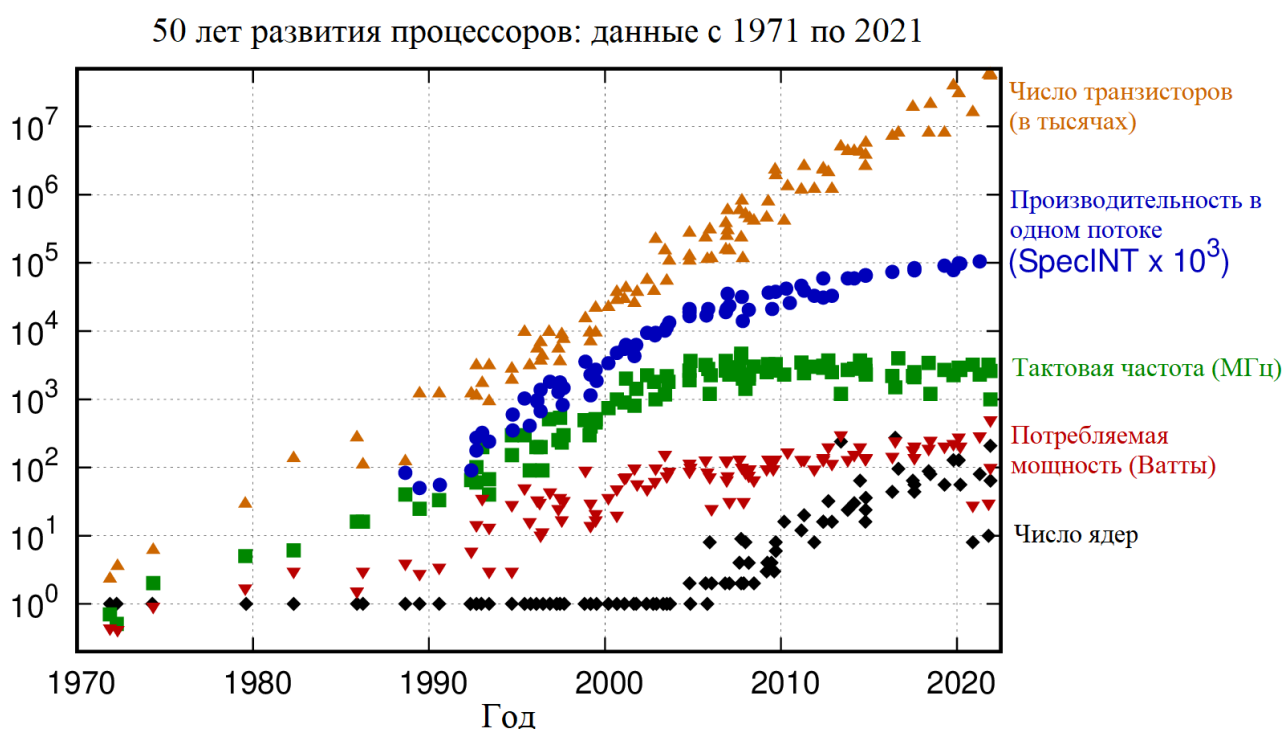


Рисунок 1.2 – Эволюция микропроцессоров в последние 50 лет [22]

Причины стагнации тактовой частоты состоят в следующем: с ростом частоты растёт и генерация тепла, которая приводит к проблеме охлаждения процессора; кроме того, увеличивается энергопотребление процессора, что может снизить продолжительность работы на батарейном питании в мобильных устройствах. Мощность, которую выделяет процессор, может быть описана как:

$$P = V^2 \times F \times C_{\text{динам}} \quad (1.2.1)$$

где  $V$  – напряжение,  $F$  – тактовая частота,  $C_{\text{динам}}$  – динамическая емкость. Для переключения транзистора требуется накопить достаточный заряд в области затво-

ра, т.е., время переключения транзистора пропорционально времени накопления заряда на затворе, а это время, в свою очередь, пропорционально напряжению затвор-исток (gate-source). В результате:

$$F \sim V \quad (1.2.2)$$

$$P \sim V^3 \times C_{\text{динам}} \quad (1.2.3)$$

Согласно формуле (1.2.3), рост тактовой частоты на один порядок приводит к увеличению тепловыделения в системе на три порядка. Из-за этого фундаментального фактора, международная дорожная карта для устройств и систем (international Roadmap for Devices and Systems, далее – IRDS) прогнозирует [23] повышение тактовой частоты с 3,1 ГГц в 2021 году всего лишь до 3,7 ГГц к 2034 году. Повышение производительности планируется за счет увеличения числа ядер, улучшения архитектуры процессора и многопоточности.

### 1.3 Электрические линии межъядерной коммутации

Согласно отчету IRDS за 2021 год [23], прогресс в области электрических межсоединений сталкивается с серьезными вызовами:

- сопротивление межсоединений начинает расти экспоненциально, по причине неидеального изготовления барьеров для медных линий, что, в свою очередь, ведет к резкому росту рассеяния электронов на поверхностях и границах зерен в тонких пленках и проволоках меди [24];

- подход, предполагающий использование low-k диэлектриков [25] исчерпывает себя: пределы временного разрушения диэлектрика (time-dependent dielectric breakdown, сокращенно TDDB) задают минимальное расстояние между смежными линиями и не оставляют пространства для дальнейшего снижения диэлектрической проницаемости.

В целом, скорость передачи данных по электрическим коммутационным линиям лимитируется следующими ограничениями: скин-эффект, эффект дисперсионного размытия высокочастотных импульсов, перекрестные помехи, потери

при дальнейшем распространении сигнала, производственные ограничения [26]. При этом RC задержка в межсоединениях доминирует над ограничениями тактовой частоты транзисторов при снижении технологических норм. Согласно [27], при нормах 250 нм задержки сравниваются, а далее разрыв между задержкой в т.н. «глобальных» межсоединениях линий коммутации между различными блоками «Системы-на-кристалле» значительно возрастает (см. рис. 1.3.1).

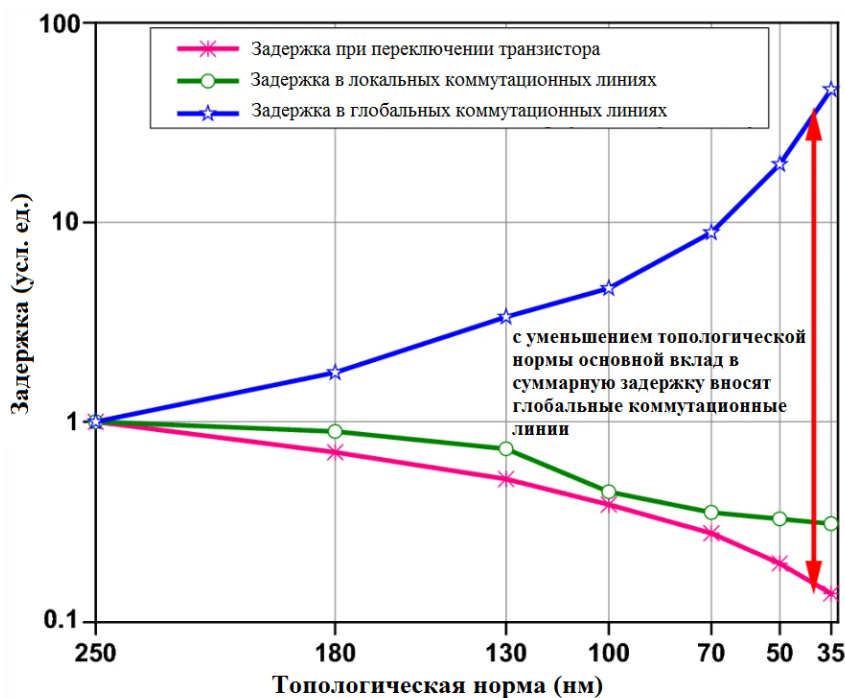


Рисунок 1.3.1 – Динамика относительного вклада различных типов задержек в процессорах при уменьшении топологической нормы [27]

Значительный рост задержек при уменьшении топологической нормы имеет достаточно простое обоснование. Опираясь на принципы RC-анализа, покажем влияние масштабирования на рост задержки на примере простой структуры, состоящей из двух близко стоящих коммутационных линий (рис. 1.3.2).



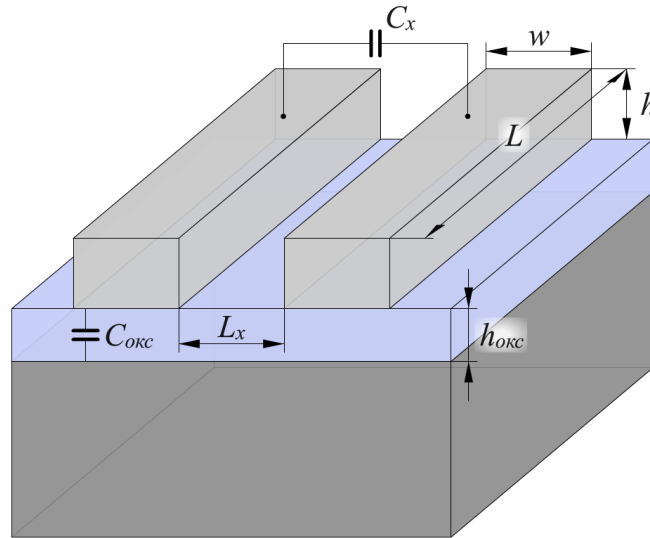


Рисунок 1.3.2 – Паразитные емкости в двух близко стоящих коммутационных линиях.

Сопротивление линий задается формулой:

$$R = \rho \frac{L}{h \times w} \quad (1.3.1)$$

где  $\rho$  – удельное сопротивление участка провода,  $L$ ,  $h$  и  $w$  – длина, высота и ширина провода, соответственно. Емкость между линией коммутации и подложкой определяется как:

$$C_{\text{окс}} = \varepsilon_0 \times k_{\text{окс}} \frac{w \times L}{H_{\text{окс}}} \quad (1.3.2)$$

где  $\varepsilon_0$  – диэлектрическая постоянная,  $H_{\text{окс}}$  – толщина слоя окисла, а  $k_{\text{окс}}$  – диэлектрическая проницаемость оксида. Емкость между соседними коммутационными линиями:

$$C_x = \varepsilon_0 \times k_{\text{окс}} \frac{h \times L}{L_x} \quad (1.3.3)$$

Общую емкость системы из двух линий можно оценить как [28]:

$$C_{\text{общ}} = 2 \times (C_x + C_{\text{окс}}) \quad (1.3.4)$$

Временная задержка в такой конфигурации приближенно рассчитана в модели линии электропередач по формуле (1.3.5):

$$t \approx RC = 2 \times k_{\text{окс}} \times \varepsilon_0 \rho \frac{L^2}{hw} \left( \frac{w}{H_{\text{окс}}} + \frac{h}{L_x} \right) \quad (1.3.5)$$

Введем размерный фактор  $\Sigma$ , характеризующий минимальный размер элемента на кристалле, т.е. топологическую норму чипа. При этом размеры  $L_x$  и  $w$  преимущественно определяются разрешением литографии и могут быть оценены как эквивалентные  $\Sigma$ . Аналогично, предполагая что аспектное соотношение  $h/w$  остается постоянным, получим  $h \sim \Sigma$ ,  $H_{\text{окс}} \sim \Sigma$ . В результате, переходя от размерных параметров рис.3 к размерному фактору  $\Sigma$ , имеем:

$$t \approx RC = 2 \times k_{\text{окс}} \times \varepsilon_0 \rho \frac{L^2}{\Sigma^2} \quad (1.3.6)$$

Параметр  $\Sigma$  уменьшается с уменьшением технологической нормы. При этом погонная длина  $L$  для локальных коммутационных линий также уменьшается с уменьшением  $\Sigma$ . Согласно последней формуле, временная задержка остается неизменной для локальных коммутационных линий, что качественно согласуется с данными с графика [27] (рис. 1.3.1). Однако, длина глобальных коммутационных линий уменьшается не столь существенно, что и приводит к усиленному относительному вкладу задержки глобальных коммутационных линий в общую задержку.

#### 1.4 Коммутационные линии на основе волноводов

Применение фотонных элементов, в частности, полосковых волноводов в качестве линий коммуникации активно предлагалось в 2000-2005 годах [5-6, 29]. Действительно, замена электронных коммутационных линий на фотонные приносит ряд преимуществ:

- 1) отсутствие RC-задержек (отсутствие паразитных емкостных и индуктивных эффектов);
- 2) полное решение проблемы согласования импеданса в электронных цепях;

- 3) значительное повышение частотного порога дисперсии при распространении импульсных сигналов;
- 4) использование спектрального уплотнения каналов (DWDM), поляризации и фазы для повышения плотности передаваемой информации (рис. 1.4.1);
- 5) отсутствие джоулевых потерь при передаче сигнала в волноводе;
- 6) помехозащищенность оптических каналов.

Увеличение плотности передачи информации в оптическом канале:  $2 \times N \times M$

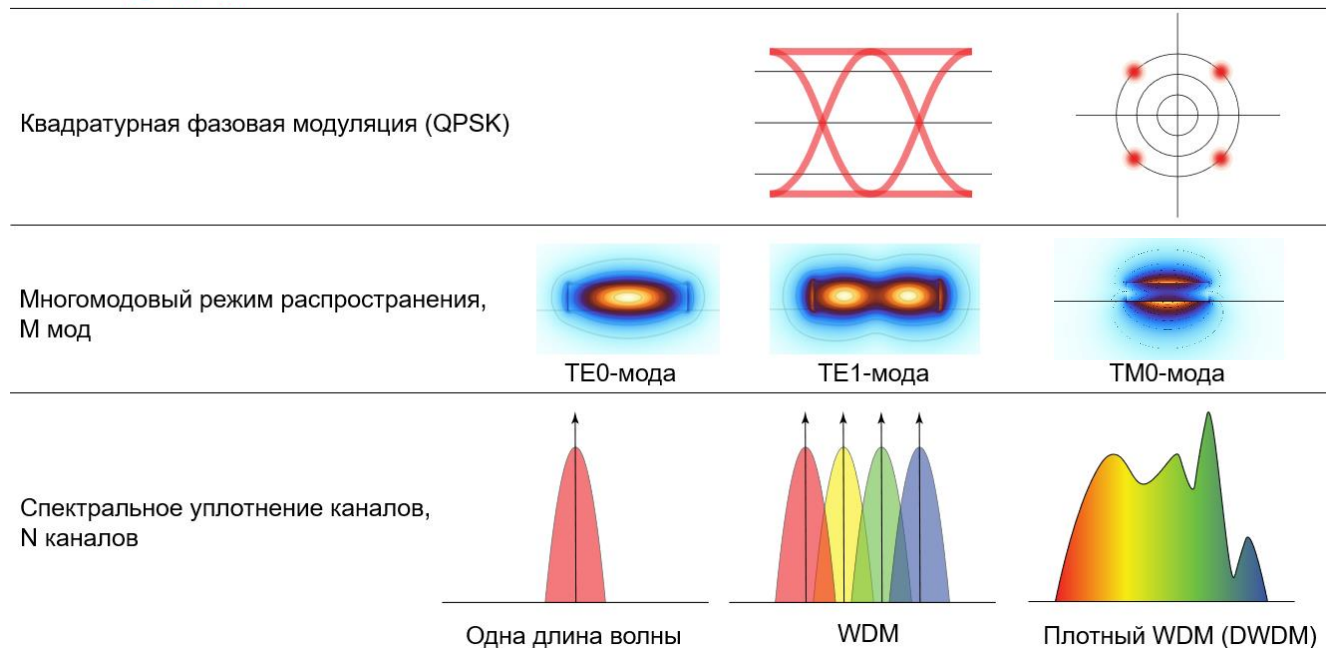


Рисунок 1.4.1 – Возможность использования спектрального уплотнения каналов, а также поляризации и фазы для уплотнения информационного сигнала

Волноводное распространение ЭМ излучения происходит, как известно, в режиме полного внутреннего отражения (например, оптоволокно) или брегговского рассеяния (рентгеновский волновод в 1D брегговском зеркале), или обусловлено сочетанием многократного рассеяния брегговского типа и микроскопического резонансного рассеяния Ми в фотонных кристаллах. Каждый резонансный рассеиватель (например, фотонного кристалла), обычно это стержень, пора или сфера, может быть рассмотрен как резонатор.

Описание режима распространения электромагнитного поля в оптических волноводах можно провести как теоретическими, так и численными методами.

Моделирование полоскового волновода с использованием метода конечных разностей проводилось неоднократно различными группами, в том числе и группой с участием автора данной работы [30]. Примеры такого моделирования для кремниевого КНИ-волновода приведены ниже.

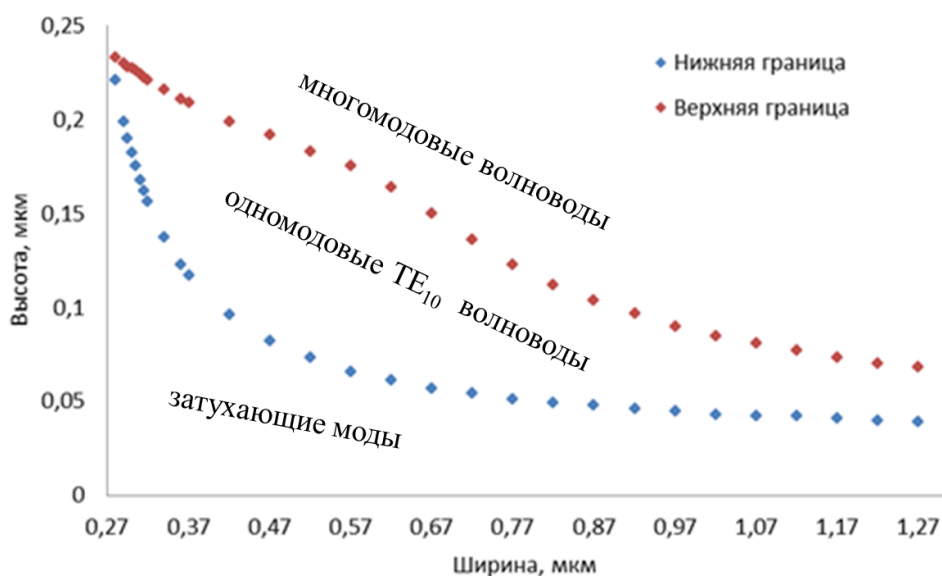


Рисунок 1.4.2 – Верхняя и нижняя граница одномодового режима полоскового Si волновода КНИ структуры.

Результаты моделирования эффективности затухания ЭМ моды в полосковом Si волноводе КНИ структуры в зависимости от геометрических размеров сечения волновода собраны на рисунке 1.4.2. Толщина слоя SiO<sub>2</sub> была выбрана равной 2 мкм [31], чтобы избежать существенных потерь, связанных с взаимодействием волноводной моды с Si подложкой. Одномодовый режим распространения TE<sub>10</sub> поляризованного излучения в зависимости от ширины и высоты полоскового волновода находится между кривыми, составленными из точек красного и синего цвета. Область, лежащая под нижней границей одномодового режима, соответствует случаю затухающих (эванесцентных) вдоль оси волновода мод с мнимой частью показателя преломления, большей 10<sup>-5</sup>. Область, лежащая выше одномодового диапазона, соответствует многомодовому режиму волновода. Стоит отметить, что на практике в фотонных интегральных

схемах чаще всего реализуется именно ТЕ-поляризация, что связано с двумя факторами:

1) Меньшими потерями нулевой ТЕ-моды на шероховатостях волновода, в силу локализации ТЕ-моды ближе к геометрическому центру волновода (см. рис. 1.4.3);

2) Более простой реализации амплитудной модуляции (чаще всего, на основе модуляторов Маха-Цендера, далее – ММЦ) в волноводе в силу максимальной локализации ТЕ-моды в области с изменяемым показателем преломления. [32]

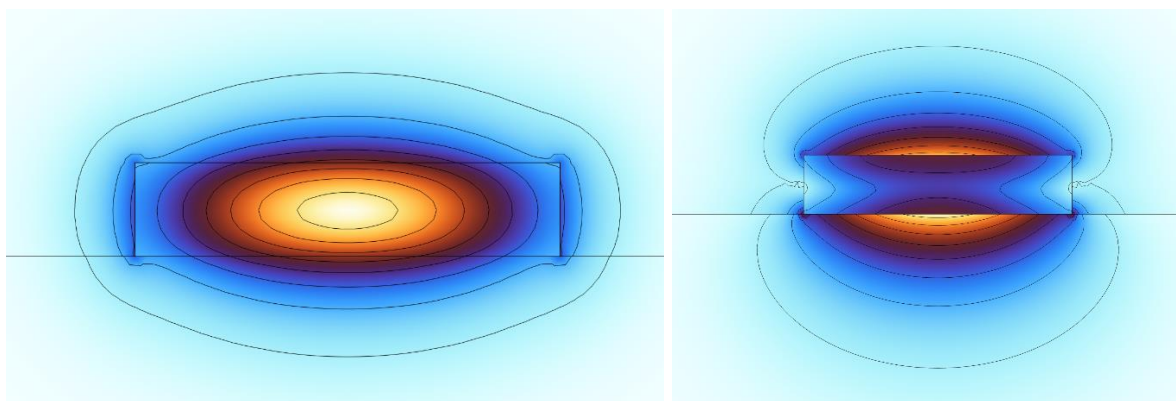


Рисунок 1.4.3 – ТЕ<sub>0</sub>-мода (слева) и ТМ<sub>0</sub>-мода (справа) полоскового КНИ-волновода

## 1.5 Технологические платформы интегральной фотоники

В настоящее время можно выделить, в зависимости от детализации, от 3 до 5 технологических платформ для интегрального исполнения фотонных элементов [33, стр. 23], а именно: фосфид индия InP [34], ниобат лития LiNbO<sub>3</sub> [35], группа технологических платформ на базе кремниевой [36] технологии (КНИ – кремний на изоляторе, оксид кремния на кремнии – silica on silicon, нитрид кремния – Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, SiON – оксинитридная технология [37]).

Данные технологии различаются по многим параметрам, подробное аналитическое сравнение которых проведено в [33, стр. 23].

Однако, с точки зрения использования интегральных волноводов в качестве глобальных коммутационных линий наиболее важным параметром является оптический контраст, определяющий планарные размеры ФИС (фотонных интегральных схем). Оптический контраст между обкладкой и сердцевиной волновода определяется по формуле [38]:

$$\Delta = \frac{n_{\text{сердцевины}}^2 - n_{\text{обкладки}}^2}{2n_{\text{сердцевины}}^2} \quad (1.5.1)$$

При этом во многих аналитических материалах и статьях контраст приводится в относительной форме, выражаемой в процентах:

$$\Delta\% = \frac{\Delta}{n_{\text{сердцевины}}} \times 100\% \quad (1.5.2)$$

Значимость оптического контраста для общих габаритов чипа проиллюстрирована на рисунке 1.5.1 [39].



Рисунок 1.5.1 – Верхняя и нижняя граница одномодового режима полоскового Si волновода КНИ структуры.

Как видно из рисунка 1.5.1, контраст определяет не только планарные размеры волнопроводов, но и минимально возможные радиусы поворота волнопроводов, что важно не только для построения коммутационных линий, но и, например, для построения AWG-демультиплексоров, используемых в DWDM-системах [40]. Более подробное аналитическое описание влияния контраста дано в работе [41]. В данной работе приведен ряд важных эмпирических формул, которые показывают влияние контраста на важнейшие параметры волноводных структур, в конечном счете определяющих общие габаритные параметры чипа. А именно, размерный параметр волновода (в случае упрощенного приближения квадратного волновода) зависит от контраста следующим образом:

$$d = \frac{0.54\lambda}{\sqrt{(n_{\text{сердцевинны}}^2 - n_{\text{подложки}}^2)}} \quad (1.5.3)$$

Подставляя формулу (1.5.1) в (1.5.3), получим:

$$d = \frac{0.54\lambda}{\sqrt{2 \times \Delta \times n_{\text{сердцевинны}}^2}} \quad (1.5.4)$$

То есть, стороны волновода (размеры волноводной моды) постепенно уменьшаются с увеличением контраста показателя преломления, как показывает рисунок 1.4.2:

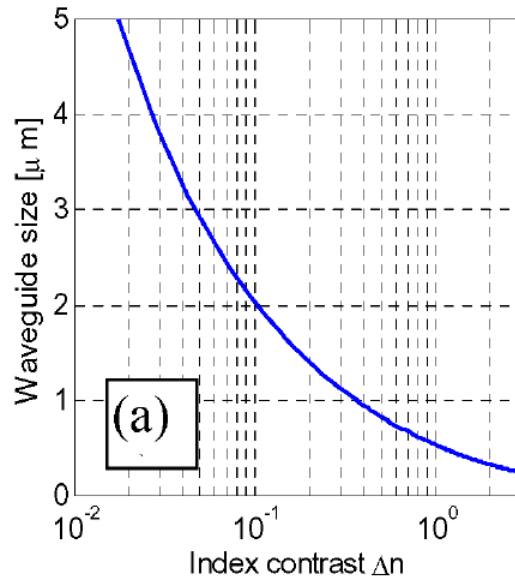


Рисунок 1.4.2 – Зависимость размеров волновода (ширины и высоты в случае квадратного волновода) от контраста показателя преломления [41]

Кроме того, в [41] предложена эмпирическая формула для минимально возможного радиуса поворота волновода, обеспечивающего потери не более 0.1 дБ/радиан:

$$R_{\text{мин}} = 5\Delta^{-1.5} \text{ [мкм]} \quad (1.5.5)$$

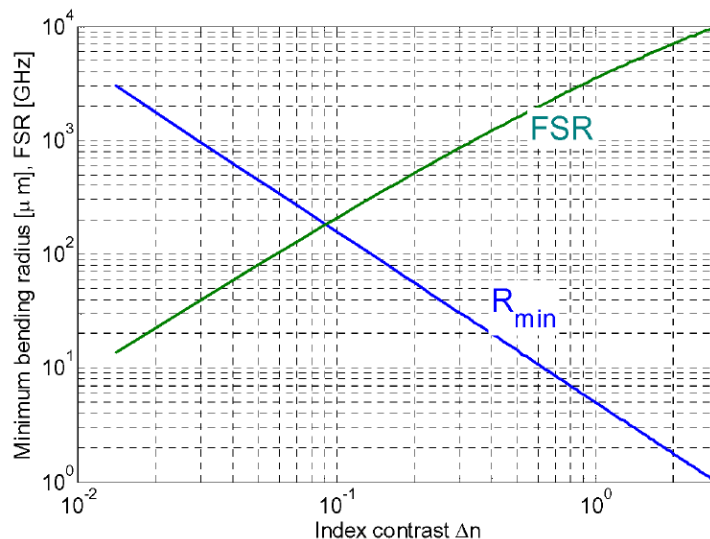


Рисунок 1.4.3 – Зависимость радиуса поворота и свободного спектрального диапазона (FSR) от контраста показателя преломления [41]



Ниже приведена таблица сравнения оптических контрастов для различных технологических платформ, полученная с использованием формул (1.5.4) и (1.5.5). Как видно из таблицы 1.5.1, наибольшим оптическим контрастом обладают решения на основе кремниевой технологии, в настоящий момент ставшие основной платформой для реализации устройств интегральной фотоники [42].

Таблица 1.5.1 – Сравнение технологических платформ интегральной фотоники для длины волны 1550 нм

Технологическая платформа	Оптический контраст	Радиус поворота, мкм	Диаметр волноводной моды, нм
Фосфид индия [43]	0,05	500	1155
Кремниевый волновод (Si на SiO <sub>2</sub> подложке) [42]	0,41	20	375
Нитрид кремния [44]	0,24	45	865
Оксинитрид [37]	0,03	845	3100
Ниобат лития [45]	0,28	35	710
Silica on silicon (с легированием сердцевины GeO <sub>2</sub> ) [46]	0,10	165	1710

Таким образом, показано, что с учетом имеющихся технологических платформ, доведенных до уровня серийного производства ФИС и формулы (1.5.4), при распространении светового сигнала в ФИС в классическом волноводном режиме невозможно добиться локализации волноводной моды (и, как следствие, планарных размеров волновода) менее чем  $\lambda/10$ . В частности, в рамках общепринятой в микроэлектронном производстве технологии КНИ [42] стандартная ширина волновода составляет порядка 200 нм. Как следствие, интегральная фотоника не может служить эффективным решением для замены линий глобальной коммутации на чипе и на данный момент занимает нишу межсоединений на уровне «Системы-в-корпусе» (chip-to-chip interconnect) [47]. Кроме того, остаётся суще-

ственной проблема перекрестных потерь между волноводами. Так, два Si волновода с наноразмерным сечением, расположенные с зазором менее 1 мкм на КНИ структуре, характеризуются эффективным взаимным энергетическим обменом [48]. Этот характерный размер задаёт минимальное расстояние между двумя соседними волноводами, минимизирующее перекрестные помехи при распространении по ним сигналов. Таким образом, использование регулярных волноводов в качестве межсоединений ограничивает степень интеграции ФИС.

### 1.6 Плазмонные волноводы

Альтернативным подходом к диэлектрическим волноводам с наноразмерным сечением и объемной волной является использование металлических нанопроволок, по которым ЭМ излучение распространяется в виде поверхностной волны, например, поверхностной плазмон поляритонной (ППП или SPP в англоязычной транскрипции) волны.

Плазмоны могут существовать в различных топологических системах, которые можно разделить на 4 подкласса:

1). Простейшей плазмонной системой является плоская граница раздела металла и диэлектрика, по которой распространяются ТМ-поляризованные поверхностные плазмоны при условии изменения знака диэлектрической проницаемости на границе. Дисперсионное уравнение плазмона находится из уравнений Максвелла в обоих полупространствах и граничных условий для электрического и магнитного полей [49].

2). Если металл является слоем, окруженным диэлектриком, то поверхностные плазмоны могут существовать на обеих границах слоя. При утонении слоя поверхностные плазмоны на двух границах взаимодействуют с образованием симметричной и асимметричной мод.

3). Плазмон может быть локализован в одном измерении – канавка на поверхности металла [50].

4). Локализованный плазмон на частице или кластере частиц. Кластер может представлять собой цепочку частиц, т.е. дискретный волновод (см. раздел 1.8 данного обзора).

Дальность распространения ППП существенно зависит от степени кристалличности материала нанопроволок, свойств окружающего материала, формы и размера их сечения, длины волны возбуждающего ЭМ излучения. К примеру, длина распространения ППП по Au проволоке падает на порядок (от десятков микрометров [51,52] до двух микрометров [53]) при сужении прямоугольного сечения проволоки в пять раз (от 1 мкм до 200 нм) при фиксированной толщине проволоки (50 нм) и возбуждении ППП излучением с длиной волны 800 нм. Действительно, распространение ППП в нанопроволоках с поперечными размерами порядка  $\lambda_0/4 - \lambda_0/16$ , где  $\lambda_0$  – это длина волны возбуждающего света в вакууме, лежащая, как правило, в видимом диапазоне длин волн ЭМ излучения, теоретически [13] ограничено несколькими микрометрами.

В частности, экспериментально измерено [53] распространение ППП на 2.5 мкм вдоль Au проволоки, толщиной 50 нм, шириной 200 нм и длиной до 20 мкм, от места локального возбуждения проволоки ЭМ излучением с длиной волны 800 нм. Пробег ППП достигает 10 мкм в металлических субволновых волноводах, изготовленных на диэлектрической подложке методом химического синтеза [52]. Наиболее дальний пробег ППП волны, составляющий, согласно численным расчетам [10], до 3 мм на телекоммуникационной длине волны (1.55 мкм), следует ожидать для металлодиэлектрического волновода, состоящего из Au полоски с субволновым сечением (толщина 15 нм, ширина 500 нм), находящейся между слоями двух разных диэлектриков. Сообщение о 500 мкм длине пробега ППП в такого рода сэндвиче было в работах [11,12]. Дальний пробег ППП волны (см. рис. 1.7.1) объясняется тем, что поле волны распространяется в основном не по металлу, а по диэлектрику.

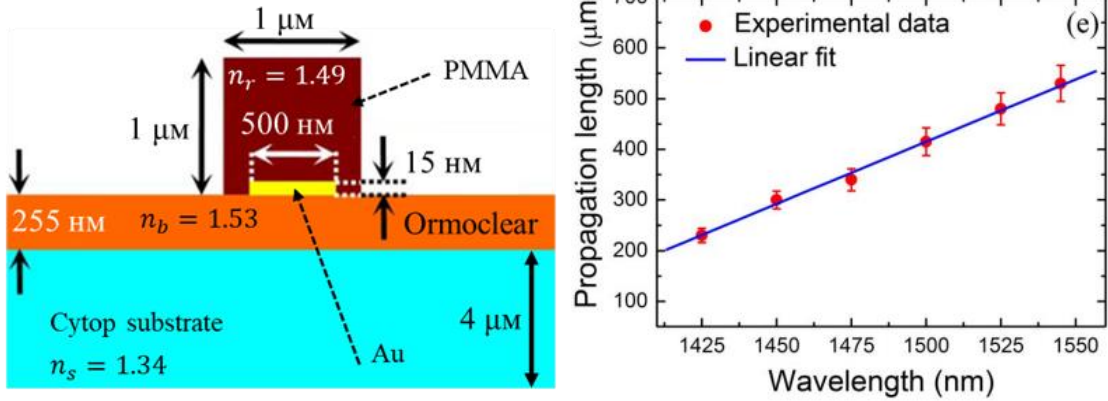


Рисунок 1.7.1 – Структура трехслойного плазмонного волновода из [11] и экспериментальные данные по длине пробега

Российской группой показано [54] распространение ППП на 250 мкм на длине волны из видимого диапазона (765 нм, красный цвет). Стоит отметить, что хотя мнимая часть диэлектрической проницаемости золота для длин волн 765 и 1550 нм отличается многократно, это не приводит к существенному увеличению длины пробега ППП, согласно формулам (1.6.1) – (1.6.5):

$$\varepsilon_{Au}(765 \text{ нм}) = -23.15 + 2.1i \quad (1.6.1)$$

$$\varepsilon_{Au}(1.5 \mu\text{м}) = 11.97 + 2 \times 10^{-9}i \quad (1.6.2)$$

$$\frac{\varepsilon_{Au}''(765 \text{ нм})}{\varepsilon_{Au}''(1.55 \mu\text{м})} \gg 1 \quad (1.6.3)$$

$$L_{prop} \approx \lambda_0 \frac{\varepsilon_m'^2}{2\pi\varepsilon_m''} \quad (1.6.4)$$

$$\frac{L_{prop}(1.55 \mu\text{м})}{L_{prop}(0.765 \mu\text{м})} \approx 3,6 \quad (1.6.5)$$

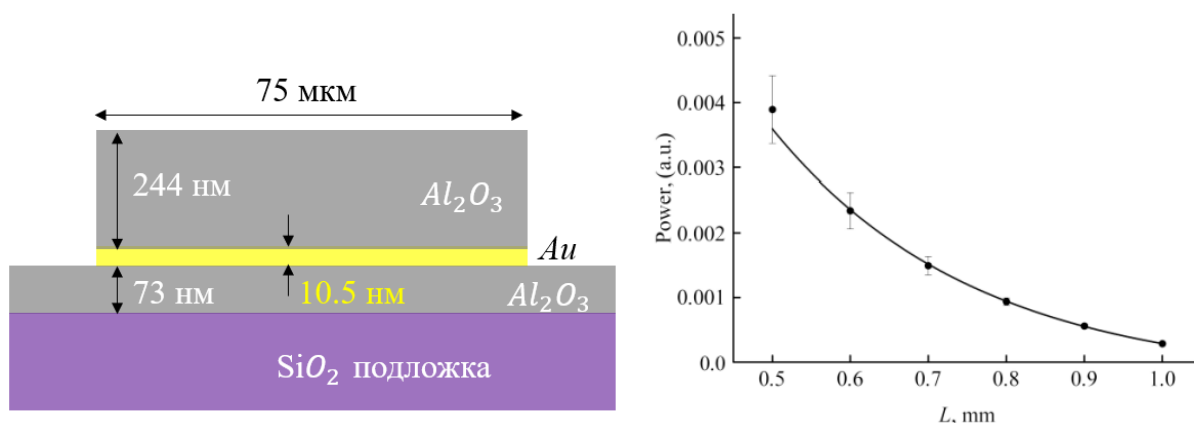


Рисунок 1.7.2 – Структура трехслойного плазмонного волновода из [11] и экспериментальные данные по длине пробега

Итого, использование металлических нанопроволок для распространения ППП приводит к значительным омическим потерям, которые только вырастают вместе с повышением степени локализации поля в волноводе. Использование структур из металл-полупроводников, а также структур типа «сэндвич», описанных ранее, не приводит к существенному увеличению длины пробега, расширяя её до 500 мкм [9,10] при распространении ППП преимущественно в толще диэлектрика. Возможным решением этой проблемы могло бы быть использование альтернативных золоту и серебру материалов, которые обеспечивают меньшие потери, однако, на данный момент в литературе не предложено других материалов, существенно увеличивающих длину пробега.

Остается возможной компенсация омических потерь с помощью активной среды, то есть, активное усиление поверхностных-плазмон поляритонов в волноводе. Работы, посвященные такой компенсации, подробно рассмотрены в [55]. Согласно [55], энергоэффективность активных плазмонных межсоединений сравнима с энергоэффективностью электрических медных соединений (по состоянию на 2012 год). Кроме того, существенным недостатком активных схем усиления ППП является требование по использованию АЗВ5 материалов, слабо встраиваемых в кремниевую КМОП-технологиию.

## 1.7 CROW-волноводы

Ещё один тип субволновых волноводов представляет собой набор дискретных волноводов, состоящих из нанорезонаторов, связанных волновым образом [13, 14], которые также известны как Coupled Resonator Optical Waveguide (CROW) [15].

Волноводы на связанных резонаторах имеют преимущества по сравнению с регулярными волноводами. Во-первых, возможна реализация изгибов волновода под большими углами с малыми потерями и практически без отражений. Во-вторых, возможна реализация компактных оптических линий задержки, т.к. волновод имеет способность значительно замедлять оптическую волну, т.н. медленный свет. В-третьих, возможно усиление нелинейных эффектов вследствие низкой групповой скорости и существенных амплитуд светового поля в локализованных модах. Нелинейные эффекты расширяют возможности обработки оптического сигнала.

Реализация CROW-волноводов возможна (см. рис. 1) и в рамках технологии классической интегральной фотоники, с использованием резонаторов на «модах шепчущей галереи» (WGM, «whispering gallery modes», [56]), являющихся стандартным элементом технологической линейки. Однако, размеры таких волноводов достаточно велики, т.к. ранее оцененный в разделе 1.5 радиус поворота с минимальными потерями не позволяет создавать связанные резонаторы (в случае рассмотрения КНИ-платформы) с радиусом менее 5 мкм [57].

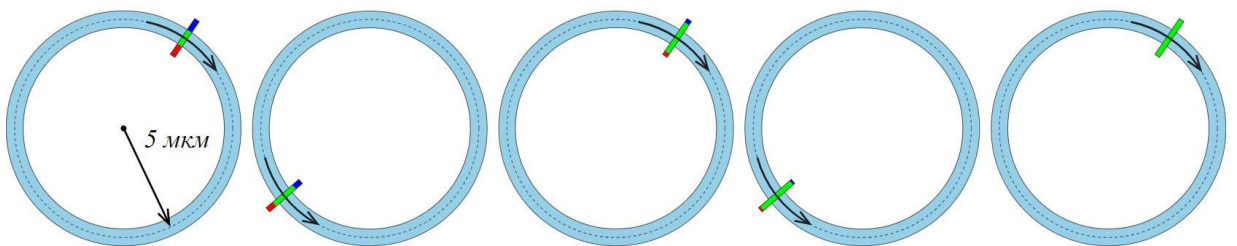


Рисунок 1.7.1 – CROW-волновод на основе МШГ-резонаторов на КНИ-платформе

Следовательно, волноводы на основе МШГ-резонаторов не могут быть использованы в качестве коммутационных линий в силу их крупных габаритных размеров.

В 1998 году был предложен [14] еще один тип существенно субволновых волноводов, представляющих собой кластеры металлических или диэлектрических наночастиц, диаметром несколько десятков нанометров. Резонансное рассеяние ЭМ излучения на таких частицах обусловило широкий спектр их применения в медицине, фотохимии, спектроскопии, микро- и нанофотонике. В современной медицине кластеры наночастиц применяются для стимуляции мозга, заменяя более сложную технику проволочных соединений [58]. Возможность формирования локального наноразмерного источника энергетичных (“горячих”) электронов, генерируемых при распаде плазмонов в металлических наночастицах, обусловила скачкообразное развитие каталитической химии [59]. Явление т.н. горячего пятна, т.е. формирование большой напряженности ЭМ поля в малом зазоре между двумя металлическими наночастицами, подтолкнуло развитие Рамановской спектроскопии с молекулярной чувствительностью [60]. В области микро- и нанооптики появились разработки, в частности, высокодобротных дискретных резонаторов на основе низкоразмерных кластеров диэлектрических наночастиц [61], аналога нейронных сетей на основе вложенных циклических кластеров частиц, оптической индуктивности, широкополосных остронаправленных плазмонных антенн [52, 62] и волноводов в виде цепочек наночастиц.

Стоит отметить, что при изготовлении нанопроволок достаточной длины имеются существенные технологические сложности. При этом, к настоящему времени разработаны эффективные и достаточно дешевые приемы изготовления цепочек частиц (см. рис 1.7.2) различной геометрии и длины - от димеров до протяженных областей [16-18]. Существенно, что при изготовлении волноводов возможен контроль за кристаллическим совершенством составляющих его частиц

и их взаимным положением. Это обеспечивает максимальное волновое взаимодействие частиц и минимальные погонные потери энергии моды.

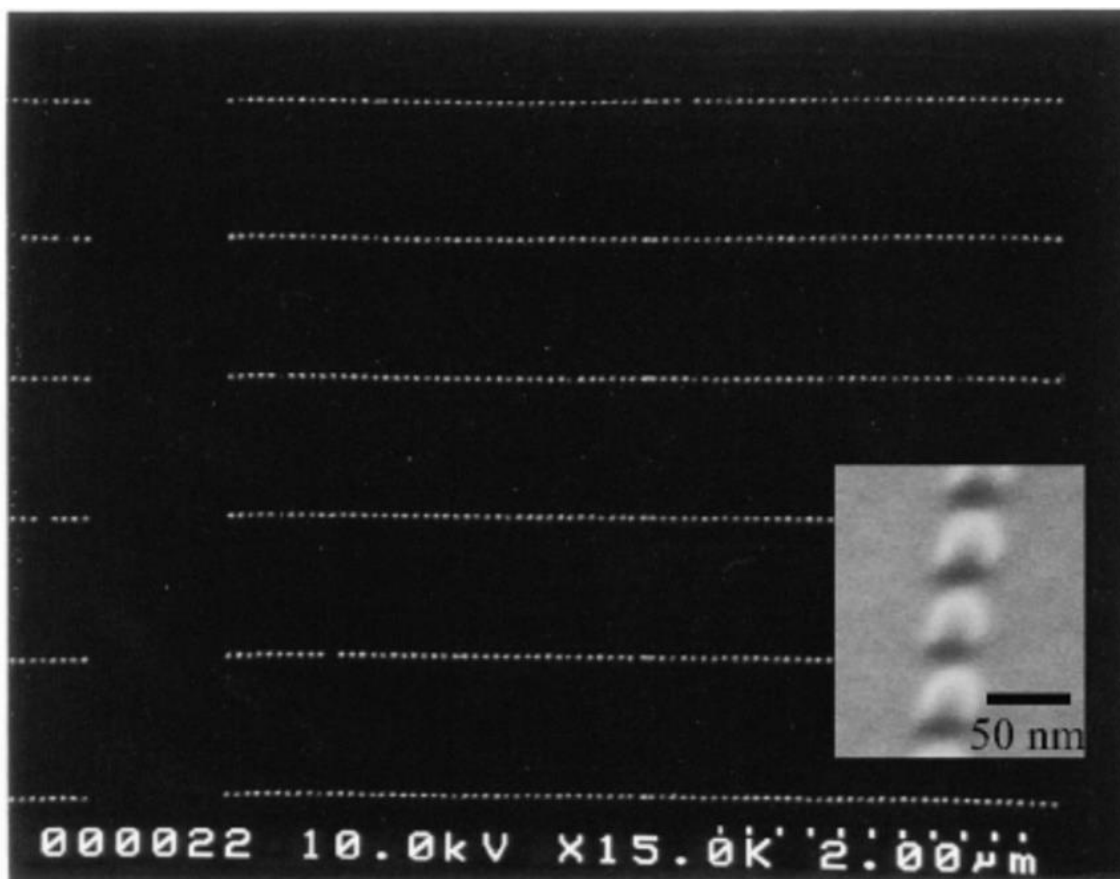


Рисунок 1.7.2 – Экспериментально изготовленные цепочки золотых наночастиц сферической формы из [63]

До недавнего времени полагалось, что ЭМ возбуждение быстро затухает вдоль цепочки частиц. Например, длина затухания равная 500 нм была измерена в 2003 году [64] в цепочке серебряных стержнеобразных частиц, размером  $90 \times 30 \times 30$  нм (высота-сечение) и 50 нм зазорами между частицами. В последующие годы была разработана технология изготовления цепочек частиц с зазорами 1 – 5 нм, что обусловило существенно большее волновое взаимодействие частиц и, как следствие, более дальнее распространение ЭМ возбуждения по цепочке. Длина затухания возбуждения в плотной цепочке золотых частиц диаметром 50 нм составила уже 4.2 мкм. Однако, используемые в



указанных работах численные методы не позволили выявить условия более дальнего распространения ЭМ возбуждения. И только недавно [65] теоретически предсказаны спектрально узкие, шириной 200 МГц, полосы прозрачности в видимом диапазоне длин ЭМ волн, в частотных спектрах плотно упакованных линейных цепочек Au наносфер. Цепочки имели длину в несколько сантиметров и состояли из  $10^4$ –  $10^5$  частиц. Таким образом, является актуальной задача исследования оптических дискретных волноводов с малым затуханием, образованных цепочками наночастиц, и также актуально исследование волнового взаимодействия линейных цепочек частиц в зависимости от материала, формы, размера, величины зазора между частицами, количества частиц и формы цепочки. При этом данная задача может быть с той или иной степенью точности решена широким спектром теоретических и численных методов, которые будут описаны в следующем разделе.

### **1.8 Метод квази-сепарабельного T-оператора**

Основным аналитическим инструментом данной диссертационной работы является система уравнений для самосогласованных электрических токов, возбуждаемых электрическим полем падающей ЭМ волны в ансамбле диэлектрических и проводящих частиц (Рис.1.8.1), и формула для коллективного сечения экстинкции ансамбля частиц. Система уравнений выведена методом квази-сепарабельного T-оператора рассеяния для решения задач многократного рассеяния ЭМ волн на ансамблях диэлектрических

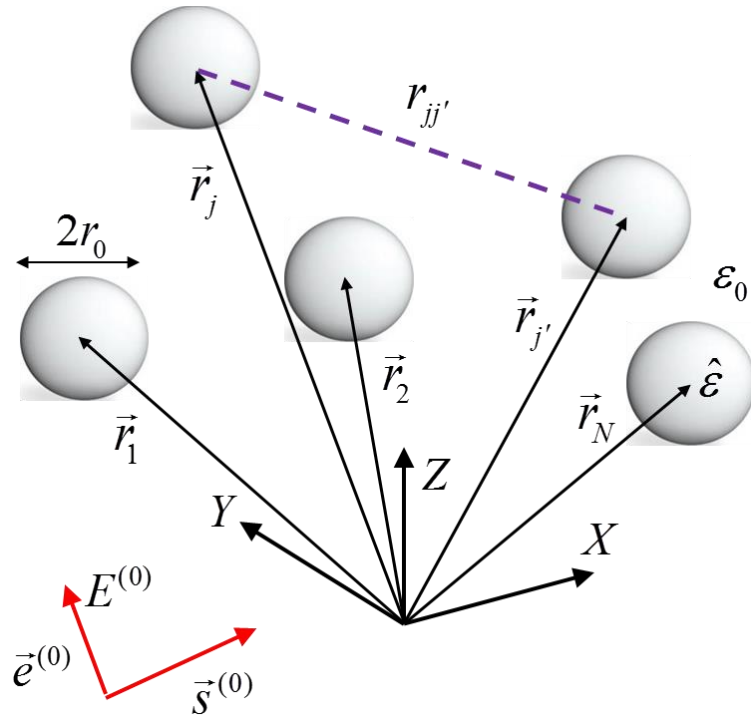


Рисунок 1.8.1 – Схематическое изображение задачи о рассеянии ЭМ волны на случайном ансамбле  $N$  сферических частиц радиусом  $r_0$ , центры которых находятся в точках  $\vec{r}_j, j = 1, 2, 3, \dots, N$  плоскости  $XY$  ортогональной системы координат  $XYZ$ . Падающая плоская волна характеризуется единичными векторами распространения  $\vec{s}^{(0)}$  и поляризации  $\vec{e}^{(0)}$ .

частиц с учетом их проводимости [66]. Физически  $T$ - оператор рассеяния ансамбля частиц непосредственно связан с возбуждаемыми электрическими токами как это видно из системы уравнений для самосогласованных токов

$$\vec{J}^{(j)}(\vec{r}) = \vec{J}_{(1)}^{(j)}(\vec{r}) + \int d\vec{r}' \int d\vec{r}'' \vec{T}^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_j, \vec{r}' - \vec{r}_j) \vec{G}^{(0)}(\vec{r}' - \vec{r}'') \sum_{j' \neq j} \vec{J}^{(j')}(\vec{r}'') \quad (1.8.1)$$

Здесь  $\vec{J}^{(j)}(\vec{r})$  обозначает плотность тока в  $j$ -ой частице ансамбля ( $j = 1, 2, \dots, N$ ), положение которой задается радиус вектором  $\vec{r}_j$ . Ток возбуждается коллимированным линейно поляризованным ЭМ лучом, электрическое и магнитное поля которого даются формулами

$$\vec{E}^{(0)}(\vec{r}) = E^{(0)}(\vec{r}_\perp^0) \vec{e}_0 \exp(ik_0 \vec{s}_0 \vec{r}), \quad \vec{H}^{(0)}(\vec{r}) = \epsilon_0^{1/2} \vec{s}_0 \times \vec{E}^{(0)}(\vec{r}) \quad (1.8.2)$$

Единичные векторы  $\vec{e}^{(0)}$  и  $\vec{s}^{(0)}$  задают направления поляризации и распространения волны, соответственно;  $k_0 = \frac{\omega}{c} = 2\pi/\lambda_0$  – волновое число ЭМ волны в вакууме;  $\omega$  – круговая частота;  $c$  – фазовая скорость света. Амплитуда  $\vec{E}^{(0)}(\vec{r}_\perp^0)$  задается в сечении пучка  $\vec{r}_\perp^0 = \vec{r} - (\vec{r}\vec{s}_0)\vec{s}^{(0)}$ .

Первое слагаемое в правой части (1.8.1) описывает плотность тока в изолированной частице. Второе слагаемое интегральной формы учитывает вклад токов, возбуждаемых в других частицах. Под знаком интеграла стоят тензорные (диадные) квантово-механический T- оператор рассеяния электрического волнового поля изолированной частицей в свободном пространстве  $\bar{\bar{T}}^{(0)}(\vec{r}, \vec{r}')$  и функция Грина электрического поля  $\bar{\bar{G}}^{(0)}(\vec{r})$  в свободном пространстве

$$\bar{\bar{G}}^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}') = \left( \bar{\bar{I}} + \frac{1}{k_0^2} \nabla \nabla \right) G_0(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (1.8.3)$$

$G_0(r) = \exp(ik_0 r)/(-4\pi r)$  - скалярная функция Грина свободного пространства,  $\bar{\bar{I}}$  - единичный диадик.

Сечение экстинкции  $Q$  ансамбля частиц записывается, согласно определению [65, 67], как сумма потерь энергии ЭМ поля из-за рассеяния  $W^{(s)}$  и поглощения  $W^{(a)}$  частицами, деленая на поток падающей ЭМ мощности на единицу геометрического сечения области, занимаемой ансамблем частиц. Суммарные потери могут быть записаны в виде интеграла по объему  $\Omega$ , занимаемому ансамблем частиц

$$W^{(s)} + W^{(a)} = -\frac{c}{8\pi} \text{Re} \int_{\Omega} d\vec{r} \nabla \cdot \left( \vec{E}^{(0)} \times \vec{H}^{(s)*} + \vec{E}^{(s)} \times \vec{H}^{(0)*} \right) \quad (1.8.4)$$

Верхним индексом 's' помечены электрическое и магнитное поле рассеянной волны. Звездочка '\*' означает комплексно-сопряженную величину, "Re" и ниже по тексту "Im" -обозначают действительную и мнимую части комплексной величины соответственно. Соотношение для суммарных потерь (1.8.4) можно преобразовать к виду

$$W^{(s)} + W^{(a)} = -\frac{c^2}{8\pi\omega} \operatorname{Im} \int_{\Omega} d\vec{r} \vec{E}^{(0)*}(\vec{r}) \cdot \vec{J}(\vec{r}) \quad (1.8.5)$$

с помощью уравнений Максвелла, записанных в гауссовой системе единиц

$$\nabla \times \vec{E} = \frac{i\omega}{c} \mu \vec{H}, \quad \nabla \times \vec{H} = -\frac{i\omega}{c} \hat{\epsilon}(\vec{r}) \vec{E} \quad (1.8.6)$$

Неоднородная комплексная диэлектрическая проницаемость дискретной среды  $\hat{\epsilon}(\vec{r})$  равна комплексной величине  $\hat{\epsilon} = \epsilon + i 4\pi\sigma/\omega$  внутри частицы [68], где  $\sigma$  – удельная проводимость материала частицы, и действительной величине  $\epsilon_0$  вне частицы. Вектор  $\vec{J}(\vec{r})$  определён [66] как

$$\vec{J}(\vec{r}) = V(\vec{r}) E(\vec{r}) \quad (1.8.7)$$

где эффективный потенциал рассеяния частицы имеет вид

$$V(\vec{r}) = -\frac{\omega^2}{c^2} (\hat{\epsilon} - \epsilon_0) \quad (1.8.8)$$

Вектор  $\vec{J}(\vec{r})$  имеет физический смысл суммарной плотности тока электропроводности и поляризации, возбуждаемого внутри частиц, т.к.

$$V(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r}) \equiv \frac{4\pi\omega}{ic^2} \left[ \sigma \vec{E}(\vec{r}) + \frac{\omega}{4\pi i} (\epsilon - \epsilon_0) \vec{E}(\vec{r}) \right] \quad (1.8.9)$$

и поэтому интеграл в правой части уравнения (1.8.5) представляет собой работу падающего электрического поля над электрическим током, возбуждённым внутри частиц. Заметим, что плотность тока (1.8.7) равна сумме

$$\vec{J}(\vec{r}) = \sum_{j=1}^N \vec{j}^{(j)}(\vec{r}) \quad (1.8.10)$$

самосогласованных токов  $\vec{j}^{(j)}(\vec{r})$ , возбужденных в  $N$  частицах ансамбля, взаимодействующих друг с другом волновым образом.

Для вычисления сечения экстинкции, предположим, что амплитуда  $\vec{E}^{(0)}(\vec{r}_{\perp}^0)$  луча (1.8.2) отличается заметно от нуля только при достаточно малых отклонении

ях  $\vec{r}_\perp^0 = \vec{r} - (\vec{r}\vec{s}_0)\vec{s}^{(0)}$  от оси пучка в перпендикулярном его сечении. Тогда вектор Пойнтинга пучка (1.8.2) имеет вид

$$\vec{\Pi}^{(0)} = \frac{c}{8\pi} \operatorname{Re} \left( \vec{E}^{(0)} \times \vec{H}^{(0)*} \right) = \frac{c\varepsilon_0^{1/2}}{8\pi} \left[ E^{(0)}(\vec{r}_\perp^0) \right]^2 \vec{s}_0 \quad (1.8.11)$$

Формулы (1.8.5) и (1.8.11) позволяют записать для сечения экстинкции выражение

$$Q = \frac{W^{(s)} + W^{(a)}}{\left| \vec{\Pi}^{(0)} \right|} \quad (1.8.12)$$

На основе формул (1.8.5) и (1.8.10) и используя преобразование Фурье  $\bar{T}(\vec{p}, \vec{p}')$  Т-оператора рассеяния всех частиц ансамбля, можно записать соотношение

$$Q = -\frac{1}{k_0} \operatorname{Im} \left\{ \vec{e}^{(0)} \bar{T} \left( k_0 \vec{s}^{(0)}, k_0 \vec{s}^{(0)} \right) \vec{e}^{(0)} \right\} \quad (1.8.13)$$

со сложной конструкцией для тензорного Т – оператора рассеяния [66]

$$\bar{T}(\vec{r}, \vec{r}') = V(\vec{r}) \bar{T} \delta(\vec{r} - \vec{r}') + V(\vec{r}) \int d\vec{r}'' \bar{G}^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}'') \bar{T}(\vec{r}'', \vec{r}') \quad (1.8.14)$$

Заметим, что полный самосогласованный ток в частицах (1.8.7), (1.8.9, 1.8.10) выражается через тот же оператор рассеяния и объёмную плотность источников

$$\vec{J}(\vec{r}) = V(\vec{r}) E(\vec{r}) \equiv \frac{4\pi\omega}{ic^2} \vec{j}^{src}(\vec{r}) = \int d\vec{r}' \bar{T}(\vec{r}, \vec{r}') \vec{E}^{(0)}(\vec{r}') \quad (1.8.15)$$

В работе [66] выражение (1.8.14) появляется в формальном решении

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}^{(0)}(\vec{r}) + \int d\vec{r}' \int d\vec{r}'' \bar{G}^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}') T(\vec{r}', \vec{r}'') \vec{E}^{(0)}(\vec{r}'') \quad (1.8.16)$$

уравнения Липпмана – Швингера [69, 70], записанного для полного электрического поля вне и внутри рассеивающей частицы

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}^{(0)}(\vec{r}) + \int d\vec{r}' \bar{G}^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}') \vec{E}(\vec{r}') \quad (1.8.17)$$

Величина  $\vec{E}^{(0)}(\vec{r})$  обозначает электрическое поле падающей волны

$$\vec{E}^{(0)}(\vec{r}) = \frac{4\pi\omega}{ic^2} \int d\vec{r}' \bar{G}^{(0)}(\vec{r}, \vec{r}') \vec{j}^{src}(\vec{r}') \quad (1.8.18)$$

Точное решение уравнения ЛШ (1.8.14) было впервые получено в работе [66] модифицированным [71, 72] методом Галеркина в виде суммы сепарабельных операторов рассеяния с весами, которые описывают волновое взаимодействие между элементами одной и той же частицы. Для решения был выбран произвольный базис векторных функций  $\vec{t}_n(\vec{r})$ , где  $n = 1, 2, 3, \dots$ , локализованных на частице-рассеивателе (Рис. 1.8.2).

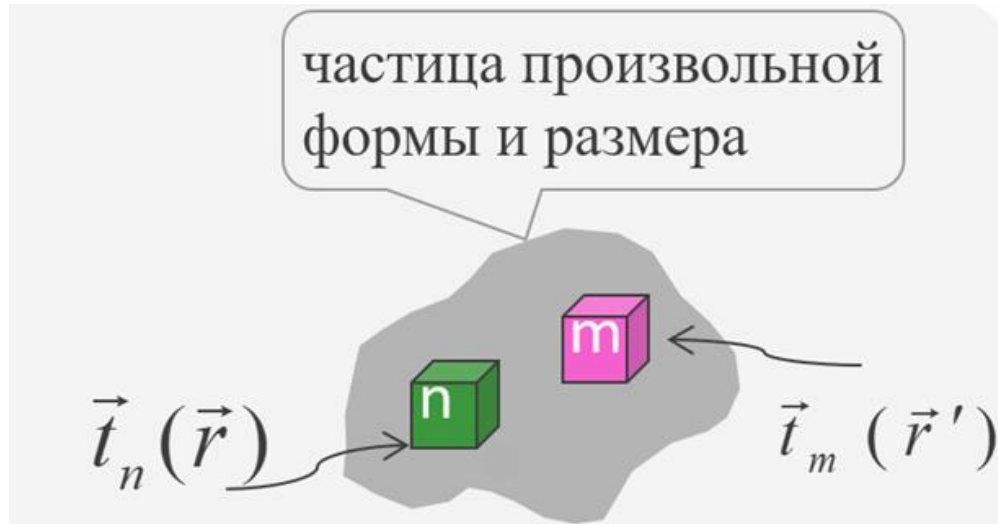


Рисунок 1.8.2. – Элементы потенциала рассеяния при волновом взаимодействии между элементами одной и той же частицы.

Например, в случае рассеивателей сферической формы базис векторных функций удобно выбрать в виде векторных сферических гармоник. В Приложении 1 в этом случае показано, что диадный квантово-механический  $T$ - оператор рассеяния электрического волнового поля уединенной сферической частицы произвольного размера в свободном пространстве  $T^{(0)}(\vec{r}, \vec{r}')$  представляется в виде суммы «электрической» и «магнитной» частей. Для малых по сравнению с длиной ЭМ волны частиц «электрическая» и «магнитная» части оператора рассеяния выражаются через электрическую и магнитную дипольную поляризуемость частицы, соответственно.

Уравнение (1.8.14) делим на потенциал  $V(\vec{r})$ , умножаем слева на  $\vec{t}_n(\vec{r})$  и интегрируем по  $\vec{r}$

$$\int d\vec{r} \frac{1}{V(\vec{r})} \vec{t}_n(\vec{r}) \bar{T}(\vec{r}, \vec{r}') = \vec{t}_n(\vec{r}') + \int d\vec{r} \int d\vec{r}'' \vec{t}_n(\vec{r}) \bar{G}^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}'') \bar{T}(\vec{r}'', \vec{r}') \quad (1.8.19)$$

Решение уравнения (1.8.19) ищем в виде диадного разложения

$$\bar{T}(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_n \vec{t}_n(\vec{r}) \otimes \tilde{t}_n(\vec{r}') \quad (1.8.20)$$

где  $\tilde{t}_n(\vec{r}')$  - неизвестные векторные функции. Подстановка диадного разложения (1.8.20) в (1.8.19) приводит к системе алгебраических уравнений для искомых векторных функций

$$\sum_m \chi_{nm}^{(0)} \tilde{t}_m(\vec{r}') = \vec{t}_n(\vec{r}') \quad (1.8.21)$$

с генерирующей матрицей вида

$$\chi_{nm}^{(0)} = \int d\vec{r} \frac{1}{V(\vec{r})} \vec{t}_n(\vec{r}) \vec{t}_m(\vec{r}) - g_{nm}^{(0)} \quad (1.8.22)$$

Матрица  $g_{nm}^{(0)}$  в (1.8.22) описывает взаимодействие между элементами одной частицы

$$g_{nm}^{(0)} = \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \vec{t}_n(\vec{r}) \bar{G}^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}') \vec{t}_m(\vec{r}') \quad (1.8.23)$$

Обратная к генерирующей матрице  $\langle n | \chi^{(0)-1} | m \rangle$  разрешает уравнение для  $T$  – оператора рассеяния изолированной частицей в виде суммы сепарабельных операторов рассеяния с весами в виде этой самой обратной к генерирующей матрице

$$\bar{T}^{(0)}(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{nm} \langle n | \chi^{(0)-1} | m \rangle \vec{t}_n(\vec{r}) \otimes \vec{t}_m(\vec{r}') \quad (1.8.24)$$

Далее в [66] на основе выведенного выражения для квази-сепарабельного  $T$  – оператора рассеяния одной частицы (1.8.24) строится КС  $T$ - оператор рассеяния  $N$  частиц, центры которых находятся в точках с радиус векторами  $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$ . С этой целью  $T$  – оператор рассеяния  $N$  частиц записывается с помощью правила композиции операторов Ватсона [73, 74] в виде суммы

$$\bar{T}(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{j=1}^N \bar{T}^{(j)}(\vec{r}, \vec{r}') \quad (1.8.25)$$

в которой каждое слагаемое записывается как

$$\begin{aligned} \bar{\bar{T}}^{(j)}(\vec{r}, \vec{r}') &= \bar{\bar{T}}^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_j, \vec{r}' - \vec{r}_j) \\ &+ \int d\vec{r}'' \int d\vec{r}''' \bar{\bar{T}}^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_j, \vec{r}'' - \vec{r}_j) \bar{\bar{G}}^{(0)}(\vec{r}'' - \vec{r}''') \sum_{j' \neq j} \bar{\bar{T}}^{(j')}(\vec{r}''', \vec{r}') \end{aligned} \quad (1.8.26)$$

Здесь  $\bar{\bar{T}}^{(j)}(\vec{r}, \vec{r}')$  и  $\bar{\bar{T}}^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_j, \vec{r}' - \vec{r}_j)$  – это самосогласованный T – оператор рассеяния всех частиц и T – оператор рассеяния j-ой частицы ансамбля, соответственно. В результате подстановки (1.8.24) в (1.8.26) КС T- оператор рассеяния  $N$  частиц выражается через T – оператор рассеяния одной частицы посредством матрицы  $A_N$  волнового взаимодействия  $N$  частиц,

$$\bar{\bar{T}}(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{n,m} \sum_{j,j'=1}^N \langle nj | \chi_N^{(0)-1} | mj' \rangle t_n(\vec{r} - \vec{r}_j) \otimes \vec{t}_m(\vec{r}' - \vec{r}_{j'}) \quad (1.8.27)$$

где

$$\langle nj | \chi_N^{(0)-1} | mj' \rangle = \sum_{m'} \langle nj | A_N^{-1} | m'j' \rangle \langle m' | \chi_1^{(0)-1} | m \rangle \quad (1.8.28)$$

Матрица  $A_N$ , в свою очередь, вычисляется

$$\begin{aligned} \langle nj | A_N | mj' \rangle &= \langle nj | \bar{\bar{I}} | mj' \rangle - \langle nj | \tilde{g}^{(0)} | mj' \rangle \\ &\equiv \langle nj | \bar{\bar{I}} | mj' \rangle - \sum_{m'} \langle n | \chi_1^{(0)-1} | m' \rangle g_{m'm}^{(0)}(\vec{r}_j, \vec{r}_{j'}) \end{aligned} \quad (1.8.29)$$

через матрицу двухчастичного взаимодействия (1.8.23)

$$g_{nm}^{(0)}(\vec{r}_j, \vec{r}_{j'}) = \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \vec{t}_n(\vec{r} - \vec{r}_j) \bar{\bar{G}}^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}') \vec{t}_m(\vec{r}' - \vec{r}_{j'}) \quad (1.8.23)$$

Матрица  $A_N$  имеет структуру вида

$$A_N = \begin{bmatrix} \delta_{nm} & -\langle n1 | \tilde{g}^{(0)} | m2 \rangle & \cdots & \cdots & \cdots & -\langle n1 | \tilde{g}^{(0)} | mN \rangle \\ -\langle n2 | \tilde{g}^{(0)} | m1 \rangle & \delta_{nm} & & & & -\langle n2 | \tilde{g}^{(0)} | mN \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & & & \ddots & \\ -\langle nN | \tilde{g}^{(0)} | m1 \rangle & -\langle nN | \tilde{g}^{(0)} | m2 \rangle & & & & \delta_{nm} \end{bmatrix} \quad (1.8.30)$$



Матричный элемент  $\langle nj | \tilde{g}^{(0)} | mj' \rangle$  в (1.8.29) описывает взаимодействие  $n$  – ого элемента  $j$  – ой частицы ( $j = 1, 2, 3, \dots, N$ ) с  $m$  – ым элементом  $j'$  – ой частицы (рис. 1.8.3).

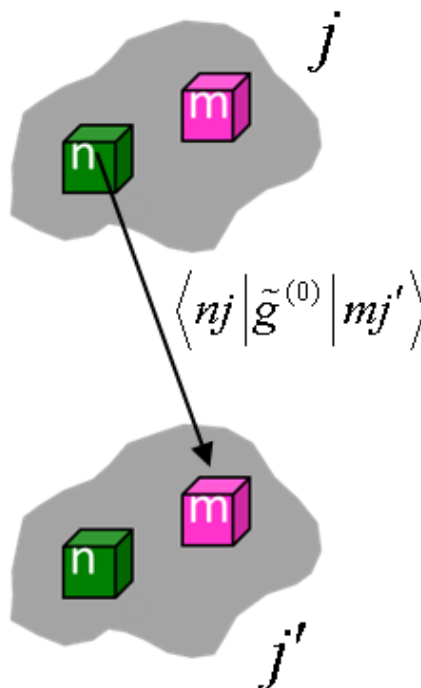


Рисунок 1.8.3. – Иллюстрация к взаимодействию  $n$  – ого элемента  $j$  – ой частицы ( $j = 1, 2, 3, \dots, N$ ) с  $m$  – ым элементом  $j'$  – ой частицы.

Рассматривая малые в масштабе длины волны частицы,  $T$  – оператор кластера из  $N$  частиц существенно упрощается и практически выражается через  $T$  – оператор одной частицы. Дальнейшее упрощение происходит при учете только электрического дипольного приближения. Возможность применения данного упрощения для случая CROW-волноводов (то есть, протяженных цепочек наночастиц) обосновывается, например, в [75] и будет рассмотрена в оригинальной части (глава 2) данной работы.

## 1.9 Другие методы расчета дискретных волноводов

Достаточно полные обзоры методов расчета волноводных свойств цепочек субволновых частиц даны, например, в диссертационных работах Д.Ю. Федянина

[55] и А.М. Пикалова [76]. В диссертационной работе М.И. Гозмана [75] рассматриваются не только субволновые, но и «большие» частицы, в которых могут быть возбуждены т.н. моды шепчущей галереи (МШГ). Эти моды рассматривались, например, в одной из первых работ по интерпретации спектров флуоресценции и комбинационного рассеяния разбавленной суспензии монодисперсных полистирольных сфер радиусом около 9 мкм при возбуждении излучением с длиной волны около 0.5 мкм [77]. Другое направление – это концентраторы ЭМ поля в узкой области пространства с помощью, например, наноцилиндра [78,79] с МШГ. Для полноты картины стоит указать на третье направление – возбуждение мод в виде так называемой наноструи в линейных цепочках полидисперсных микросфер из полистирола для биомедицинских приложений в качестве оптических микрорезонаторов с субволновым пространственным разрешением [80].

В данной работе интерес представляют цепочки именно субволновых частиц. Во многом методы расчета свойств цепочек частиц-рассеивателей следуют из подходов к проблеме рассеяния ЭМ излучения в резонансных дискретных средах [74, 81] или развивались параллельно данным подходам. В тоже время есть и существенное отличие: в задачах многократного рассеяния основной интерес представлял процесс переноса энергии поля в дискретной среде, сами же рассеиватели описывались эффективным потенциалом рассеяния. С точки зрения цепочек частиц как волноводов интерес состоял в изучении резонансного рассеяния, распределения поля в частицах при учете их волнового взаимодействия и распространение возбуждения вдоль частиц цепочки. Естественно, отправной точкой была задача рассеяния на сферической частице. История этой проблемы описана W.J. Wiscombe [82]. Математический аппарат для решения задачи о рассеянии ЭМ излучения на сфере разработал Альфред Клебш (Alfred Clebsch: Ueber die Reflexion an einer Kugelfläche (Об отражении от сферической поверхности). Journal für Mathematik, Band 61, 1863, Heft 3, p 195-262), решая задачу упругого рассеяния излучения точечного источника на идеально жесткой сфере с помощью потенциальных функций. Людвиг Лоренц дал полное решение для прозрачных

сфер (Ludvig Lorenz: Lysbevaegelsen i og uden for en af plane Lysbolger belyst Kugle (Движение света внутри и снаружи сферы, освещаемой плоскими лампочками) Det ongelige Danske Videnskabernes Selskabs Skrifter, 6. Raekke, 6. Bind, 1890,1,p 1-62., 1890). Ми и Дебай опубликовали общие решения в 1908 и 1909 годах соответственно. Эти и многие другие ссылки года можно найти в историческом обзоре Логана [83]. Изложение теории Ми можно найти в книгах Шифрина [84], Ван де Хульста [85], Керкера [86] и Борна и Вольфа [67]. Несмотря на долгую историю, исследование рассеяния на малых частицах актуально и сегодня [87].

В научной литературе обычно называют пионерской работу [14] о распространении ЭМ возбуждения вдоль цепочки частиц за счет их взаимного волнового взаимодействия при возбуждении крайней частицы цепочки. Действительно, в [14] впервые отмечено существование в плазменных цепочках волн с неэкспоненциальным затуханием. Стоит отметить, что в [14] учитывается поток энергии вдоль цепочки частиц только в одну сторону без отражений от частиц цепочки. Поэтому отсутствуют интерференционные эффекты. Метод исследования – модифицированная теория рассеяния Ми. Модификация проведена на основе работ [88 - 91]. В [88] рассмотрены условия возбуждения продольных волн поляризации в металлических частицах (в классической теории Ми рассматривается возбуждение только поперечных волн) с дальнейшим расчетом сечения экстинкции изолированных частиц, в частности, натрия.

В [89, 90] вводится модельный гамильтониан осциллятора с динамической поляризуемостью, на основе которого строится гамильтониан взаимодействия с электрическими полями в малом ансамбле осцилляторов [89] с последующим обобщением на случай  $N$  тел [90]. Результаты работ [88 - 90] объединены при развитии теории Mie-Ruppin [91]. В [91] уравнения Максвелла решаются разложением по сферическим гармоникам для одной сферы. Затем используется теорема сложения сферических гармоник и проекционная техника. Окончательный результат, как отмечают авторы, оказывается слишком сложным и поэтому неэффективным с точки зрения численных расчетов.

Развитая в [88-91] диполь-дипольная модель взаимодействия частиц получила дальнейшее развитие в [92] в виде учёта мультипольных взаимодействий в длинноволновом пределе. Однако, в ряде работ отмечается расхождение результатов модифицированной теории Ми с экспериментальными данными. Например, из работы [93] можно заключить, что указанное расхождение связано с обилием слипшихся частиц. Решение этой проблемы известно: в задачах многократного рассеяния света [75] при использовании техники операторов Ватсона потенциалы рассеяния не могут перекрываться. Например, в качестве уединенного рассеивателя необходимо рассматривать димер.

Среди подходов, развитых до 2000-х годов, отдельно стоит отметить два мощных метода. Во-первых, метод структурного фактора [94] применительно к расчету спектральной плотности и резонансных частот нормальных оптических мод в цепочках плотно упакованных металлических цилиндров. Во-вторых, формализм Т-матриц Waterman [95], используемый для расчета локальных электрических полей для одиночных сферических и сфероидальных металлических [96] и диэлектрических [97] частиц в электродинамическом и длинноволновом режимах. Метод используется для расчёта рассеянного поля вплоть до поверхности рассеивателя, но не позволяет рассчитать поля внутри него.

В 2000 году была опубликована работа [98], в которой проводится вычисление дисперсионных характеристик дискретных волноводов. Дисперсионное уравнение для дискретных волноводов, выведенное из уравнения для осцилляций в цепочке диполей Герца оказалось нелокальным и задаваемым бесконечным рядом. В случае затухающей волны этот ряд оказывается расходящимся. В частности, в [98] показано, что основной вклад в распространение плазмон-поляритонной волны дают ближайшие соседи. Вывод получен на основе сравнения со случаем учёта до пяти ближайших соседей.

Первым полноценным решением проблемы дисперсии в плазмонных цепочках можно считать работу [99], в которой для суммирования бесконечных рядов используются полилогарифмы. Описание метода приведено в [80]. Полилогарифм

представляет собой функцию, равную сумме бесконечного ряда внутри единичного круга и аналитически продолженную на остальную часть комплексной плоскости. Это позволяет получить аналитическое продолжение дисперсионного уравнения для плазмонной цепочки на область комплексных частот. Формализм одинаково работает в представлении комплексных частот и в представлении комплексных волновых чисел. В [99] показано, что полное решение рассекается световой линией, что согласуется с численными результатами [100], для собственных мод конечной цепочки диполей, перекрёстно связанных диполь-дипольным взаимодействием. В [100] рассчитана дисперсия плазмонов в цепочке с учетом затухания и дальних взаимодействий. Отметим, что в данном случае каждая реализация дает дискретный набор точек на дисперсионной кривой для бесконечной цепочки. При этом число точек равно числу частиц в цепочке. Численные методы использовались и для непосредственного расчета распределения электромагнитного поля в системе частиц. Например, в [101] расчет поля производится методом конечных разностей во временной области (finite difference time domain – FDTD), и уже на основе результатов расчета строится дисперсионная кривая.

Помимо группы Gérardy, Ausloos, Clippe [89-91] задачей рассеяния на ансамбле  $N$  сферических частиц занимались несколько научных групп. В зарубежной литературе считается, что первое полное решение задачи рассеяния на двух сферах с экспериментальной проверкой дано в 1967 году и позже [102 -104]. В [102] приведена ссылка на работу Т.А. Гермогеновой от 1963 года. Авторы [103,104] применили стандартные электромагнитные граничные условия к поверхностям двух сфер, использовали теорему сложения сферических гармоник и решили полученные линейные уравнения для интерактивных коэффициентов рассеяния прямой инверсией матрицы. С целью более эффективного расчета коэффициентов Fuller и Kattawar [105,106] разработали метод «порядка рассеяния», в котором пытались свести задачу рассеяния на  $2^L$  сферах к системе взаимодействующих пар сфер. Через несколько лет существенный вклад в развитие метода «порядка рассеяния» внес Maskowski [107]. Его вклад в решение задачи рассеяния на несколь-

ких сферах заключался практически в новом выводе теоремы сложения для векторных сферических гармоник и, как следствие, в значительном упрощении формулировки и вычислительных аспектов теорем сложения, что позволило переписать рекуррентные соотношения для эффективного вычисления коэффициентов сложения.

Также стоит отметить еще два независимых подхода. Borghese с соавторами [108, 109] решали проблему векторного рассеяния с помощью потенциалов Дебая и математической техники функции Грина для учета эффектов многократного рассеяния. В то же время Wang и Chew [110] разработали рекурсивный подход с использованием T-матрицы, т.н. recursive aggregate T-matrix algorithm (RATMA) и эффективный метод вычисления коэффициентов по теореме сложения векторов для решения задачи многократного рассеяния более чем на 6000 сферах.

Однако, решение проблемы рассеяния на взаимодействующих волновым образом сферах оставалось неполным. Так и не были выведены явные выражения для матрицы амплитуд рассеяния и, следовательно, матрицы Мюллера и поляризационных свойств. Существенный прогресс в этом направлении совершил Хи [111,112]. Результаты Хи составили основу метода, названного в диссертации Гозмана [75] формализмом многоцентрового рассеяния Ми для вычисления распределения электромагнитного поля в пространстве в котором произвольным образом распределены сферические частицы.

## ГЛАВА 2. ЗАДАЧА О РАСПРОСТРАНЕНИИ ЭМ ВОЗБУЖДЕНИЯ ВДОЛЬ КОНЕЧНОЙ ЛИНЕЙНОЙ ЦЕПОЧКИ ЧАСТИЦ

### 2.1 Постановка задачи

В данном подразделе формулируется задача о распространении ЭМ возбуждения вдоль конечной  $j=1,2,\dots,N$  линейной периодической цепочки металлических или диэлектрических частиц в немагнитной среде с постоянной диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_0$  (рис.2.1.1) и приводятся основные уравнения для решения задачи. Неоднородная диэлектрическая проницаемость среды  $\hat{\varepsilon}(\vec{r})$  равна комплексной диэлектрической проницаемости  $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$  внутри частиц и постоянной диэлектрической проницаемости окружающей среды  $\varepsilon_0$  вне частиц. Рассматривается случай частиц сферической формы радиуса  $r_0$ . Частицы считаются малыми  $2r_0 \ll \lambda_0$  в масштабе длины волны возбуждающего излучения. Предполагается, что только крайняя частица цепочки возбуждается коллимированным линейно поляризованным ЭМ лучом, электрическое и магнитное поля которой даются формулами (1.8.2).

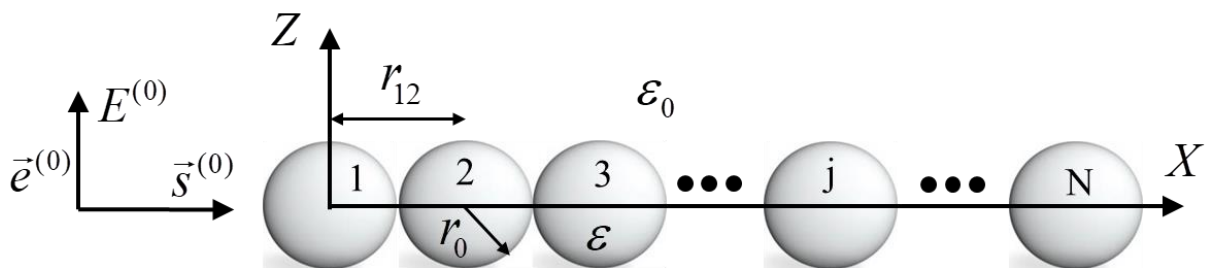


Рисунок 2.1.1. – Схематическое изображение задачи о рассеянии ЭМ волны на линейной цепочке  $N$  сферических частиц, расположенных вдоль оси  $x$ . Поляризованная вдоль оси  $z$  волна возбуждает крайнюю левую частицу цепочки.

Система уравнений для плотности  $\vec{J}^{(j)}(\vec{r})$  самосогласованных электрических токов, возбуждаемых в частицах, дается формулой (1.8.1), в которой плотность электрического тока в изолированной частице имеет вид

$$\vec{J}_{(1)}^{(j)}(\vec{r}) = \int d\vec{r}' \bar{\bar{T}}^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}_j, \vec{r}' - \vec{r}_j) \bar{E}^{(0)}(\vec{r}') , \quad (2.1.1)$$

Оператор рассеяния малой сферической частицы  $k_0 r_0 \ll 1$  в дипольном электрическом приближении

$$\bar{\bar{T}}^{(0)}(\vec{r}, \vec{r}') = \tilde{t} \delta(\vec{r}) \delta(\vec{r}') \bar{I} \quad (2.1.2)$$

выражается через амплитуду рассеяния уединенной частицы  $\tilde{t} = -4\pi k_0^2 \eta$ , где  $\eta = (3i/2k_0^3) a_{(M)1}$  - поляризуемость частицы,  $a_{(M)1}$  - парциальный коэффициент рассеяния теории Ми [68,85],  $\delta$  - дельта функция. Подстановка (2.1.2) в (2.1.1) дает после интегрирования

$$\vec{J}_{(1)}^{(j)}(\vec{r}) = \tilde{t} \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \bar{E}^{(0)}(r_j) \quad (2.1.3)$$

Решение (1.8.1), (2.1.1) ищем в виде

$$\vec{J}^{(j)}(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \vec{e}_0 J^{(j)} \quad (2.1.4)$$

Скалярные амплитуды токов  $J^{(j)}$  не зависят от положения частиц. Подстановка (2.1.4) в уравнение для самосогласованных токов приводит к системе алгебраических уравнений

$$I^{(j)} = a_j + \sum_{j=1}^N \sum_{j' \neq j=1}^N a_{jj'} I^{(j')} \quad (2.1.5)$$

Здесь введены следующие обозначения

$$J^{(j)} = \tilde{t} I^{(j)} / E^{(0)}(0) \equiv \tilde{t} \hat{I}^{(j)} , \quad \hat{a}_j = \exp(ik_0 \vec{s}_0 \vec{r}_j) E^{(0)}\left(\left(\vec{r}_j - \vec{r}_1^0\right)_\perp^0\right) / E^{(0)}(0) \quad (2.1.6a)$$

$$a_{jj'} = g_t(r_{jj'}) - \left[ g_t(r_{jj'}) - g_\ell(r_{jj'}) \right] (\vec{e}_0 \vec{s}_{jj'})^2 \quad (2.1.6b)$$

$$g_t(r) = \tilde{t} \left( 1 + \frac{i}{k_0 r} - \frac{1}{k_0^2 r^2} \right) G_0(r) , \quad g_\ell(r) = \tilde{t} \left( -\frac{2i}{k_0 r} + \frac{2}{k_0^2 r^2} \right) G_0(r) \quad (2.1.6b)$$

$$\vec{r}_{jj'} = \vec{r}_j - \vec{r}_{j'} , \quad \vec{s}_{jj'} = \vec{r}_{jj'} / r_{jj'} \quad (2.1.6g)$$



Ниже по тексту величина плотности тока  $\hat{I}^{(j)}$  и источника  $\hat{a}_j$  фигурируют как нормированные на амплитуду возбуждающей волны  $E^{(0)}(0)$  величины, но без циркумфлекса.

Сферические частицы расположены вдоль оси  $x$  прямоугольной системы координат  $xuz$  с расстоянием  $r_{12}$  между соседними частицами (рис. 2.1.1). Падающий луч распространяется параллельно оси цепочки с вектором поляризации вдоль оси  $z$ . Амплитуда пучка (1.8.2)  $E^{(0)}((\vec{r} - \vec{r}_1)_\perp^0)$  отлична от нуля только при малых величинах  $(\vec{r} - \vec{r}_1)_\perp^0$ . Тогда выражение (1.8.13) для коллективного сечения экстинкции принимает вид [65]

$$Q_{ext} = -\frac{1}{k_0 E^{(0)}(0)} \operatorname{Im} \left[ \exp(-ik_0 \vec{s}_0 \vec{r}_1) \vec{e}_0 \hat{J}^{(1)}(k_0 \vec{s}_0) \right] \quad (2.1.7)$$

где  $\hat{J}^{(1)}(\vec{k})$  - Фурье образ плотности тока  $\hat{J}^{(1)}(\vec{r} - \vec{r}_1)$ , возбужденного в первой частице.

В равенство (2.1.7) входит ток только в первой частице, которая и возбуждается внешним излучением. Таким образом, равенство (2.1.7) показывает, что только первая частица цепочки делает вклад в коллективное сечение экстинкции. Вклад остальных частиц осуществляется через их вклад в ток в первой частице. В этом смысле по цепочке распространяется неизлучающая («темная») мода.

Сечение экстинкции уединенной сферической частицы даётся формулой

$$Q_{ext(1)} = -\frac{\operatorname{Im} \tilde{t}}{k_0} \quad (2.1.8)$$

Нормируем на него коллективное сечение экстинкции  $N$  частиц

$$\frac{Q_{ext}}{Q_{ext(1)}} = \operatorname{Re} F_N + \frac{\operatorname{Re} \tilde{t}}{\operatorname{Im} \tilde{t}} \operatorname{Im} F_N, \quad (2.1.9a)$$

где коэффициент коллективной экстинкции даётся формулой

$$F_N = \sum_{j=1}^N \exp(-ik_0 \vec{s}_0 \vec{r}_j) I^{(j)} \quad (2.1.96)$$

В цепочке независимых частиц коэффициент коллективной экстинкции принимает вид

$$F_N (a_{jj' \rightarrow 0}) \rightarrow \sum_{j=1}^N \frac{E^{(0)} \left( (\vec{r} - \vec{r}_1)_{\perp j}^0 \right)}{E^{(0)}(0)} \quad (2.1.10)$$

Суммирование в (2.1.10) осуществляется только по частицам, непосредственно возбуждаемым внешним излучением.

## 2.2 Приближение ближайших соседей

В данном подразделе рассматривается приближение ближайших соседей, в котором параметр волнового взаимодействия  $a_{jj'}$  (2.1.6б) отличен от нуля только для соседних частиц, т.е.  $a_{jj'} \approx 0$ , если  $|j - j'| > 1$ . При перпендикулярной к оси цепочки поляризации ЭМ излучения произведение  $\vec{e}_0 \vec{s}_{jj'} = 0$ , что существенно упрощает выражение для волнового взаимодействия частиц (2.1.6б). Излучение возбуждает только крайнюю частицу цепочки, т.е.  $a_1 = \tilde{t} E^{(0)}(r_1 = 0) \neq 0$ ,  $a_{j>1} = 0$ . Условие  $r_1 = 0$  соответствует расположению начала координат в центре крайней частицы (рис. 2.1.1). При сделанных упрощениях решение уравнения (2.1.5) записывается в виде [66]:

$$I^{(j)} = (-1)^{j-1} 2 \cos \mathcal{G} \frac{\sin(N+1-j)\mathcal{G}}{\sin(N+1)\mathcal{G}}, \quad (2.2.1a)$$

$$\cos \mathcal{G} = -\frac{1}{2a_{12}} \quad (2.2.1б)$$

Здесь параметр волнового взаимодействия двух соседних частиц  $a_{12} = a'_{12} + ia''_{12}$  записан через вспомогательную комплексную переменную  $\mathcal{G} = \mathcal{G}' + i\mathcal{G}''$ .

Подставляя (2.2.1а) в выражение для коэффициента коллективной экстинкции (2.1.9б), получим

$$F_N = I^{(1)} = 2 \cos \vartheta \frac{\sin(N\vartheta)}{\sin(N+1)\vartheta} \quad (2.2.2)$$

Дадим некоторые пояснения к выводу формулы (2.2.1а). Уравнение (2.1.5) записывается с помощью матрицы (1.8.30):

$$\sum_{j'=1}^N A_{jj'} I^{(j')} = I_{(1)}^{(j)} \quad (2.2.3а)$$

$$A_{jj'} = \delta_{jj'} - a_{jj'} \quad (2.2.3б)$$

В приближении ближайших соседей  $|j - j'| \leq 1$  матрица (2.2.3б) становится трехдиагональной ленточной матрицей Якоби (см. рис.2.2.1). Это позволяет

1	-a <sub>1,2</sub>	0	0	0	0	0
-a <sub>2,1</sub>	1	-a <sub>2,3</sub>	0	0	0	0
0	-a <sub>2,3</sub>	1	-a <sub>3,4</sub>	0	0	0
0	0	0	0		1	-a <sub>n-1,n</sub>
0	0	0	0	0	-a <sub>n,n-1</sub>	1

Рисунок 2.2.1. – Схематическое изображение матрицы (2.2.3б).

записать решение (2.2.3а) в виде

$$I^{(n)} = \frac{a_{12}^{n-1}}{\det A_n} I_{(1)}^{(1)} \quad (2.2.4)$$

Определитель трехдиагональной матрицы задаётся известной рекуррентной формулой

$$f_n = d_n f_{n-1} - c_{n-1} b_{n-1} f_{n-2} \quad (2.2.5)$$

для  $n > 1$ ,  $f_1 = d_1$ ,  $f_0 = 1$ ,  $f_{-1} = 0$ . Подстановка коэффициентов  $d_1 = \delta_{11} - a_{11} = 1 - 0 = 1$ ,  $d_n = \delta_{nn} - a_{nn} = 1 - 0 = 1$ ,  $c_{n-1} = \delta_{n,n-1} - a_{n,n-1} = -a_{12}$ ,  $b_{n-1} = \delta_{n-1,n} - a_{n-1,n} = -a_{12}$ , даёт рекуррентную формулу

$$\det A_n = \det A_{n-1} - a_{12}^2 \det A_{n-2} \quad (2.2.6)$$

для вычисления знаменателя (2.2.4). Асимптотическое решение этого рекуррентного соотношения имеет вид

$$\det A_n = 1 - (n-1)a_{12}^2 + O(a_{12}^4) \quad (2.2.7)$$

Рекуррентное соотношение (2.2.6) для детерминанта (2.2.4) матрицы (2.2.3б) в приближении Якоби позволяет записать решение (2.2.1) при возбуждении крайней частицы цепочки.

Если рассматривать первое и последнее уравнения (2.2.3а) как граничные условия для оставшихся  $N - 2$  уравнений, то решение уравнения (2.2.3а) совпадает с решением задачи Рэлея для осцилляций упругой струны [113]. Может показаться, что такое решение является стоячей волной токов в частицах цепочки. Однако, это не так. Физически выражение для токов (2.2.1а) описывает вперед и назад бегущие волны с фазовой модуляцией амплитуды токов в  $j$  – ой частице цепочки [A4]. Об этом свидетельствует фактор  $(-1)^{j-1}$ , где  $j$  – номер частицы. Чтобы показать это явно, преобразуем (2.2.1а) к виду

$$I^{(j)} = (-1)^{j-1} 2 \cos \vartheta \frac{1}{\sin(N+1)\vartheta} \frac{1}{2i} \left[ -e^{-i(N+1)\vartheta} e^{ij\vartheta} + e^{i(N+1)\vartheta} e^{-ij\vartheta} \right] \quad (2.2.8)$$

или

$$I^{(j)} = (-1)^{j-1} \left( A_N e^{ij\vartheta} + B_N e^{-ij\vartheta} \right) \quad (2.2.9)$$

где коэффициенты  $A_N$  и  $B_N$  имеют вид

$$A_N = 2 \cos \vartheta \frac{1}{\sin(N+1)\vartheta} \frac{1}{2i} (-1) \exp[-i(N+1)\vartheta] \quad (2.2.10a)$$

$$B_N = 2 \cos \mathcal{G} \frac{1}{\sin(N+1)\mathcal{G}} \frac{1}{2i} \exp[i(N+1)\mathcal{G}] \quad (2.2.106)$$

Легко показать, что сумма

$$A_N + B_N = 2 \cos \mathcal{G} \quad (2.2.11)$$

Равенство (2.2.16) рассматривается далее как дисперсионное уравнение. Решение этого уравнения можно записать в виде

$$2 \operatorname{ch}^2 \mathcal{G}'' = 1 + \frac{1}{4|a_{12}|^2} + \frac{1}{4|a_{12}|^2} \left\{ \left[ (1 - 2a'_{12})^2 + 4a''_{12}{}^2 \right] \left[ (1 + 2a'_{12})^2 + 4a''_{12}{}^2 \right] \right\}^{1/2} \quad (2.2.12a)$$

$$2 \cos^2 \mathcal{G}' = 1 + \frac{1}{4|a_{12}|^2} - \frac{1}{4|a_{12}|^2} \left\{ \left[ (1 - 2a'_{12})^2 + 4a''_{12}{}^2 \right] \left[ (1 + 2a'_{12})^2 + 4a''_{12}{}^2 \right] \right\}^{1/2} \quad (2.2.12b)$$

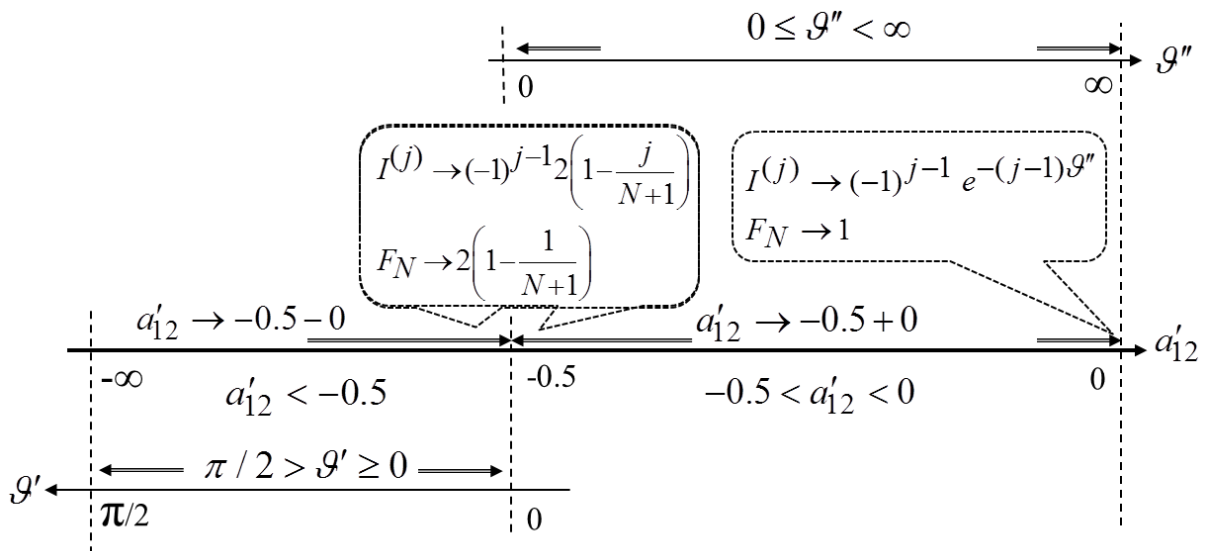


Рисунок 2.2.2. – Иллюстрация к анализу решения (2.2.12) дисперсионного уравнения (2.2.16). Мнимая часть параметра волнового взаимодействия соседних частиц равна нулю,  $a''_{12} = 0$ .

Проведём анализ соотношений (2.2.12). Результаты анализа иллюстрирует рис.2.2.2. Пусть мнимая часть параметра волнового взаимодействия соседних частиц равна нулю,  $a''_{12} = 0$ . Формулы (2.2.12) упрощаются к виду

$$2ch^2 \mathcal{G}'' = \frac{4(a'_{12})^2 + 1 + |1 - 4(a'_{12})^2|}{4(a'_{12})^2} \quad (2.2.13a)$$

$$2\cos^2 \mathcal{G}' = \frac{4(a'_{12})^2 + 1 - |1 - 4(a'_{12})^2|}{4(a'_{12})^2} \quad (2.2.13b)$$

Раскрываем модуль в формуле (2.2.13a)

$$ch^2 \mathcal{G}'' = \begin{cases} \frac{1}{2(a'_{12})^2} \text{ или } ch \mathcal{G}'' = \frac{1}{2|a'_{12}|}, & \text{при } |a'_{12}| \leq 0.5 \\ 1 \text{ или } \mathcal{G}'' = 0, & \text{при } |a'_{12}| > 0.5 \end{cases} \quad (2.2.14a)$$

Аналогично для (2.2.13b)

$$2\cos^2 \mathcal{G}' = \begin{cases} 2 \text{ или } \cos^2 \mathcal{G}' = 1, \mathcal{G}' = 0 & \text{при } |a'_{12}| \leq 0.5 \\ \frac{1}{2(a'_{12})^2} \text{ или } \cos \mathcal{G}' = \frac{1}{2|a'_{12}|}, & \text{при } |a'_{12}| > 0.5 \end{cases} \quad (2.2.14b)$$

Действительная часть параметра  $a_{12}$  может стремиться к величине  $a'_{12} = -0.5$  справа  $a'_{12} \rightarrow -0.5 + 0$ , оставаясь в диапазоне  $-0.5 < a'_{12} < 0$ , или слева  $a'_{12} \rightarrow -0.5 - 0$ , когда  $a'_{12} < -0.5$ . В первом случае верхние равенства (2.2.14) дают  $ch \mathcal{G}'' = (2|a'_{12}|)^{-1}$ ,  $\mathcal{G}' = 0$ . Аргумент гиперболического косинуса  $\mathcal{G}''$  изменяется в интервале  $0 \leq \mathcal{G}'' < \infty$ . На левом краю этого интервала,  $\mathcal{G}'' \rightarrow 0$ , выражения (2.2.1a) для токов в частицах и коэффициента коллективной экстинкции (2.2.2) асимптотически принимают вид

$$I^{(j)} \rightarrow (-1)^{j-1} 2 \left( 1 - \frac{j}{N+1} \right) \quad (2.2.15)$$

$$F_N \rightarrow 2 \left( 1 - \frac{1}{N+1} \right) \quad (2.2.16)$$

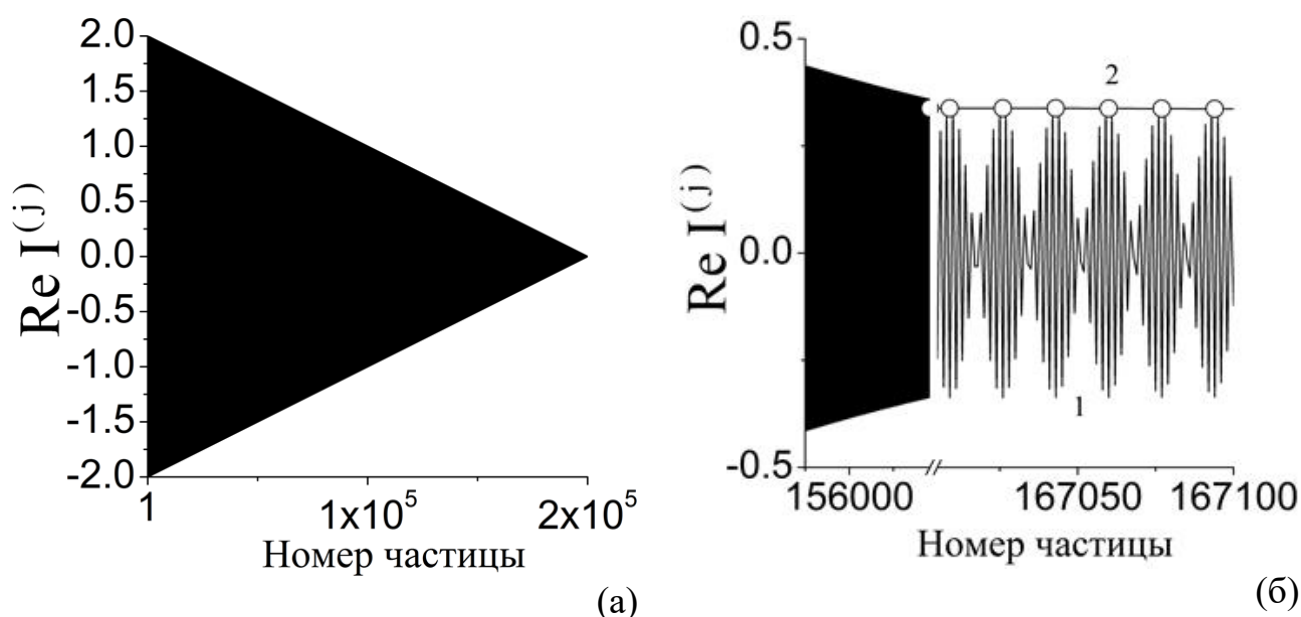


Рисунок 2.2.3. – (а) Расчет по асимптотической формуле (2.2.15) для точных резонансных условий  $a_{12} = -0.5 + 0i$  токов в частицах линейной цепочки из  $N = 2 \times 10^5$  плотно упакованных частиц при возбуждении первой частицы. Затухающие осцилляции амплитуд токов в частицах длинной цепочки частиц приводит к визуальному эффекту сплошь закрашенного треугольника; (б) детальное изображение панели (а) (кривая 1) и огибающей для осциллирующей кривой 1 (кривая 2 с символами (o)).

На рис.2.2.3 приведены графики, иллюстрирующие формулу (2.2.15). Распределение токов в частицах цепочки представляет собой последовательные цуги токов с уменьшением максимальной амплитуды тока в цуге по мере увеличения номера частицы в цепочке. Огибающая цугов приведена на рис.2.2.3(б) в виде кривой 2 с символами (o).

В случае стремления  $a'_{12} \rightarrow -0.5 - 0$  слева из нижних равенств (2.2.14) получим  $\mathcal{G}'' = 0$ ,  $\cos \mathcal{G}' = -(2|a'_{12}|)^{-1}$ . Аргумент косинуса  $\mathcal{G}'$  изменяется в интервале  $0 \leq \mathcal{G}' < \pi/2$ . На левом краю  $\mathcal{G}' \rightarrow 0$  этого интервала из (2.2.1а) и (2.2.2) опять получаем формулы (2.2.15) и (2.2.16). В других случаях токи в цепочке экспоненциально затухают с увеличением номера частицы

$$I^{(j)} \rightarrow (-1)^{j-1} \exp[-(j-1)\mathcal{G}''] \quad (2.2.17)$$

а коэффициент коллективной экстинкции стремится к единице

$$F_N \rightarrow 1 \quad (2.2.18)$$

Коллективный коэффициент экстинкции длинной цепочки,  $N \gg 1$ , согласно (2.2.16) равен не 1, а приблизительно  $F_N \approx 2$ , что свидетельствует о косвенном влиянии частиц с номерами  $j > 1$  на коллективный коэффициент экстинкции через влияние на самосогласованный ток в первой частице. Формула же (2.2.17) описывает экспоненциальное затухание ЭМ возбуждения вдоль цепочки. В этом случае коллективный коэффициент экстинкции (2.2.18) стремится к физически понятной величине, равной единице.

В итоге, в случае резонанса  $a''_{12} = 0$ , соответствующего дальнему распространению ЭМ возбуждения по цепочке частиц, дисперсионное уравнение (2.2.16) дает

$$a'_{12} > -0.5, \quad \mathcal{G}' = 0, \quad \text{ch } \mathcal{G}'' = \frac{1}{2|a'_{12}|} \quad (2.2.19)$$

$$a'_{12} < -0.5, \quad \cos \mathcal{G}' = \frac{1}{2|a'_{12}|}, \quad \mathcal{G}'' = 0 \quad (2.2.20)$$

$$a'_{12} = -0.5, \quad \mathcal{G}' = 0, \quad \mathcal{G}'' = 0 \quad (2.2.21)$$

Равенство  $a''_{12} = 0$ , согласно [114], соответствует частоте протекания в приближении взаимодействия ближайших соседей. С другой стороны, условие  $a''_{12} = 0$  имеет простой физический смысл. В системе из двух частиц (димере) могут быть возбуждены две собственные моды с комплексными собственными значениями  $\lambda_{1,2} \equiv \lambda'_{1,2} + i\lambda''_{1,2} = 1 \pm a_{12}$ , т.е.  $\lambda_1 = 1 + a_{12}$ ,  $\lambda_2 = 1 - a_{12}$  [Приложение 4]. Собственные частоты этих двух мод определяются из условия равенства нулю мнимой части собственных значений  $\lambda''_{1,2} = 0$ , которое совпадает с условием  $a''_{12} = 0$ .



Таким образом, анализ решения дисперсионного уравнения (2.2.16) показывает, что равенства  $a''_{12} = 0$  и  $a'_{12} = -0.5$  являются точным резонансным условием для моды дальнего распространения (12) (см рис.2.2.4). При малом отклонении мнимой части  $a''_{12}$  от нулевой величины кривые 1', 2' вблизи значения  $a'_{12} = -0.5$  на рис.2.2.4 сглаживаются.

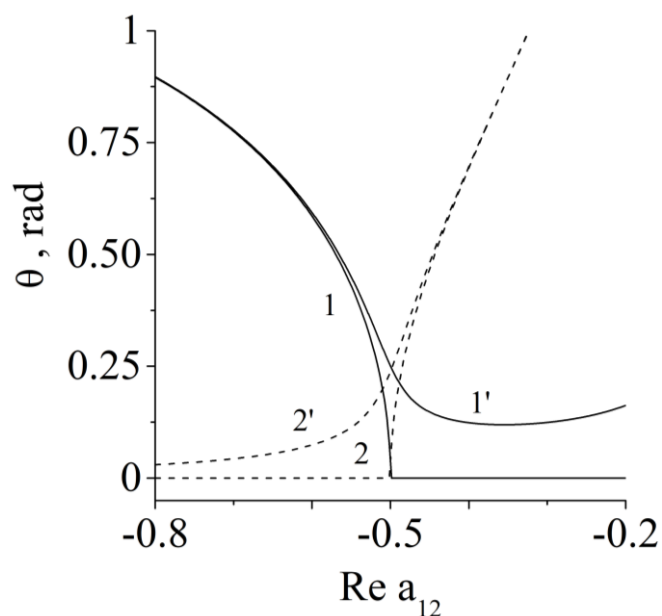


Рисунок 2.2.4. – Расчет (2.2.12) зависимости действительной (сплошные кривые 1, 1') и мнимой (пунктирные кривые 2, 2') частей параметра  $\vartheta$  от действительной части параметра волнового взаимодействия  $a'_{12}$  в случае точного резонансного условия  $a''_{12} = 0$  (кривые 1,2) и при  $a''_{12} = 0.03$ .

### 2.3 Оценка вклада дальних соседей

В данном подразделе анализируется вклад дальних соседей в распространение ЭМ возбуждения по цепочке частиц. Запишем матрицу (2.2.3б) в виде разности

$$A_{jj'} = A^{(n)}_{jj'} - A^{(f)}_{jj'} \quad (2.3.1)$$

где

$$A^{(n)}_{jj'} = \delta_{jj'} - a_{jj'} \quad , \quad |j - j'| \leq 1 \quad (2.3.2a)$$

$$A^{(f)}_{jj'} = a_{jj'} \quad , \quad |j - j'| > 1 \quad (2.3.2б)$$

Подстановка в (2.1.5) даёт

$$A^{(n)}_{jj'} I^{(j)} = a_j + A^{(f)}_{jj'} I^{(j')} \quad (2.3.3)$$

Частичное решение уравнения (2.3.3) имеет вид

$$I^{(j)} = \left( A^{(n)}_{jj'} \right)^{-1} a_j + \left( A^{(n)}_{jj'} \right)^{-1} A^{(f)}_{jj'} I^{(j')} \equiv I^{(n)} + I^{(f)} \quad (2.3.4)$$

Вектор  $I^{(n)}$ , имеющий физический смысл токов, наведенных в частицах цепочки в приближении ближайших соседей, известен и задается уравнением (2.2.1a). Вектор  $I^{(f)}$ , описывающий токи, наведенные в частицах цепочки при учёте только дальних соседей (не ближайших соседей), вычислим по теории возмущений. Положим  $A^{(n)}_{jj'} \approx \delta_{jj'}$  и  $I = I^{(n)}$  в (2.3.4), что даёт

$$I^{(j)(f)} \approx \sum_{|j-j'|>1}^N a_{jj'} I^{(j')(n)} \quad (2.3.5)$$

Теперь для относительного вклада в токи волнового взаимодействия дальних частиц цепочки можно записать выражение

$$\frac{I^{(j)(f)}}{I^{(j)(n)}} = \frac{1}{I^{(j)(n)}} \sum_{|j-j'|>1}^N a_{jj'} I^{(j')(n)} \quad (2.3.6)$$

## 2.4 Возбуждение двух крайних частиц цепочки

В данном разделе рассмотрен случай возбуждения крайних частиц с противоположных концов короткой цепочки. На рис.2.4.1 приведена схема такого возбуждения. В этом случае уравнение (2.1.5) необходимо решать с начальными

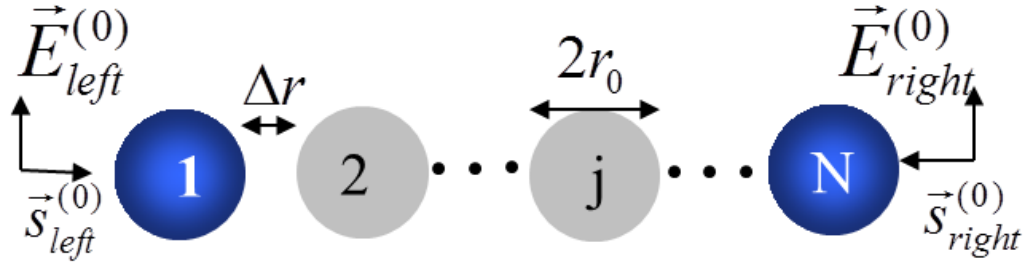


Рисунок 2.4.1. – Схематическое изображение возбуждения двух крайних частиц цепочки.

условиями вида  $a_1 = \tilde{t}E_{left}^{(0)} \neq 0$  ,  $a_N = \tilde{t}E_{right}^{(0)} \neq 0$  ,  $a_{1 < j < N} = 0$  . Амплитуды «левой» и «правой» возбуждающих волн произвольны. При этих начальных условиях решение (2.1.5) имеет вид

$$\frac{I^{(j)}}{2 \cos \vartheta} = (-1)^{j-1} \frac{\sin(N+1-j)\vartheta}{\sin(N+1)\vartheta} + (-1)^{N-1} \frac{\sin j\vartheta}{\sin(N+1)\vartheta} \quad (2.4.1)$$

Полученное решение можно трактовать следующим образом: рассматривается случай синфазного возбуждения двух крайних частиц цепочки в предположении, что в эксперименте возбуждение будет проведено с помощью волноводов контролируемой длины от одного источника. Отметим, что интерференционные эффекты, приводящие к осциллирующему виду распределения тока в частицах длинной цепочки [65, A2] проявляются наиболее существенно в пространстве вокруг цепочки частиц [14, 114]. Однако, в данной работе эта область пространства не исследуется, т.к. целью является нахождение условий нулевых радиационных потерь моды.

## 2.5 Выводы к главе 2

В данной главе сформулирована задача о распространении ЭМ возбуждения вдоль конечной  $j = 1, 2, \dots, N$  линейной периодической цепочки металлических или диэлектрических частиц в немагнитной среде с постоянной диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_0$  и приведены основные уравнения для решения задачи.

В приближении волнового взаимодействия ближайших соседей точное резонансное условие возбуждения неизлучающей моды дальнего распространения состоит в равенстве нулю мнимой части параметра парного взаимодействия частиц.

Равенство нулю мнимой части параметра парного взаимодействия частиц имеет простой физический смысл. В системе из двух частиц (димере) могут быть возбуждены две собственные моды с комплексными собственными значениями. Собственные частоты этих двух мод определяются из условия равенства нулю мнимой части собственных значений, которое совпадает с условием равенства нулю мнимой части параметра парного взаимодействия частиц.

Выведены уравнения, описывающие относительный вклад в токи волнового взаимодействия дальних частиц цепочки и описывающие токи, возникающие в случае возбуждения крайних частиц с противоположных концов короткой цепочки.

### ГЛАВА 3. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДЛЯ ЦЕПОЧЕК КРЕМНИЕВЫХ И ЗОЛОТЫХ ЧАСТИЦ

В данной главе приведены результаты численных расчетов по выведенным в предыдущей главе формулам.

#### 3.1 Формулы и величины параметров для численного расчета

Начнем с расчета параметра волнового взаимодействия двух частиц  $a_{12}$  с учетом частотной дисперсии диэлектрической проницаемости реальных материалов частиц и сопоставления полученных численных результатов с резонансной кривой рис.2.2.3. Формулы (2.1.6б) и (2.1.6в) для  $a_{12}$  запишем в виде

$$a_{12} = \tilde{t} \left( 1 + i \frac{1}{x} - \frac{1}{x^2} \right) \frac{\exp(ix)}{-4\pi r_{12}} \quad (3.1.1)$$

где  $x \equiv k_0 r_{12}$ . Амплитуда рассеяния уединенной частицы  $\tilde{t} = -4\pi k_0^2 \eta$  выражается через поляризуемость частицы  $\eta = (3i / 2k_0^3) a_{(M)1}$ . где  $a_{(M)1}$  – парциальный коэффициент рассеяния теории Ми.

В рэлеевском пределе малых частиц  $k_0 r_0 \ll 1$  формула (3.1.1) претерпевает изменения только при расчете коэффициента Ми

$$a_{12}^{Rayleigh} = \tilde{t}^{Rayleigh} \left( 1 + \frac{i}{x} - \frac{1}{x^2} \right) \frac{e^{ix}}{-4\pi r_{12}} \quad (3.1.2a)$$

где

$$\tilde{t}^{Rayleigh} = -4\pi k_0^2 \eta_{Rayleigh}, \quad \eta_{Rayleigh} = (3i / 2k_0^3) a_{(M)1}^{Rayleigh} \quad (3.1.2б)$$

и коэффициент Ми [П.2.5] имеет асимптотику, см. (П.2.10а)

$$a_{(M)1}^{Rayleigh} \approx -i \frac{2}{3} (r_0 k_0)^3 \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} + \dots \quad (3.1.2в)$$

Формулы (П.2.5) для расчета коэффициентов Ми приведены в Приложении 2. В Приложении 3 приведены графики частотной дисперсии коэффициента преломления и диэлектрической проницаемости металлов [119,120] и кремния [119] при

комнатной температуре. Дисперсия диэлектрической проницаемости при повышенной температуре заимствована для кремния из работ [121,122], для золота из работы [123].

Для расчёта нормированных токов в частицах цепочки формулу (2.2.1а) преобразуем к удобному для численных расчетов виду, выделяя явно действительную и мнимую части вспомогательной переменной  $\mathcal{G} = \mathcal{G}' + i\mathcal{G}''$ ,

$$I^{(j)} = (-1)^{j-1} 2 \cos \mathcal{G} \frac{\exp(-j\mathcal{G}'') \exp(+ij\mathcal{G}') - \exp[-(2N+2-j)\mathcal{G}''] \exp[i(2N+2-j)\mathcal{G}']}{1 - \exp[-2(N+1)\mathcal{G}''] \exp[2i(N+1)\mathcal{G}']} \quad (3.1.3)$$

### 3.2 Результаты расчетов токов при возбуждении крайней частицы линейной цепочки частиц

На рис.3.2.1(а,б) приведены результаты расчетов частотной зависимости действительной и мнимой частей параметра волнового взаимодействия  $a_{12}$  двух касающихся Au частиц. Под касанием частиц понимаем нулевой зазор без физического контакта [114]. Расчеты проведены по формуле (15) и в рэлеевском

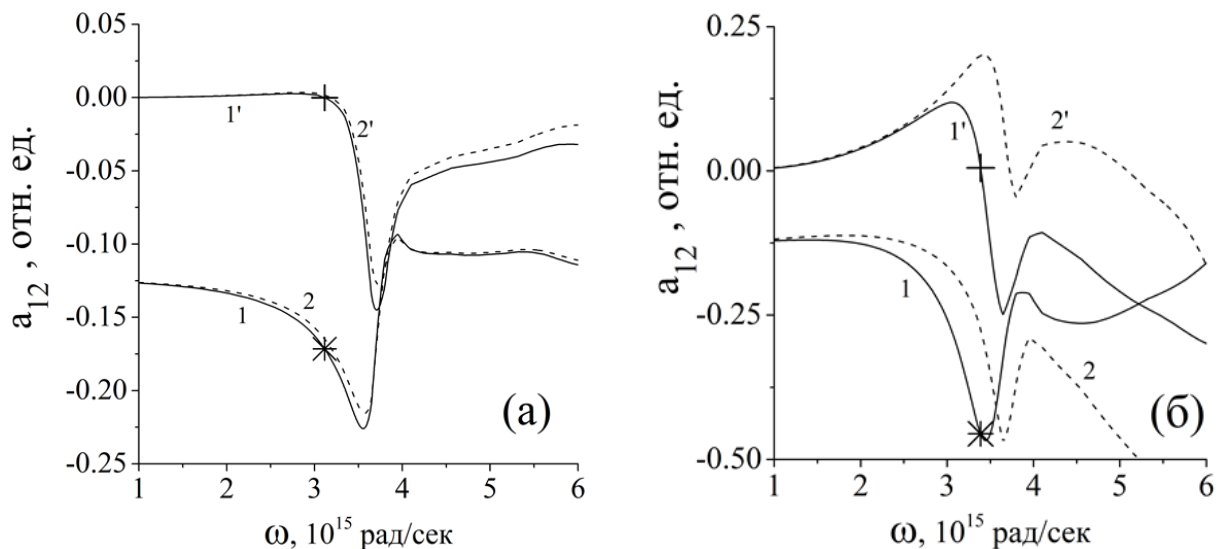


Рисунок 3.2.1 (а,б). – Расчет частотной зависимости действительной (кривые 1 и 2) и мнимой (кривые 1' и 2') частей параметра волнового взаимодействия  $a_{12}$  двух касающихся Au частиц по формуле (3.1.1) (сплошные линии 1 и 1') и в рэлеевском приближении (3.1.2) (пунктирные кривые 2 и 2') для частиц

радиусом  $r_0 = 20$  (а) и 60 нм (б). Символами (+) и (\*) помечены нулевые значения  $a''$  (на кривых 1') и значения  $a'$  (на кривых 1) при той же частоте соответственно.

приближении. Из сопоставления сплошных и пунктирных кривых рис.3.2.1(а) и (б) видно, что приближение (3.1.2) хорошо описывает результат расчета (3.1.1) для малых частиц и дает значительное расхождение по мере их укрупнения. Символами (+) на кривых 1' отмечено нулевое значение  $a''$ . В численных расчетах полагалось, что нулевое значение наступает при модуле величины меньшем  $10^{-3}$ . Для частиц радиусом 20 нм неравенство  $|a''| < 10^{-3}$  выполняется при частоте  $\omega_{\text{Im}a_{12}=0} = 3.1136 \times 10^{15}$  рад/сек (длина волны  $\lambda_{\text{Im}a_{12}=0} = 0.605 \mu\text{м}$ ). При этой частоте действительная часть параметра  $a'_{12} = -0.17$ . Параметр Рэлея равен  $k_0 r_0 = 0.2077$ . При радиусе золотых частиц, равном 60 нм, таких частот две. Первая частота равна  $\omega_{\text{Im}a_{12}=0} = 3.3867 \times 10^{15}$  рад/сек (длина волны  $\lambda_{\text{Im}a_{12}=0} = 0.555 \mu\text{м}$ ). Действительная часть параметра  $a'_{12} = -0.45789$ . Параметр Рэлея равен  $k_0 r_0 = 0.67911$ . Для второй частоты (не показана на рис.3.2.1(б))  $\omega_{\text{Im}a_{12}=0} = 12.062 \times 10^{15}$  рад/сек параметр  $k_0 r_0 = 2.4148$ , т.е. рэлеевское условие  $k_0 r_0 < 1$  не выполняется, и поэтому такие частоты во внимание не принимаются.

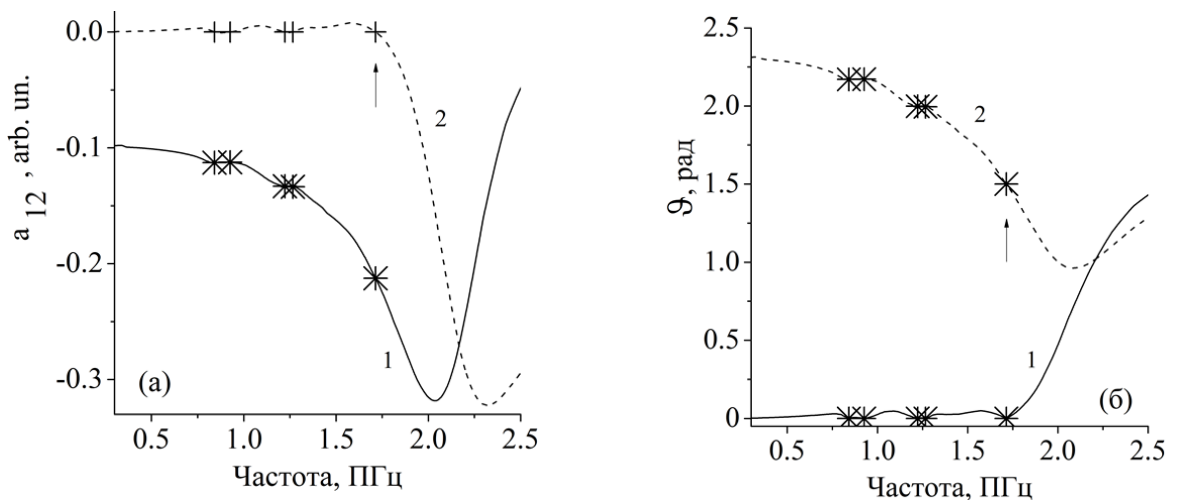
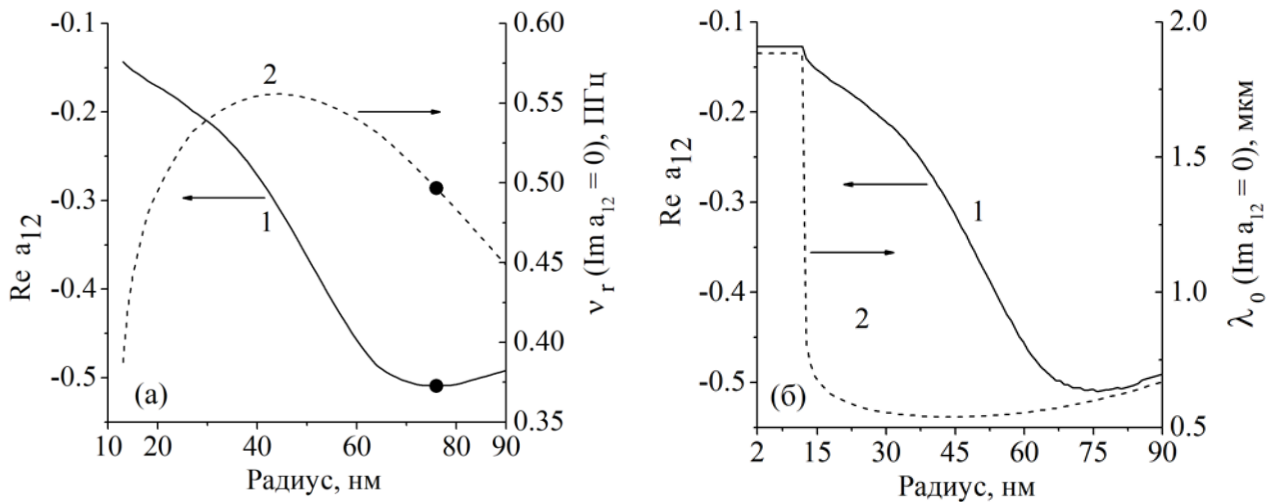


Рисунок 3.2.2(а,б). – Расчет (3.1.1) частотной зависимости действительной (сплошные кривые 1) и мнимой (пунктирные кривые 2) частей параметров  $a_{12}$

(а) и  $\mathcal{G}$  (б) для двух касающихся Si частиц радиусом 13 нм.

На рис.3.2.2 приведены результаты численного расчета для Si сфер радиусом 13 нм. Символами (+) на рис.3.2.2(а) помечены нули  $a''_{12}$ ; символами (\*) – соответствующие им величины  $a'_{12}$ . На рис.3.2.2(б) помечены (\*) соответствующие значения  $\mathcal{G}'$  и  $\mathcal{G}''$ . Вертикальной стрелкой на рис.3.2.2(а,б) отмечено наиболее близкое к  $-0.5$  значение  $a'_{12}$ . Для всех маркированных частот выполняется рэлеевское приближение  $k_0 r_0 < 1$  при  $r_0 = 13$  нм. Линейная частота ЭМ излучения (см. стрелки на рис.3.2.2(а,б)) обозначена как  $\nu_{\text{Im} a_{12}=0}$ .

Аналогичные расчеты проделаны для различных размеров частиц ряда материалов по формуле (3.1.1). Результаты расчетов обобщены следующим образом: Для каждого радиуса частиц найдена из графиков, аналогичных Рис.3.2.1,3.2.2 частота волны  $\omega_{\text{Im} a_{12}=0}$ , при которой мнимая часть  $a''_{12} = 0$ . Частота волны пересчитана в её длину в свободном пространстве  $\lambda_{\text{Im} a_{12}=0}$ , и отложена на правой оси ординат графиков Рис.3.2.2. Соответствующая частоте  $\omega_{\text{Im} a_{12}=0}$  величина действительной части  $a'_{12}$  найдена из графиков типа Рис.3.2.1, 3.2.2 и отложена на левой оси ординат графиков Рис. 3.2.3 и 3.2.4.





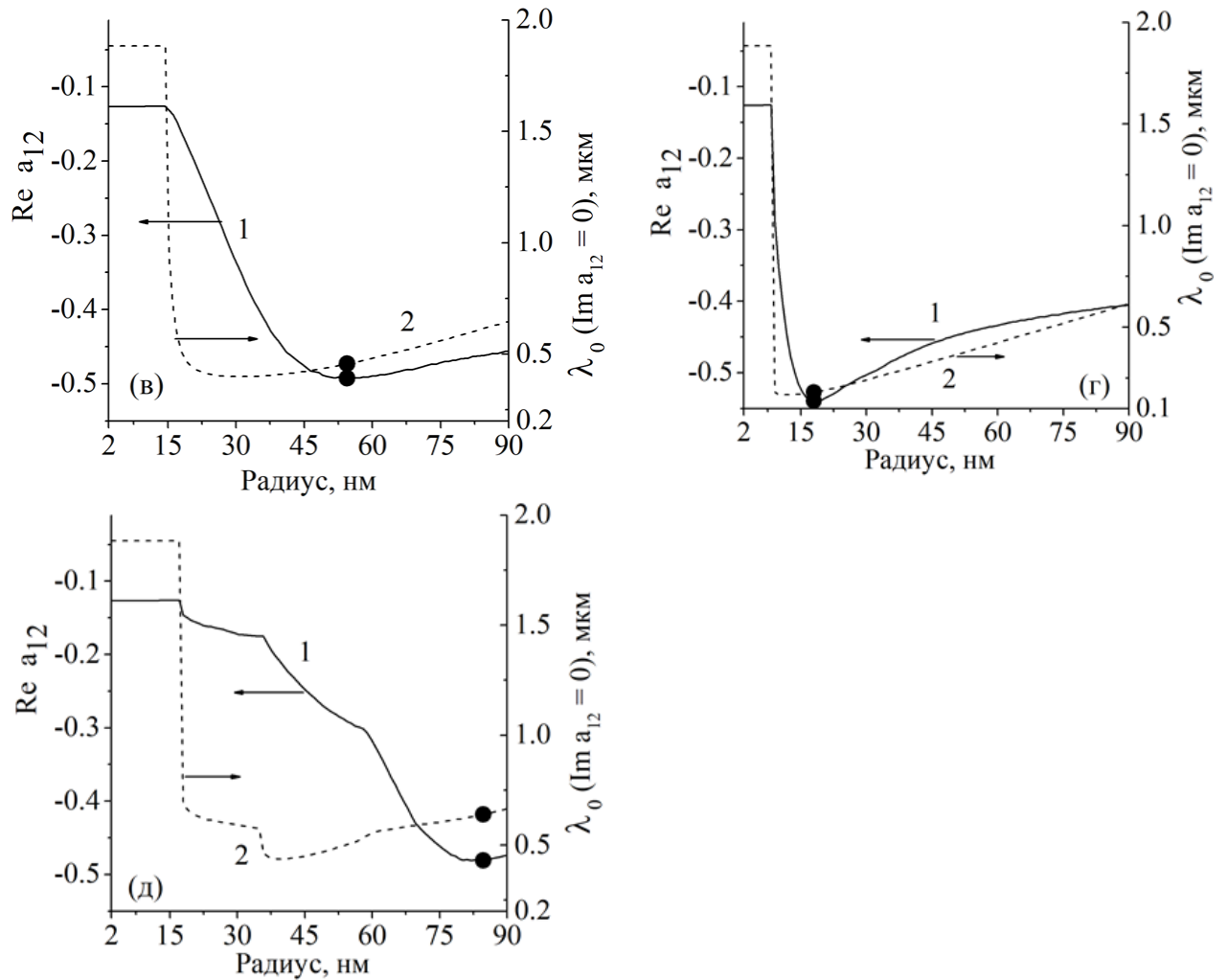


Рисунок 3.2.3 (а - д). – Действительная часть параметра волнового взаимодействия  $\text{Re } a_{12}$  двух соседних частиц (левая ось ординат, кривые 1) при условии нулевой мнимой части  $|\text{Im } a_{12}| < 10^{-3}$  и соответствующая частота  $\nu_0 (\text{Im } a_{12} = 0)$  (а) или длина волны  $\lambda_0 (\text{Im } a_{12} = 0)$  (правая ось ординат, кривые 2) как функция радиуса сферических частиц Au (а,б), Ag (в), Al (г) и Cu (д).

На рис.3.2.3, 3.2.4 приведены графики  $a_{12}''$  и  $\lambda_0$  как функции радиуса сферических частиц димеров Au, Ag, Al, Cu и Si, рассчитанные по формуле (3.1.1) при условии  $a_{12}'' = 0$ . Это условие соответствует частоте протекания в приближении взаимодействия ближайших соседей работы [114]. Кривые 2 на рис.3.2.3, 3.2.4 (см. правую ось ординат) показывают немонотонную зависимость длины волны ЭМ поля от радиуса частиц, для которой выполняется условие  $a_{12}'' = 0$ .

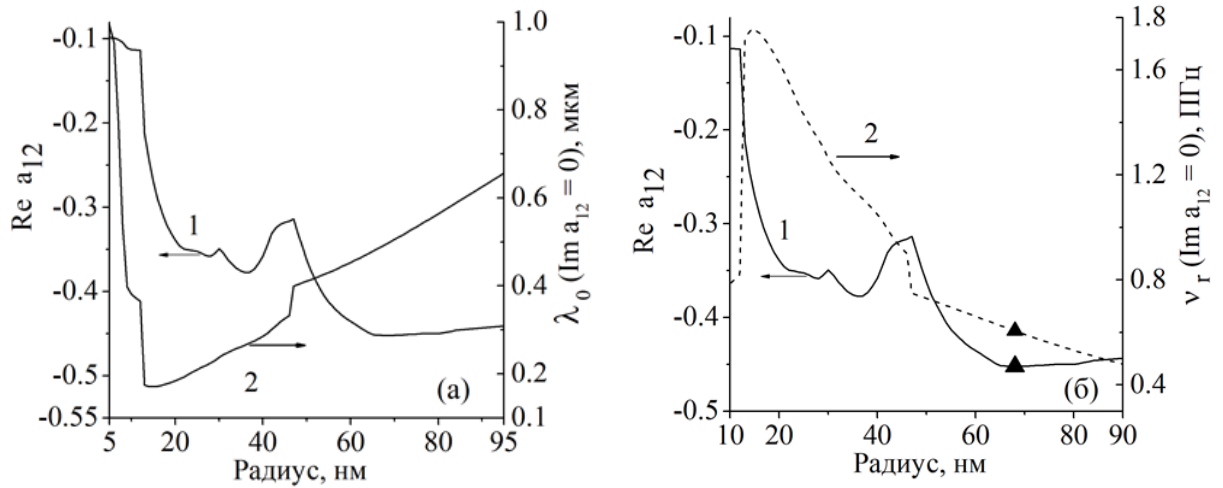


Рисунок 3.2.4 (а,б). – Данные для димера Si сферических частиц. См. подпись к рис.3.2.2.

Наиболее отрицательные величины  $a'_{12}$  и соответствующие им радиусы частиц и частоты обозначены на рис. 3.2.3, 3.2.4 черными кружками в случае металлов и треугольниками в случае кремния. Эти частоты приведены в таблице 3.2.1.

Таблица 3.2.1. – Радиусы сферических частиц ряда материалов, действительные части параметра  $Re a_{12}$ , частоты  $\nu_{res,12}$ , длины ЭМ волн  $\lambda_{res,12}$ , которым соответствуют символы (●) на рис.3.2.3 и (▲) на рис.3.2.4, а также плазменные частоты объемных металлов.

Материал	Радиус сферы, нм	$Re a_{12}$	$\nu_{res,12}$ , ТГц	$\lambda_{res,12}$ , мкм	$\nu_{pl}$ , ТГц
Au	76	- 0.509	496.5817	0.6037	206.8 [124] 217.5 [125-127]
Cu	84.67	- 0.48069	0.46864	0.6397	211.8 [128] 191.399 [125-127]
Ag	54.44	- 0.4923	0.657	0.4563	232.1 [124] 217.5 [125-127]
Al	18	- 0.5395	1.65997	0.1806	370.0 [124] 356.984 [125-127]
Si	68	- 0.452	606.444	0.4943	

Частоты и длины волн с нижним индексом «res,12» соответствуют наиболее близкие к резонансным условиям  $Im a_{12} = 0$  и  $Re a_{12} \rightarrow -0.5$ . Принимая во внимание данные одного источника [124] частотной дисперсии диэлектрической проницаемости Au, Ag и Al, можно заметить, что резонансный размер частиц уменьшается с ростом плазменной частоты металла.

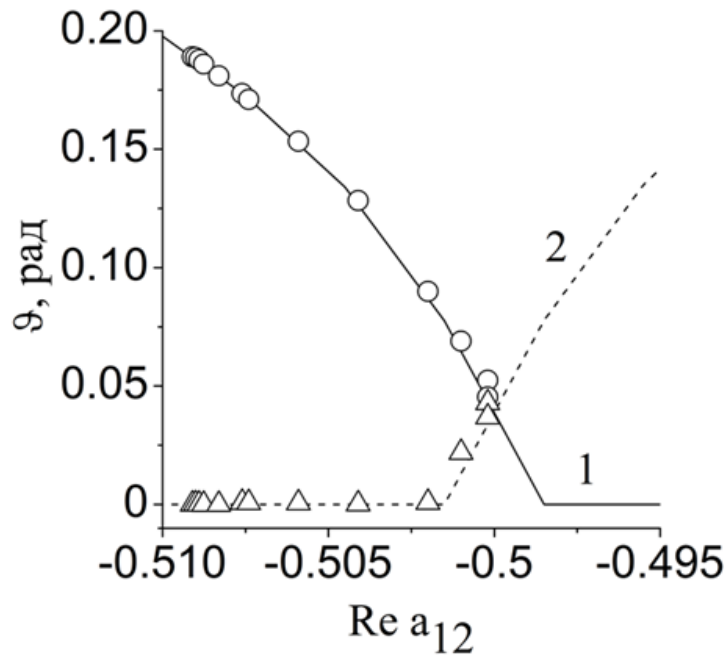


Рисунок 3.2.5. – Расчет зависимости действительной (сплошная кривая 1 и символ  $\circ$ ) и мнимой (пунктирная кривая 2 и символ  $\Delta$ ) частей параметра  $\vartheta$  от действительной части параметра волнового взаимодействия  $a'_{12}$  в случае точного резонансного условия  $a''_{12} = 0$  (кривые 1,2 рис.2.2.3) и при использовании частотной зависимости Au для расчета параметра  $a_{12}$  димера из двух плотно упакованных частиц Au. График приведен в [65].

На рис.3.2.5 величины  $Re a_{12}$ , рассчитанные для разных радиусов частиц Au, и соответствующие им величины действительной и мнимой частей параметра  $\vartheta$  нанесены на кривые рис. 2.2.3. Как видно из рис.3.2.5 величина  $Re a_{12} < -0.5$ ,  $\vartheta' \approx 0.07$ ,  $\vartheta'' \approx 10^{-6}$ , что соответствует формулам (2.2.20). ЭМ возбуждение распространяется вдоль цепочки частиц согласно формулам (2.2.15) и (2.2.16) при  $\vartheta' \rightarrow 0$  (см. рассуждения ниже формулы (2.2.16)).

Рис.3.2.6 иллюстрирует результаты расчета токов (3.1.3) для цепочки плотно упакованных сферических частиц Au радиусом 76 нм (см. Таблицу 3.2.1). Как

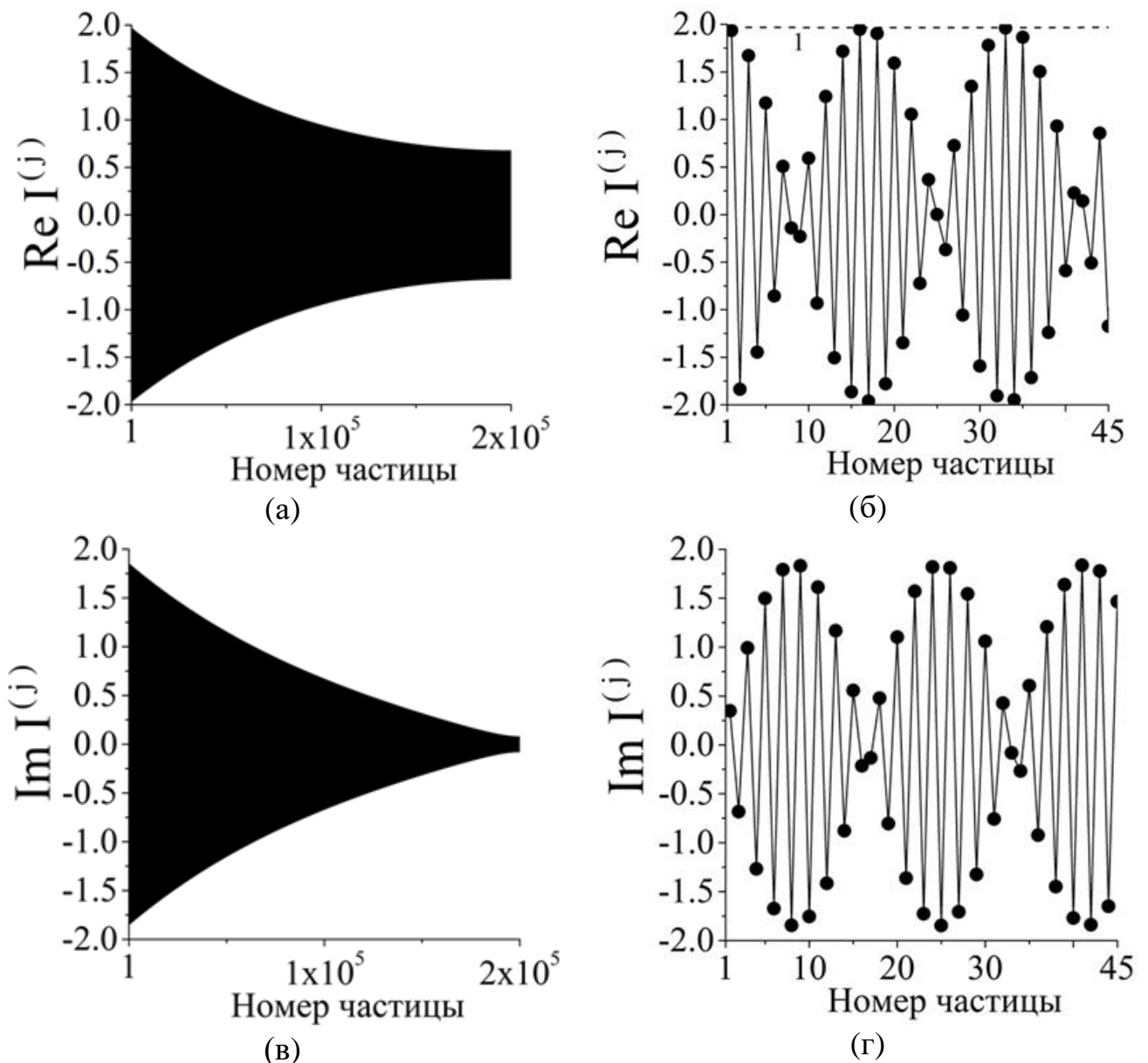


Рисунок 3.2.6. – Расчет (3.1.3) действительной (а), (б) и мнимой (в), (г) частей тока в линейной цепочке из  $2 \times 10^5$  плотно упакованных Au частиц радиусом 76 нм при возбуждении первой частицы излучением с частотой  $\nu_{res,12} = 496.5817$  ТГц ( $\lambda_{res,12} = 0.6037$  мкм) (см. Таблицу 3.2.1). Панели (б) и (г) представляют более детальное изображение действительной (б) и мнимой (г) частей токов в первых 45 частицах цепочки. Пунктирная кривая 1 на панели (б) – это огибающая токов.

видно из рисунка, при частоте  $\nu_{res,12} = 496.5817$  ТГц (оранжевый свет) происходит резонансно дальнейшее распространение ЭМ возбуждения по цепочке Au частиц. Аналогичные результаты наблюдаются для частиц из Ag, Al, Cu, но другого радиуса и при других частотах (см. Таблицу 3.2.1). Для сравнения на рис.3.2.7 приве-

дены токи в Au частицах той же цепочки, но при плазменной частоте ЭМ возбуждения.

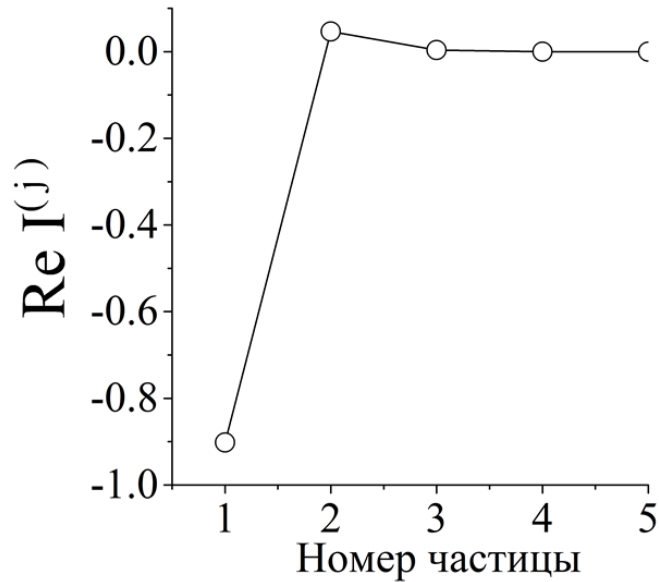
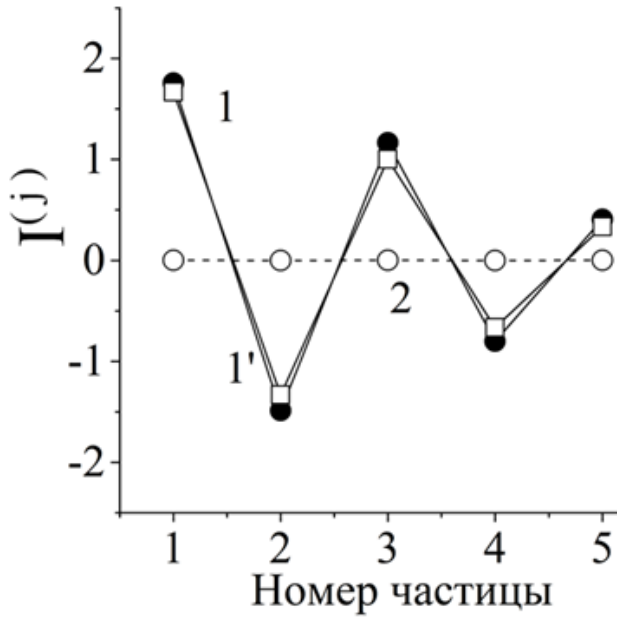


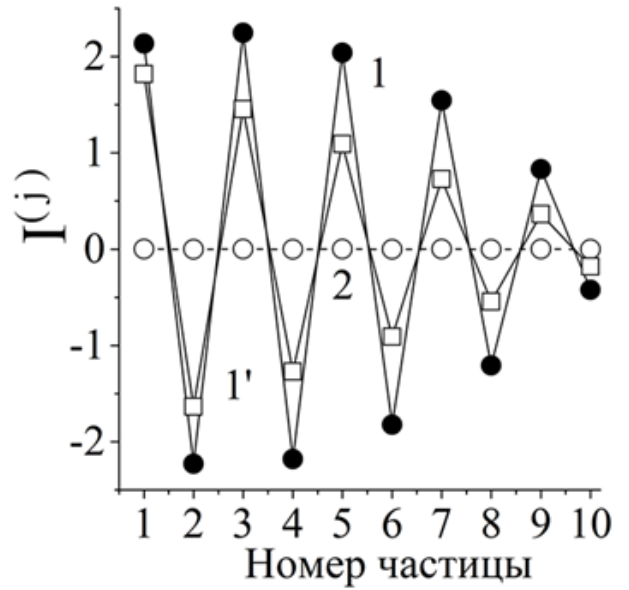
Рисунок 3.2.7. – Расчет (3.1.3) действительной части тока в линейной цепочке плотно упакованных Au частиц радиусом 76 нм при возбуждении первой частицы ЭМ излучением с частотой, равной плазменной частоте  $\nu_{res,12} = 206.8$  ТГц [124] объёмного золота (см. Таблицу 3.2.1).

Из рис.3.2.7 видно, что при возбуждении первой частицы ЭМ излучением с частотой, равной плазменной частоте  $\omega_{pl} = 12.9936 \times 10^{15}$  рад/сек объёмного золота, ток затухает на первых трех частицах  $Re I^{(3)} = 0.3 \%$ .

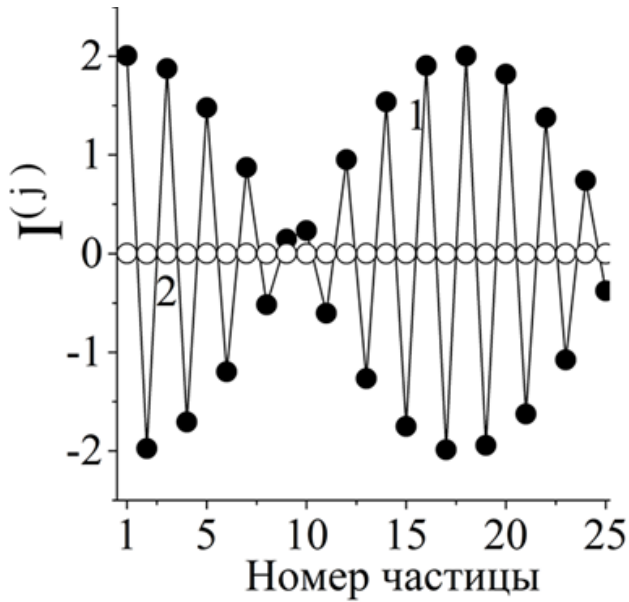
Рис.3.2.8 показывает, что амплитуда тока в некоторой частице цепочки зависит от числа частиц в цепочке. Для примера, на Рис.3.2.9 показана зависимость тока в



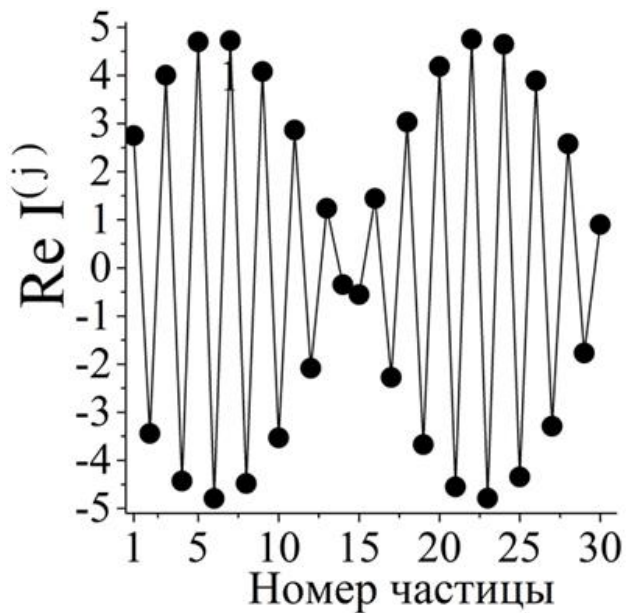
(a)



(б)



(в)



(г)

Рисунок 3.2.8. – Расчет (3.1.3) токов в линейной цепочке из 5 (а), 10 (б), 25 (в) и 30 (г) плотно упакованных Au частиц радиусом 76 нм (см. подпись рис. 3.2.6). Действительная (кривая 1, символ (●)) и мнимая (кривая 2, символ (○)) части тока рассчитаны по формуле (3.1.3). Кривая (1', символ (□)) - расчет по асимптотике (2.2.15).

1-й и 2-й частицах цепочек разной длины. Отметим, что, согласно формуле (2.2.2), коллективный коэффициент экстинкции равен нормированному току в первой

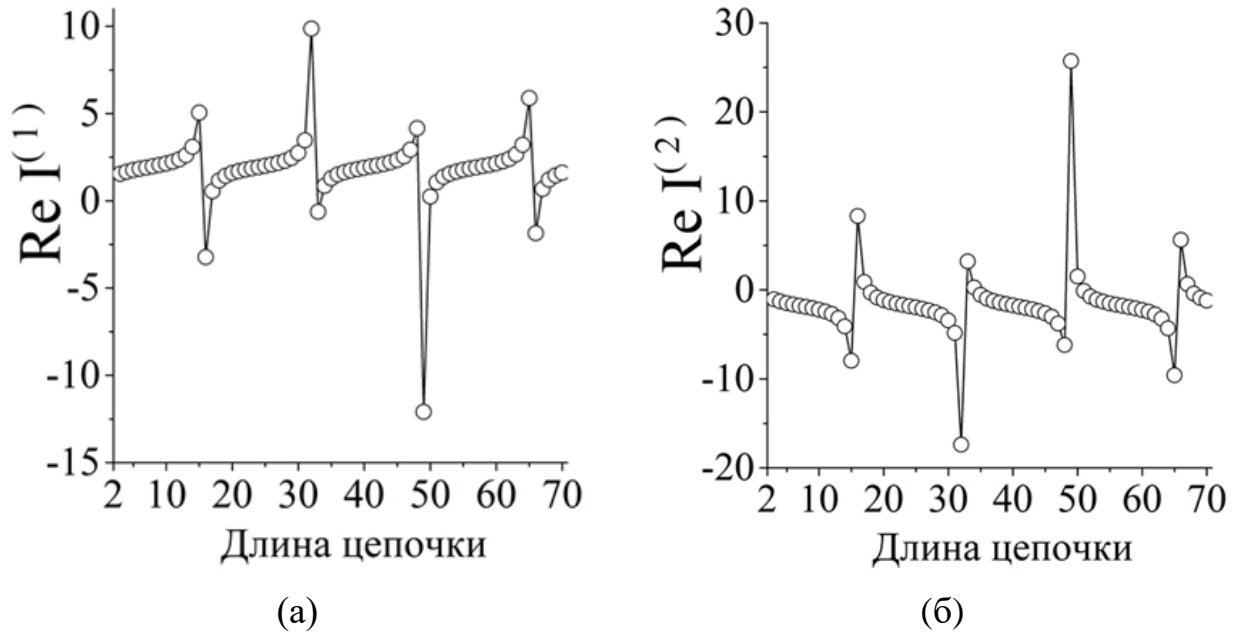


Рисунок 3.2.9. – Расчет (3.1.3) действительной части тока в первой (а) и второй (б) частицах линейной цепочки плотно упакованных Au частиц радиусом 76 нм (см. подпись рис. 3.2.6) в зависимости от полного числа частиц  $N$ .

частице цепочки. Зависимость величины тока в первой частице цепочки появляется не только из расчетов по формуле (3.1.3), но и из расчетов по формуле (2.2.2). На рис.3.2.10 и 3.2.11 представлены расчеты коллективного коэффициента экстинкции (2.2.2) и сечения экстинкции (2.1.9а) цепочек разной длины, вплоть до

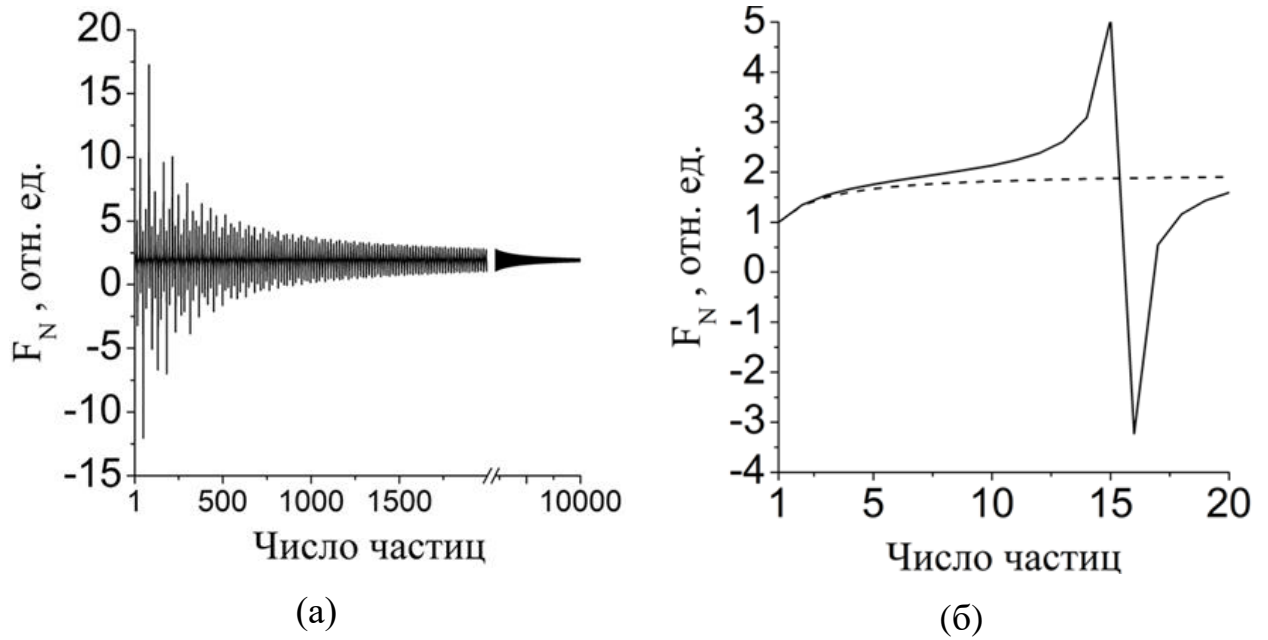


Рисунок 3.2.10. – (а) Расчет (2.2.2) коллективного коэффициента экстинкции линейной цепочки плотно упакованных Au частиц радиусом 76 нм (см. подпись рис. 3.2.6) в зависимости от длины цепочки; (б) детализация кривой на панели (а) для короткой цепочки. Пунктирная кривая - асимптотика (2.2.16).

$10^4$  частиц Au. Из рис.3.2.10(а) видно, что максимальное значение равно  $F_N = 17$  достигается в цепочке из 116 частиц. Т.к. коллективный коэффициент экстинкции – это и амплитуда нормированного тока в первой частице цепочки (2.2.2), то ток в первой частице достигает максимальной величины в цепочке из 116 частиц. Таким образом, рис.3.2.10 показывает, что ток в первой частице цепочки  $I^{(1)}$  зависит от числа частиц в цепочке  $N$ .



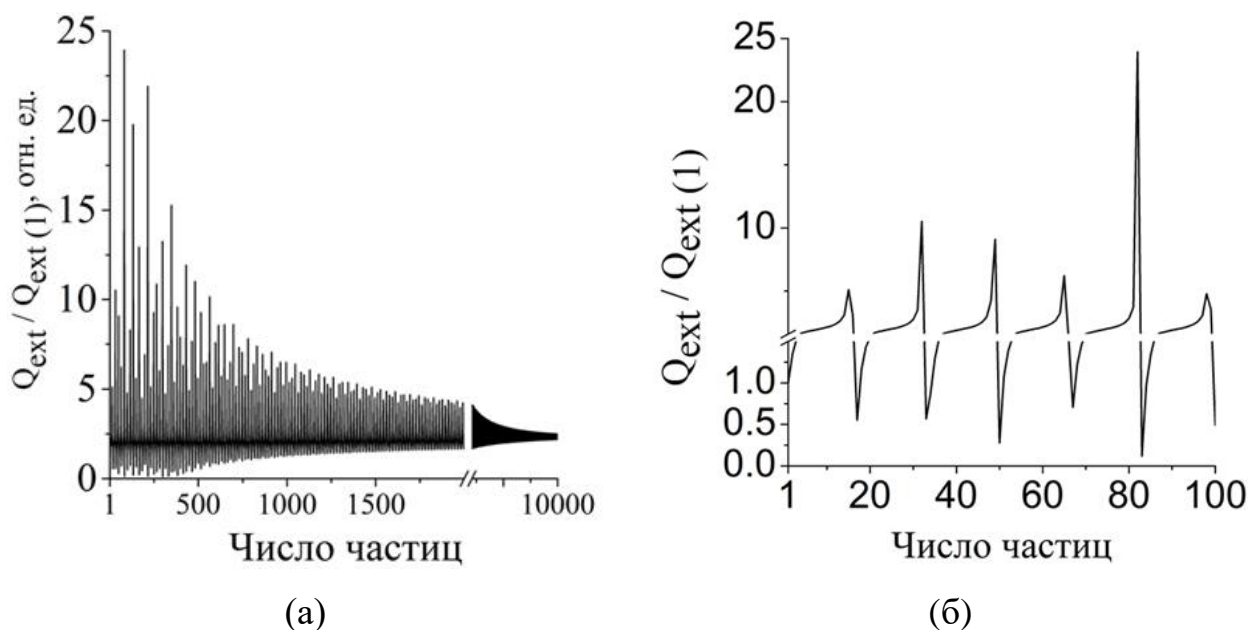


Рисунок 3.2.11. – (а) Расчет (2.1.9а) нормированного коллективного сечения экстинкции линейной цепочки плотно упакованных Au частиц радиусом 76 нм (см. подпись рис. 3.2.6) в зависимости от длины цепочки; (б) детализация кривой на панели (а) для короткой цепочки.

Рис. 3.2.11 показывает, что нормированное коллективное сечение экстинкции цепочки Au частиц изменяется от 0.5 до 24. Учитывая, что первая частица цепочки определяет сечение коллективной экстинкции через самосогласованные токи во всех частицах цепочки, можно заключить, что цепочки, состоящие из  $N = 82$  или 299 частиц, имеют сечение, как если бы они состояли только из только 24 (максимальное значение на рис. 3.2.11б) или 0.12 (минимальное значение на рис. 3.2.11б) частиц, соответственно. Заметим, что число 0.12 соответствует сечению экстинкции уединенной частицы  $Q_{ext,1} = 0.073 \text{ мкм}^2$  (геометрическое сечение сферы с радиусом 76 нм равно  $0.018 \text{ мкм}^2$ ).

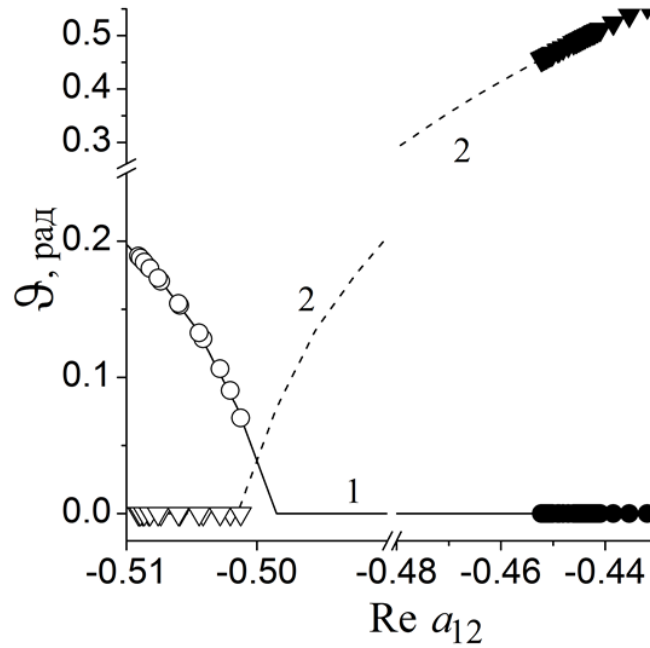


Рисунок 3.2.12. – Расчет зависимости действительной (сплошная кривая 1 и символы (○) для Au и (●) для Si) и мнимой (пунктирная кривая 2 и символы (∇) для Au и (▼) для Si) частей параметра  $\vartheta$  от действительной части параметра волнового взаимодействия  $a'_{12}$  в случае точного резонансного условия  $a''_{12} = 0$  (кривые 1,2 рис.2.2.4 и 3.2.5) и при использовании частотной зависимости Au (○, ∇) и Si (●, ▼) для расчета параметра  $a_{12}$  димера из двух плотно упакованных частиц Au или Si. График приведен в [A2]. Более детально содержание раскрыто на рис.3.2.15.

Рис. 3.2.12 повторяет рис.3.2.5 в части результатов для частиц Au, но с добавлением результатов расчетов для частиц Si. Символы (○, ∇) и (●, ▼) представляют зависимость действительной и мнимой частей переменной  $\vartheta$  от действительной части параметра волнового взаимодействия  $a'_{12}$  частиц Au и Si, соответственно. Как видно из рис. 3.2.4 с увеличением радиуса частиц Si действительная часть параметра  $a'_{12}$  стремится к -0.5 справа  $a'_{12} \rightarrow -0.5 + 0$ , оставаясь в диапазоне  $-0.5 < a'_{12} < 0$ . Наименьшая величина  $a'_{12} = -0.452$  соответствует радиусу частиц Si в 68 нм при частоте  $\nu_{res,12} = 606.444$  ТГц. Однако, типичные значения  $\vartheta' \approx 10^{-6}$  и  $\vartheta'' \geq 0.456$  показывают, что выполняется только одно условие дальнего распространения ЭМ возбуждения, а именно  $\vartheta' \rightarrow 0$  (2.2.21). Рис. 3.2.13(а)

показывает, что большая величина  $\vartheta'' \geq 0.456$  приводит к экспоненциальному затуханию токов в частицах по асимптотике (2.2.17).

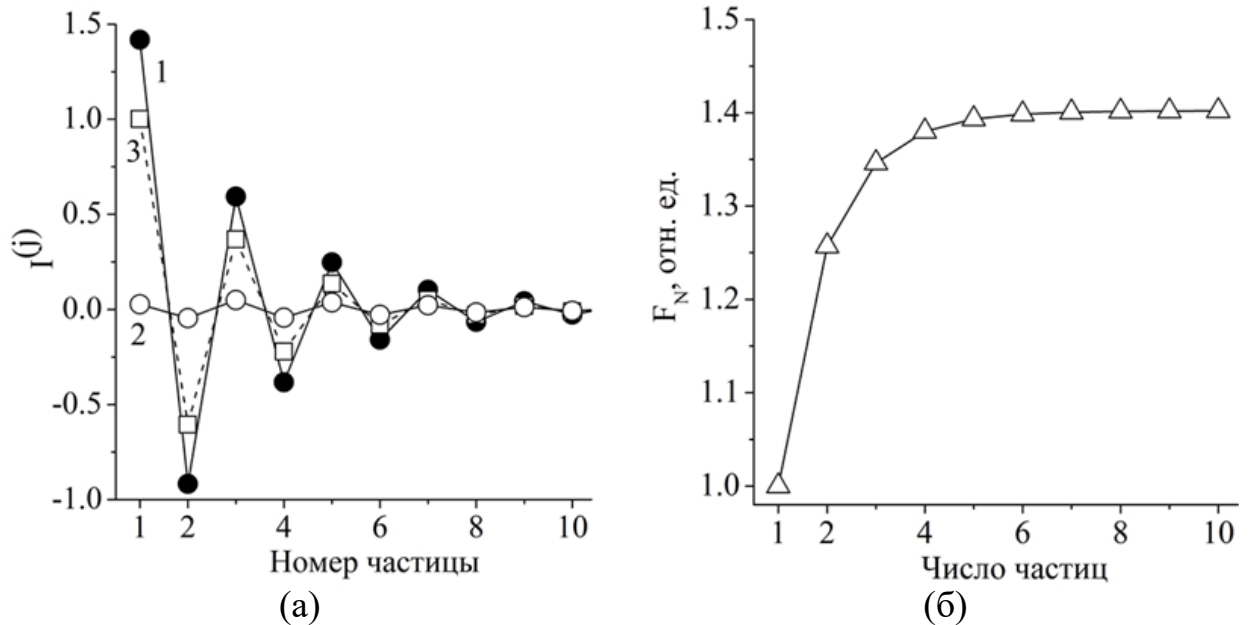


Рисунок 3.2.13. – (а) Расчет (3.1.3) действительной (кривая 1, символ (●)) и мнимая (кривая 2, символ (○)) части тока в линейной цепочке плотно упакованных Si частиц радиусом 68 нм при возбуждении первой частицы излучением с частотой  $\nu_{res,12} = 606.444$  ТГц [124] (см. Таблицу 3.2.1). Кривая 3 с символами (□) - расчет по асимптотике (2.2.17). (б) Расчет (2.2.2) действительной части коллективного коэффициента экстинкции для той же цепочки в зависимости от её длины.

Из рис. 3.2.13(б) видно, что ток в первой Si частице перестает зависеть от длины цепочки уже для цепочек из нескольких частиц, т.к.  $F_N = I^{(1)}$  (2.2.2).

Проанализируем отличие волноводных свойств цепочек сферических частиц Si и Au. Во-первых, уединенные Si и Au сферические частицы поддерживают резонанс Ми, что является условием для возникновения оптического волновода на связанных резонаторах [15]. Сравним рассчитанные резонансные частоты возбуждения цепочки частиц и спектральную зависимость сечения рассеяния одиночных сфер Au и Si, рассчитанных на основе теории Ми [68] в практической

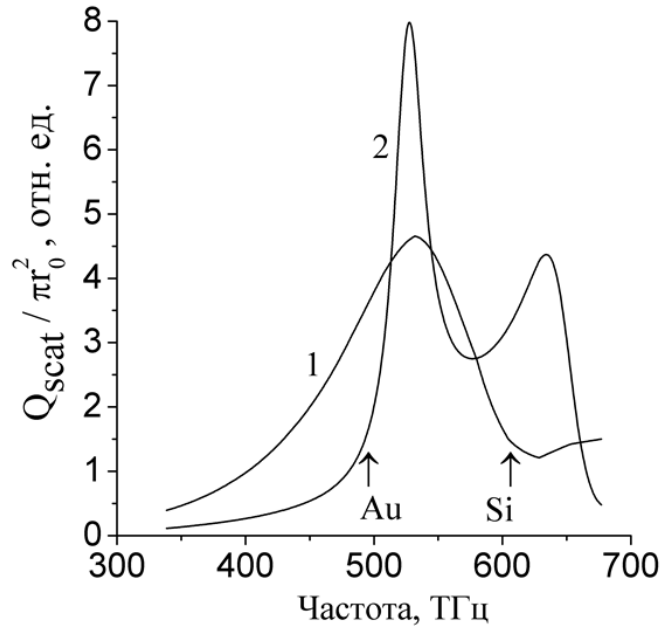


Рисунок 3.2.14. – Расчет [129] частотной зависимости нормированного (на геометрическое сечение) сечения рассеяния сферической частицы Au радиусом 76 нм (кривая 1) и частицы Si радиусом 68 нм (кривая 2). Стрелками обозначены резонансные частоты для частицы Au и Si.

реализации G. Vaffou (код MatLab) [129]. Как видно из рис.3.2.14 нормированное сечение рассеяния сферической частицы Au радиусом 76 нм (кривая 1) имеет широкий максимум на частоте около 530 ТГц, в пределах которого находится резонансная частота  $\nu_{res,12}(Au, r_0 = 76 \text{ нм}) = 496.6 \text{ ТГц}$ . Резонансная частота Si частицы  $\nu_{res,12}(Si, r_0 = 68 \text{ нм}) = 606.4 \text{ ТГц}$  тоже находится в полосе электрического дипольного резонанса (правый из двух пиков на кривой 2 рис.3.2.14). Резонансная частота, как описано выше, соответствует наиболее близкому к величине  $-0.5$  численному значению действительной части параметра волнового взаимодействия соседних частиц  $a'_{12} = -0.452$ . Этой величине  $a'_{12}$  соответствуют численные значения  $\vartheta' \approx 10^{-6}$  и  $\vartheta'' = 0.456$  (рис.3.2.15а). Заметим, что если сдвинуть частоту от резонансного значения, то спад токов в частицах Si цепочки будет еще более сильным. Например, частоте 530 ТГц (рис.3.2.14, кривая 2), равной частоте

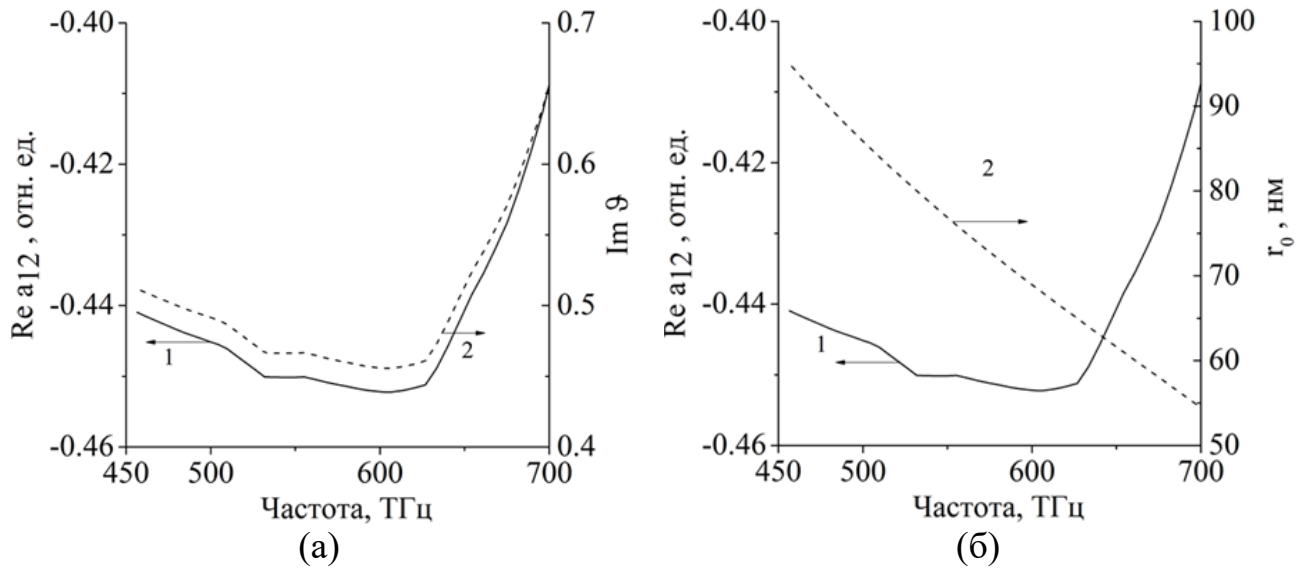


Рисунок 3.2.15. – Детальное представление результатов, приведённых на рис. 3.2.12. Расчет (3.1.3) частотной зависимости действительной части параметра волнового взаимодействия пары частиц (кривая 1, панели (а) и (б)), мнимой части вспомогательного параметра  $\vartheta'$  (пунктирная кривая 2, панель (а)), радиуса сферических частиц Si (пунктирная кривая 2, панель (б)).

магнитного дипольного резонанса частицы Si, соответствует радиус частицы 80 нм (рис.3.2.15б), более дальняя от  $-0.5$  величина  $a'_{12} = -0.450$ , того же порядка как и ранее величина  $\vartheta' \approx 10^{-6}$  и большая величина  $\vartheta'' = 0.467$ , которая и даст более быстрый спад амплитуды токов в частицах согласно асимптотике (2.2.17).

Во-вторых, с точки зрения эффективности дискретных волноводов обычно считается, что потери энергии моды в Si в несколько раз меньше, чем в металле [130]. Рисунок 3.2.16 показывает, что на резонансной частоте мнимая часть диэлектрической проницаемости мала как у Si ( $\epsilon'' = 0.64$ ), так и у Au ( $\epsilon'' = 0.93$ ). Это обстоятельство является первым условием дальнего распространения ЭМ возбуждения, установленного численным методом в [16,131]. Второе условие [132] состоит в отрицательности величины действительной части диэлектрической проницаемости материала частиц. Из рис.3.2.15 видно, что это условие выполняется только для Au.

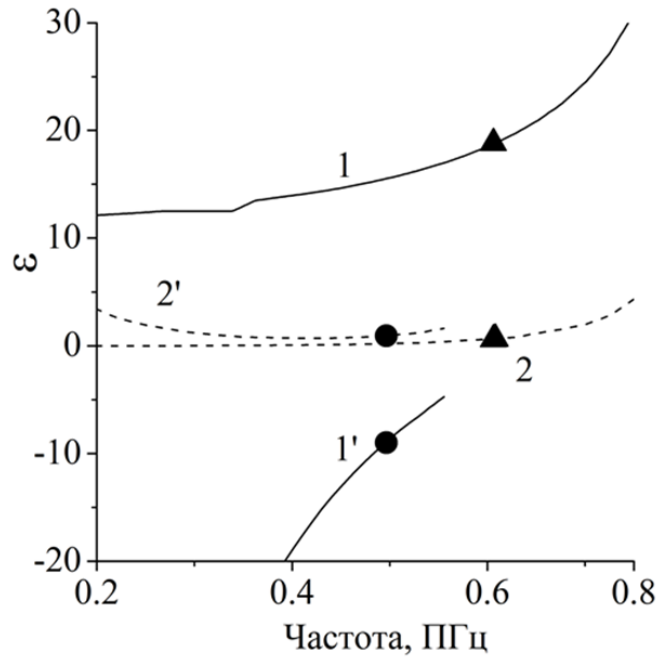


Рисунок 3.2.16. – Более детальное изображение частотной зависимости рис. ПЗ.3 диэлектрической проницаемости Au (кривые 1' и 2') и Si рис. ПЗ.7 (кривые 1, 2) в области резонансных частот для Au и Si частиц.

Отрицательная действительная часть диэлектрической проницаемости Au и воздушное окружение цепочки Au частиц обуславливают передачу ЭМ энергии вдоль цепочки периодически расположенных частиц посредством распространяющихся поверхностных плазмонных мод [133]. При этом электрическое поле распределено практически вне частиц цепочки в случае поляризации, перпендикулярной к оси цепочки, как это показано численно для цепочек наночастиц Ag [14] и Au [63,64,134]. Напротив, электрическое поле локализовано внутри частиц цепочек Si [130], что и обуславливает увеличение потерь энергии моды.

До сих пор распространение возбуждения по линейной цепочке частиц рассматривалось в приближении взаимодействия ближайших соседей. Формулы (2.3.5) и (2.3.6) раздела 2.3 позволяют оценить вклад дальних взаимодействий частиц цепочки. На рис.3.2.17 представлены результаты расчетов по формулам (3.1.3) и (2.3.5) действительной части нормированных токов в частицах плотноупакованной цепочки Au сфер радиусом 76 нм при возбуждении крайней частицы поляризованным ЭМ излучением с резонансной частотой 496.5817 ТГц. На

рис.3.2.17(а) и 3.2.17(б) приведены токи в начале и конце цепочки из  $2 \times 10^5$  частиц. Токи, рассчитанные в приближении ближайших соседей, изображены на

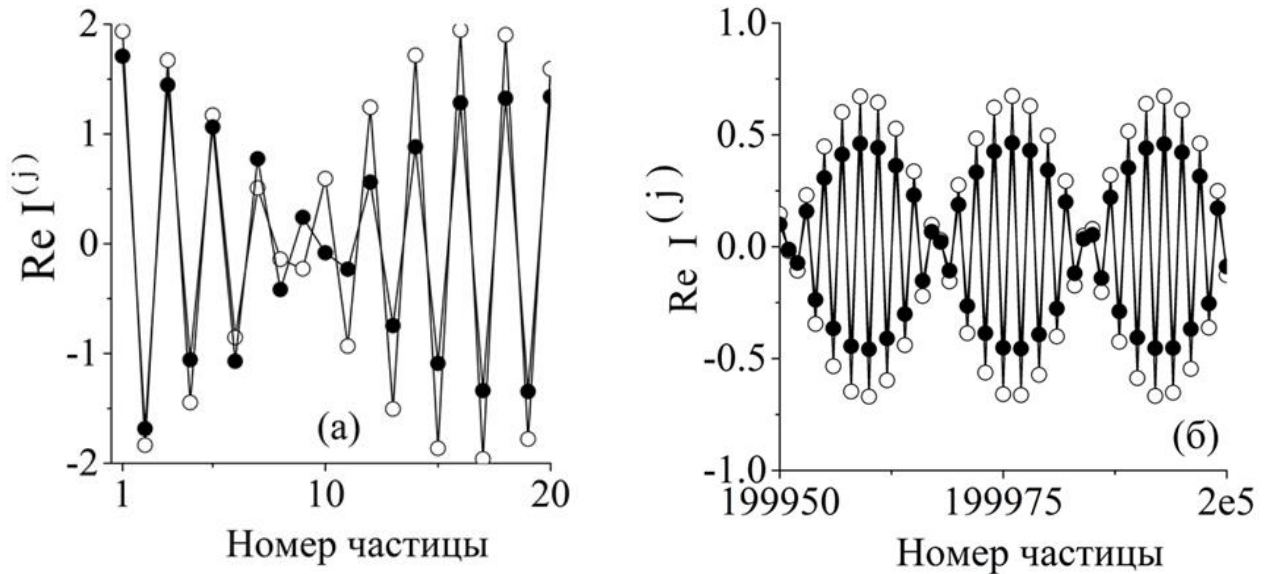


Рисунок 3.2.17. – Расчет по формулам (3.1.3) и (2.3.5) действительной части нормированных токов в частицах плотноупакованной цепочки Au сфер радиусом 76 нм при возбуждении крайней частицы поляризованным ЭМ излучением с резонансной частотой 496.5817 ТГц (см. рис. 3.2.6(а)): взаимодействие ближайших соседей  $I^{(n)(j)}$  (○) и с учетом дальних частиц  $I^{(n)(j)} + I^{(f)(j)}$  (●).

рис.3.2.6 (а). Как видно из этих графиков взаимодействие дальних частиц обуславливает уменьшение амплитуды токов по сравнению с учетом только взаимодействия ближайших соседей.

Отношение токов, возбуждаемых в частицах цепочки с учетом дальних и ближних соседей, рассчитанное по формуле (2.3.6), представлено на рис. 3.2.18 и 3.2.19. На рис.3.2.19 приведено детальное изображение распределения отношения токов в начале и конце цепочки. Отрицательная величина отношения токов  $I^{(f)(j)} / I^{(n)(j)}$  (рис.3.2.18) показывает противоположный по знаку вклад в токи ближних и дальних полей. Вклад дальних полей практически не зависит от номера частицы в цепочке за исключением осциллирующего характера вклада на краях цепочки (рис. 3.2.19).

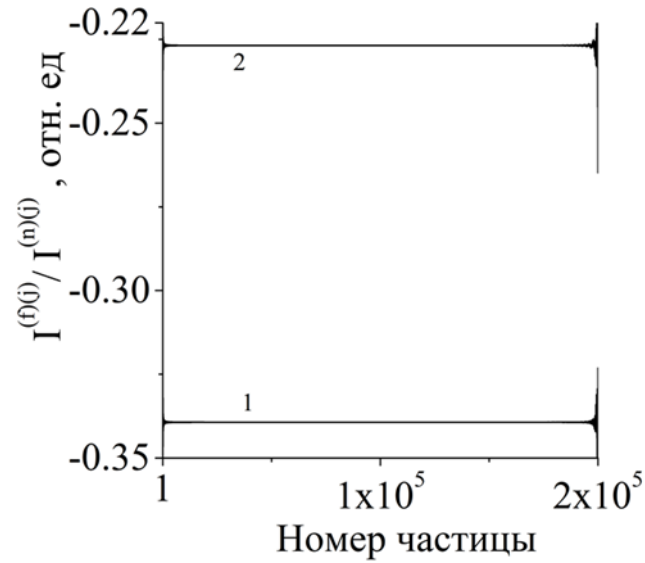


Рисунок 3.2.18. – Расчет по формуле (2.3.6) отношения действительной (кривая 1) и мнимой (кривая 2) частей токов, обусловленных волновым взаимодействием дальних  $I^{(f)(j)}$  и ближних  $I^{(n)(j)}$  соседей, в частицах плотноупакованной цепочки Au сфер радиусом 76 нм при возбуждении крайней частицы поляризованным ЭМ излучением с резонансной частотой 496.5817 ТГц.

Приведённые результаты расчетов показывают, что перенос энергии вдоль цепочки частиц в основном определяется взаимодействием ближайших соседей и лишь незначительно количественно модифицируется взаимодействиями за

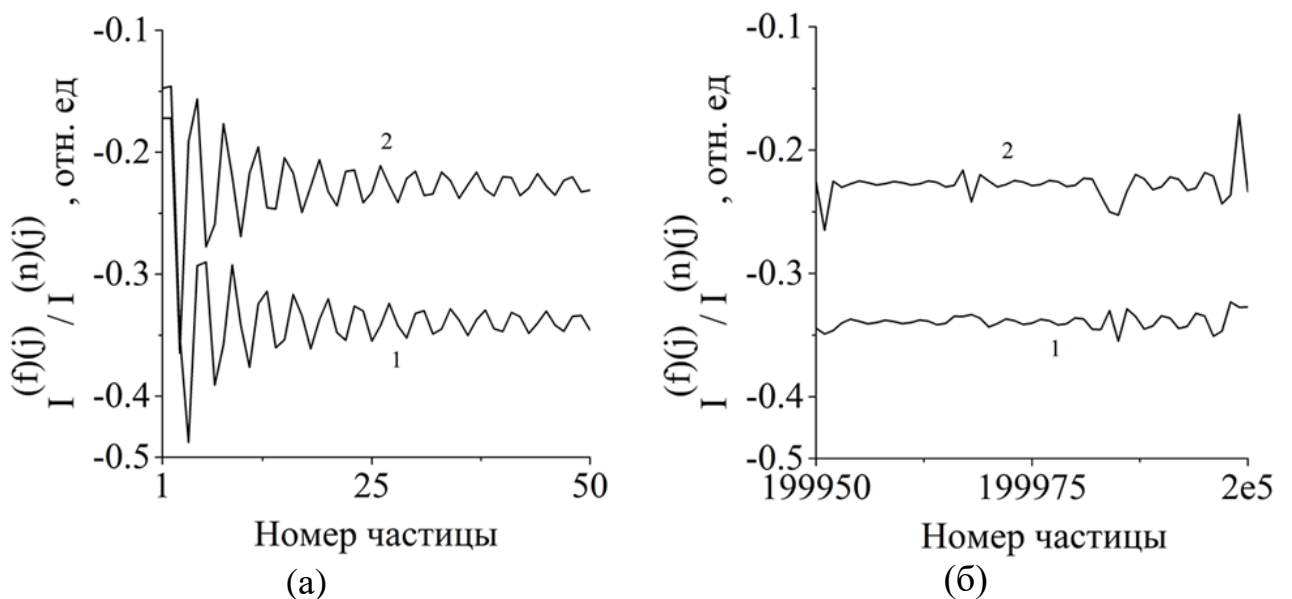


Рисунок 3.2.19. – Детальное изображение начальной и конечной областей цепочки рис.3.2.18.



пределами ближайших соседей. Аналогичный результат был получен в работах [18,135]. В [135] на примере цепочки димеров теоретически показано, что взаимодействие между ближайшими соседями ухватывает физику проблемы возбуждения излучающих и темных плазмонных мод в линейной цепочке частиц. Учёт взаимодействий за пределами ближайших соседей лишь незначительно количественно модифицирует дисперсионный закон для плазмонов (рис. 8 в [135]). Эта же проблема обсуждается численно и экспериментально в [18].

### 3.3 Приближенный способ расчета параметра волнового взаимодействия соседних частиц цепочки

В данном разделе рассмотрен приближенный способ расчета параметра волнового взаимодействия частиц цепочки (2.2.1б) в резонансном режиме  $a''_{12} = 0$ . Комплексный параметр волнового взаимодействия ближайших частиц задается соотношением

$$a_{12} = a'_{12} + ia''_{12} = \tilde{t} G_0^{tr}(x), \quad (3.3.1)$$

Здесь  $G_0^{tr}$  – поперечная к оси двух частиц составляющая скалярной функции Грина свободного пространства

$$G_0^{tr}(x) = (1 + ix^{-1} - x^{-2}) \exp(ix) / (-4\pi x) \quad (3.3.2)$$

где  $x \equiv k_0 r_{12}$ ,  $r_{12}$  – расстояние между центрами двух частиц.

Выделим действительную  $a'_{12} = \tilde{t}' G_0^{tr} - \tilde{t}'' G_0^{tr}$  и мнимую  $a''_{12} = \tilde{t}' G_0^{tr} + \tilde{t}'' G_0^{tr}$  части параметра волнового взаимодействия частиц. В резонансном режиме  $a''_{12} = 0$  и, следовательно,  $\tilde{t}' = -\tilde{t}'' G_0^{tr} / G_0^{tr}$ . Подставляя последнее равенство в выражение для  $a'_{12}$  и используя оптическую теорему  $\tilde{t}'' = -(k_0 / 6\pi) |\tilde{t}'|^2$  [68], получим  $a'_{12} = (6\pi / k_0) G_0^{tr}$ . Подстановка (3.3.2) в полученное соотношение приводит к формуле

$$-(2/3)a'_{12} = x^{-2} \cos(x) + (1 - x^{-2})x^{-1} \sin(x) \quad (3.3.3)$$

Асимптотику  $a'_{12}(x)$  при малых величинах аргумента получим разложением тригонометрических функций в правой части (2.2.17) в ряд

$$a'_{12}(x) = -1 + \frac{1}{4}x^2 - \frac{3}{2} \sum_{n=2}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2(n-1)}}{(2n)!} \left[ \frac{2n}{2n+1} + \frac{x^2}{2n+1} \right] \quad (3.3.4)$$

Например, учет только первого члена ряда в (3.3.4) дает

$$a'_{12}(x)|_{n=2} = -1 + \frac{1}{5}x^2 - \frac{1}{80}x^4 \quad (3.3.5)$$

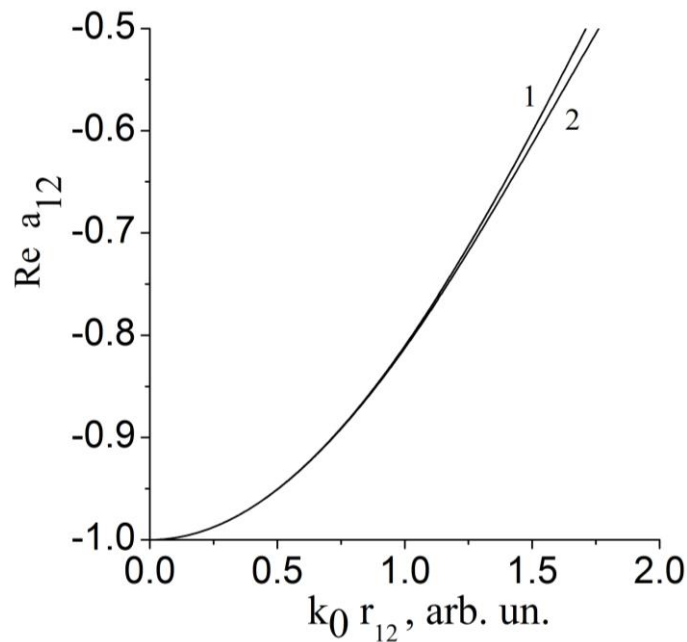


Рис. 3.3.1. – Расчет зависимости действительной части параметра волнового взаимодействия двух сферических частиц от величины  $k_0 r_{12}$ : кривая 1 – точная формула (3.3.3), 2 – формула (3.3.4).

На рис. 3.3.1 приведено сопоставление расчетов по формулам (3.3.3) и (3.3.4). В расчетах удерживался первый (см. формулу (3.3.5)) и 10 первых членов ряда в правой части (3.3.4). Результаты приближенных расчетов приведены только для одной кривой 2, т.к. отличаются на 0.2% и на графике совпадают. Расчеты по точной (3.3.3) и приближенной (3.3.4) формулам отличаются не более чем на 0.4% для малых величин  $k_0 r_{12} \leq 1$ .

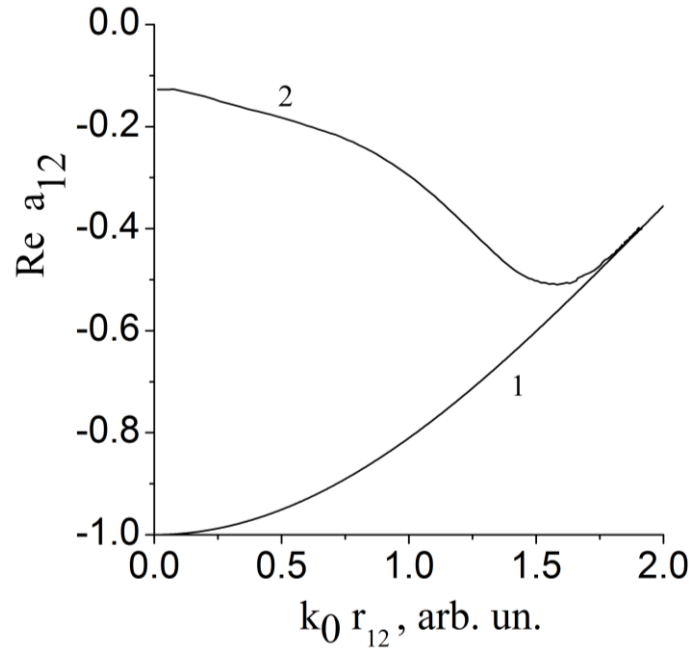


Рис. 3.3.2. – Расчет зависимости действительной части параметра волнового взаимодействия двух сферических частиц Au от величины  $k_0 r_{12}$  при условии  $a''_{12} = 0$ : (а) кривая 1 – формула (3.3.5), 2 – формула (3.3.1).

Сопоставим расчеты  $a'_{12}$  по точной формуле (3.3.1) и приближенной формуле (3.3.5) на примере димера с  $r_{12} = 2r_0$ , образованного двумя касающимися Au частицами. Расчет по формуле (3.3.1) проводился с учетом частотной дисперсии диэлектрической проницаемости Au [119 и Приложение 3]. Результаты расчетов

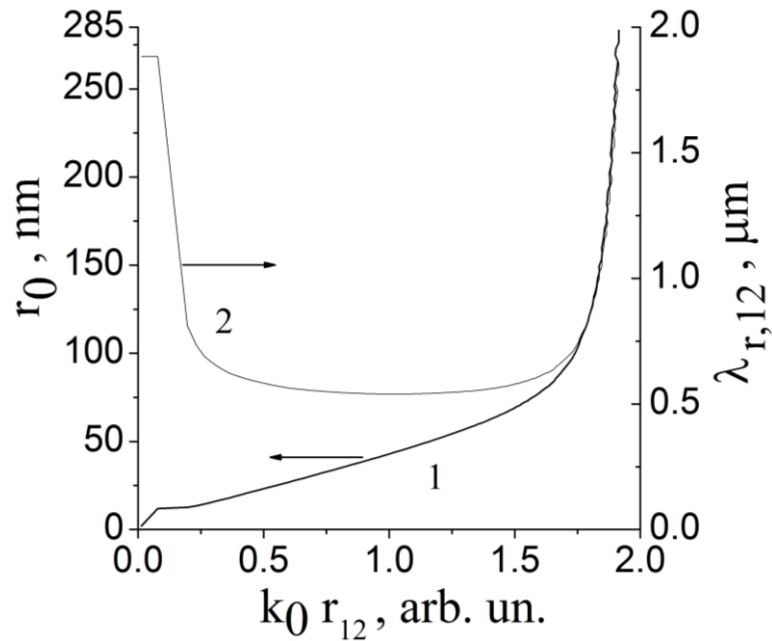


Рис. 3.3.3 – Расчет (3.3.1) величины радиуса Au частицы (левая ось ординат, кривая 1) и длины ЭМ волны  $\lambda_{r,12}$  (правая ось ординат, кривая 2), произведение которых дает значение  $k_0 r_{12}$ .

представлены на рис.3.3.2, на котором кривая 1 совпадает с кривой 2 на рис.3.3.1. На рис.3.3.2 видно, что в области значений  $k_0 r_{12} > 1.73$  кривые 1 и 2 совпадают. Однако величина  $k_0 r_{12}$  не определяет соответствие радиуса частицы  $r_0$  и длины ЭМ волны  $\lambda_{r,12}$ , резонансной для этого радиуса. Последнее означает, что для выделенного радиуса частицы на длине волны  $\lambda_{r,12}$  выполняются два условия  $a''_{12} \rightarrow 0$  и  $a'_{12} \rightarrow -0.5$ . Соответствие  $r_0$  и  $\lambda_{r,12}$  приведено на рис.3.3.3. Согласно рис.3.3.3, значению параметра  $k_0 r_{12} \approx 1.73$  соответствует длина волны  $\lambda_{r,12} = 0.75$  мкм. Частотная дисперсия диэлектрической проницаемости золота (рис.3.3.4) объясняет совпадение кривых 1 и 2 в правой части рис.3.3.2. Напомним, что кривая 1 рис.3.3.2 рассчитана по формуле (3.3.4), выведенной с помощью оптической теоремы, т.е. без учета поглощения энергии волны в частицах. В то же время, длине волны 0.75 мкм соответствует минимум на спектральной зависимости мнимой части диэлектрической проницаемости золота, который по величине ме-

нее единицы. Малое поглощение на этой длине волны и обуславливает совпадение кривых 1 и 2 на рис.3.3.2.

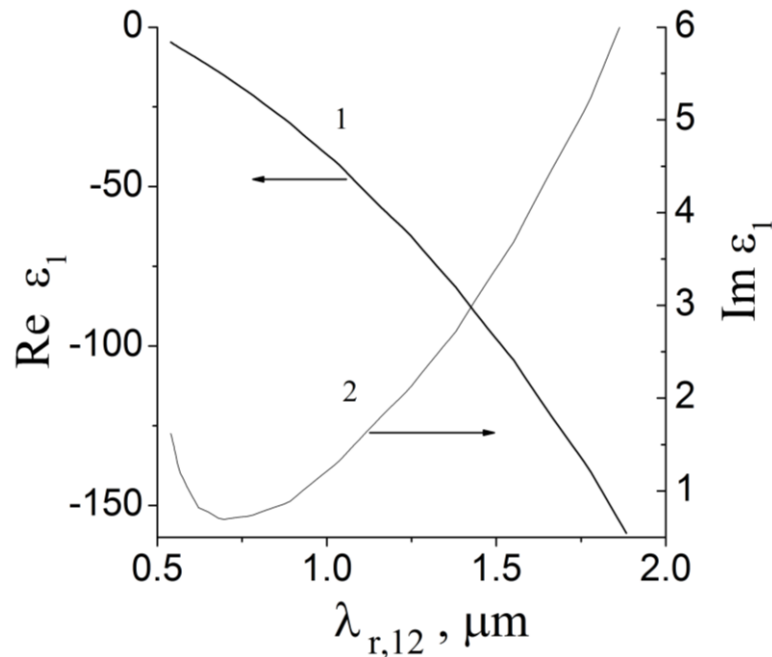


Рис. 3.3.4. – Зависимость действительной (кривая 1, левая ось ординат) и мнимой частей (кривая 2, правая ось ординат) диэлектрической проницаемости золота [119 и Приложение 3] от длины ЭМ волны, для которой выполняется условие  $a''_{12} \rightarrow 0$ .

Частотная зависимость параметра волнового взаимодействия частиц рассчитана по формуле (3.3.1) для ряда радиусов сферических частиц Au. Далее из дисперсионного уравнения (2.2.1б) найдена вспомогательная переменная  $\mathcal{S}$ . Действительная и особенно мнимая части этой переменной позволяют определить длины волн  $\lambda_{r,12}$ , которые возбуждают слабо затухающие токи и для которых приблизительно выполняются резонансные условия  $a'_{12} = -0.5 \pm 0.5\%$  и  $a''_{12} \leq 10^{-3}$ . Сплошная кривая 1 на рис.3.3.5 изображает эти значения  $\lambda_{r,12}$ . Две вертикальные стрелки показывают границы сплошной кривой 1. Вне этих границ условия  $a'_{12} = -0.5 \pm 0.5\%$  и  $a''_{12} \leq 10^{-3}$  одновременно не выполняются. Символ (●) на рис.3.3.5 указывает на длину волны  $\lambda_{r,12} \cong 0.603$  мкм, распространяющуюся вдоль цепочки из  $2 \times 10^5$  частиц Au радиусом 76 нм (длина цепочки 3 см) [65]. Пунктир-

ная кривая 2 на рис.3.3.5 представляет результаты расчета  $a'_{12} = -0.5 \pm 0.5\%$  при точном равенстве  $a''_{12} = 0$  по формуле (3.3.4) с использованием тех же значений радиусов частиц и длин волн. Как видно из совпадения кривых на рис.3.3.5 приближенная формула (3.3.4) хорошо описывает точные результаты.

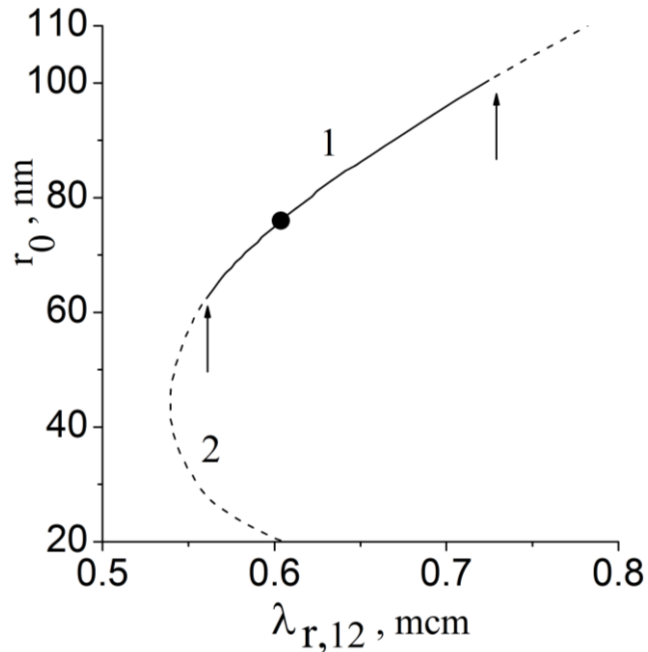


Рис. 3.3.5. – Соответствие  $\lambda_{r,12}$  и  $r_0$  для частиц Au, согласно данным рис.3.3.1 при приближенном выполнении резонансных условий  $a'_{12} = -0.5 \pm 0.5\%$  и  $a''_{12} \leq 10^{-3}$  (кривая 1). Расчет  $a'_{12} = -0.5 \pm 0.5\%$  при  $a''_{12} = 0$  по формуле (3.3.4) с использованием тех же значений радиусов частиц и длин волн (пунктирная кривая 2). (●) – длина волны  $\lambda_{r,12} \cong 0.603$  мкм, распространяющаяся вдоль цепочки из  $2 \times 10^5$  частиц Au радиусом 76 нм (длина цепочки 3 см) [65].

Однако, стоит отметить, что по формуле (3.3.4) невозможно оценить точность соблюдения резонансных условий, во многом задаваемых частотной дисперсией материала частиц. Аналогичные результаты наблюдаются в расчетах для Al, Ag и Cu.

### 3.4 Результаты расчетов токов при возбуждении крайних частиц с двух концов линейной цепочки Si частиц

В данном разделе представлены численные результаты расчетов токов, проведенные согласно уравнению (2.4.1) для периодической цепочки  $N$  кремниевых наночастиц для резонансной частоты  $\omega_{r,12}(Si, 68 \text{ nm})$ . Напомним методику поиска резонансной частоты, представленную в разделе 3.2 (таблица 3.2.1). Численные расчеты показывают, что первое условие  $a''_{12} = 0$  выполняется при нескольких частотах. Среди этих частот, выбирается только так частота, при которой соответствующее значение  $a'_{12}$  лежит ближе всего к значению  $-0.5$ . Например, это значение равнялось  $a'_{12} \approx -0.45$  при радиусе частиц  $r_0(Si) = 68 \text{ nm}$ . Эта резонансная частота обозначается как  $\omega_{r,12}(Si, r_0 = 68 \text{ nm}) = 3.8104 \times 10^{15} \text{ рад/с}$  ( $\nu_{r,12}(Si) = 606.4 \text{ ТГц}$ , длина волны в вакууме  $\lambda_{r,12}(Si) = 494.3 \text{ нм}$ ,  $\varepsilon(Si) = 18.74 + i 0.64$ ). Стоит отметить, что в случае золотых частиц значение коэффициента  $a'_{12}$  значительно ближе к  $-0.5$  с резонансной частотой равной  $\omega_{r,12}(Au, r_0 = 76 \text{ nm}) = 3.120101 \times 10^{15} \text{ рад/с}$  ( $\nu_{r,12}(Au) = 496.5817 \text{ ТГц}$ ) (см. таблицу 3.2.1).

Рассмотрим результаты численных вычислений нормированных токов согласно уравнению (2.4.1) в периодической цепочке, состоящей из  $N$  кремниевых частиц, возбуждаемых с частотой  $\omega_{r,12}(Si, 68 \text{ nm})$ . Для полноты картины, начнем с результатов для золотой цепочки частиц [A1, A3].

На рисунке 3.4.1 [A3] представлены полосы пропускания в спектре цепочек из близко расположенных сферических частиц, длина которых ограничена числом  $N_f = 100$  и  $2 \times 10^5$  частиц (рисунки 1(a) и 1(b) соответственно). Полосы пропускания были рассчитаны на основе уравнения (2.2.1a) на ранее указанной частоте  $\omega_{r,12}(Au, r_0 = 76 \text{ nm})$ .



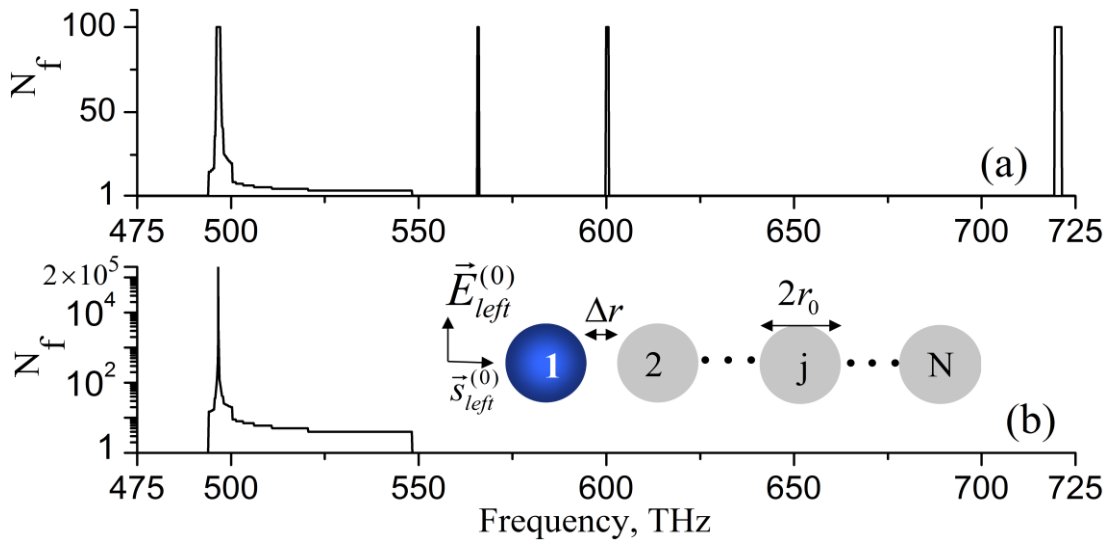


Рисунок 3.4.1. – Вычисленная согласно (3.1.3) частотная зависимость длины  $N_f$  прозрачных цепочек из золотых частиц, с радиусом частиц равным 76 нм. Кривые означают, что электромагнитное возбуждение первой частицы распространяется через все первые  $N_f$  частиц цепочки в заданной полосе частот. При этом максимальная амплитуда тока в последней частице подчиняется неравенству  $I_{\max}^{(j)} / I_{\max}^{(1)} \approx 0.1 \pm 0.01$ . Вставка: схематическое изображение возбуждения электромагнитным пучком левой частицы линейной цепочки.

Как видно из рисунка 3.4.1, в отличие от большого числа отдельно стоящих полос пропускания в спектре относительно коротких цепочек частиц (рисунок 3.4.1(a)), длинная цепочка обладает только одной узкой полосой пропускания со спектральной шириной 200 МГц вокруг резонансной линейной частоты  $\nu_{r,12}$  (рисунок 1(b)) [A3]. Полоса пропускания цепочки из  $N_f = 100$  частиц значительно шире и составляет 0.955 ТГц (рисунок 1(b)). В то же время, в отличие от цепочек плотноупакованных золотых частиц, дальний перенос электромагнитной энергии вдоль длинных цепочек плотноупакованных кремниевых частиц не наблюдается (рисунок 3.4.2). Это различие объясняется изменениями в резонансном условии для параметра связи частиц, рассмотренного нами ранее (раздел 3.2).

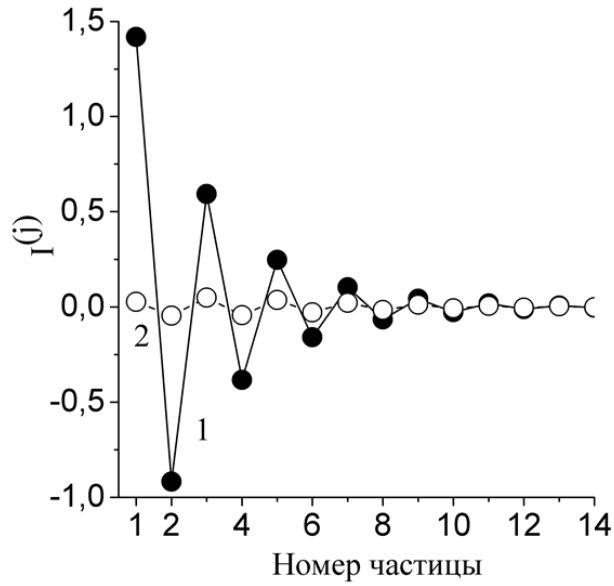


Рисунок 3.4.2. – Расчет (3.1.3) действительной (кривая 1, символ (●)) и мнимой (кривая 2, символ (○)) части тока в  $j$ -ой Si частице цепочки из  $N = 14$  частиц радиусом 68 нм, в случае возбуждения с одного конца цепочки излучением с частотой  $\nu_{res,12} = 606.444$  ТГц .

Рисунок 3.4.3 иллюстрирует поведение действительной части токов, возбуждаемых внутри цепочки кремниевых частиц в случае одинаковых амплитуд двух падающих пучков  $E_{right}^{(0)} / E_{left}^{(0)} = 1$ . Легко видеть, что возбуждение крайней частицы цепочки спадает уже на первых нескольких частицах. Данный факт исключает возможность взаимодействия возбуждений в случае облучения другого конца цепочки. Поэтому, далее мы будем рассматривать более короткие цепочки кремниевых частиц.

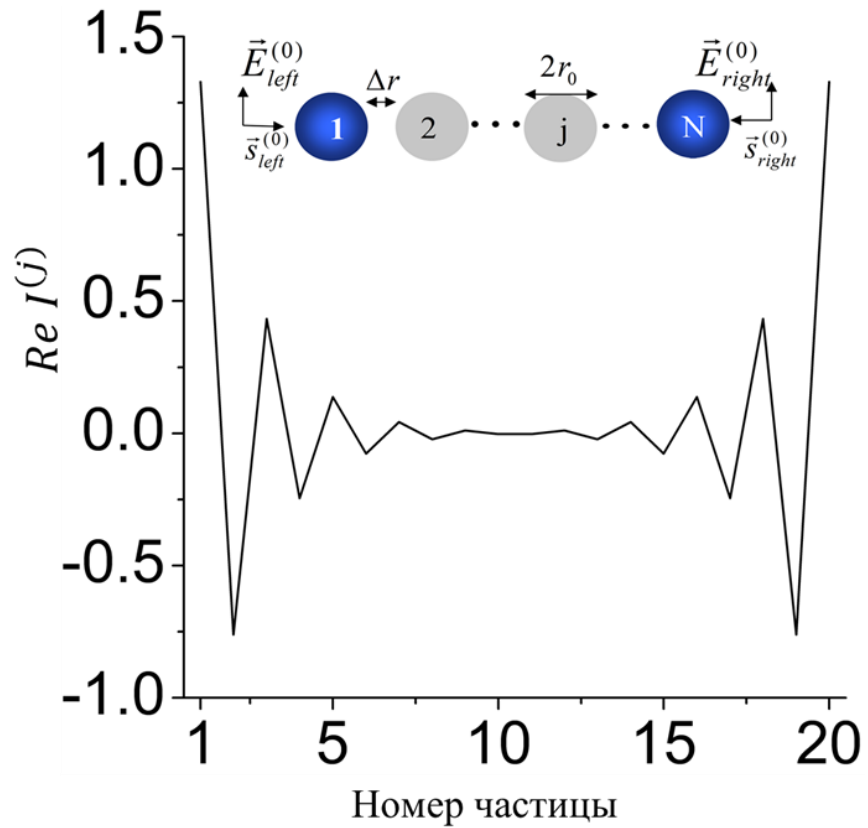


Рисунок 3.4.3. – Действительные токи, возбуждаемые в  $j$ -ой кремниевой частице цепочки из  $N = 20$  частиц в случае возбуждения двух крайних частиц с двух сторон электромагнитными пучками равной амплитуды  $E_{right}^{(0)} / E_{left}^{(0)} = 1$ . Вставка: схематическое изображение возбуждения электромагнитным пучком двух последних частиц линейной цепочки.

На рисунках 3.4.4 и 3.4.5 обобщаются результаты численных исследований уравнения (2.4.1) для цепочек из кремниевых сфер длиной до 15 частиц. Эти расчеты основаны на резонансных параметрах, упомянутых в начале текущего раздела.

На рисунке 3.4.4 показано влияние амплитуды пучка, возбуждаемого в левой части цепочки на токи в последней частице на противоположном конце. Прозрачные и закрашенные символы соответствуют четному или нечетному числу частиц в цепочках различной длины.

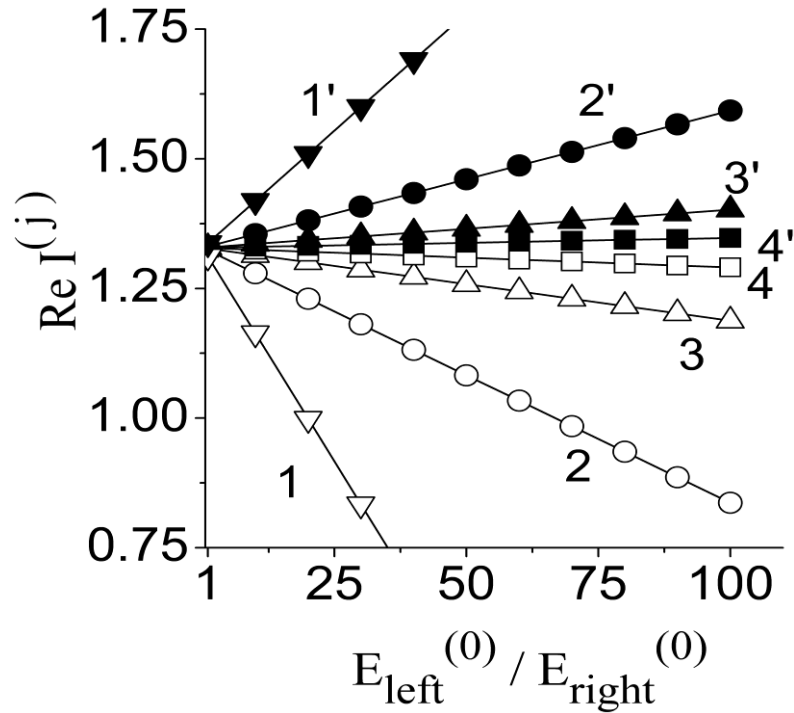


Рисунок 3.4.4. – Действительные токи, возбуждаемые в крайней правой частице для цепочек, состоящих из 8 (кривая 1,  $\nabla$ ), 9 (кривая 1',  $\blacktriangledown$ ), 10 (кривая 2,  $\circ$ ), 11 (кривая 2',  $\bullet$ ), 12 (кривая 3,  $\Delta$ ), 13 (кривая 3',  $\blacktriangle$ ), 14 (кривая 4,  $\square$ ) и 15 (кривая 4',  $\blacksquare$ ) кремниевых частиц в зависимости от увеличения амплитуды падающего ЭМ поля в крайней левой частице  $E_{left}^{(0)}$  с 1 до 100 при фиксированном значении амплитуды в крайней правой частице  $E_{right}^{(0)}$ .

Сравнение кривых с прозрачными и закрашенными символами (рис. 3.4.4) показывает, что возбуждение в левой части цепочки ведет к росту амплитуды тока в правой части в случае, если число частиц в цепочке четное. Обратная зависимость наблюдается в случае нечетного числа частиц в цепочках. Кроме того, можно заметить, что чем длиннее становится цепочка, тем меньшее влияние оказывается на крайнюю правую частицу цепочки.

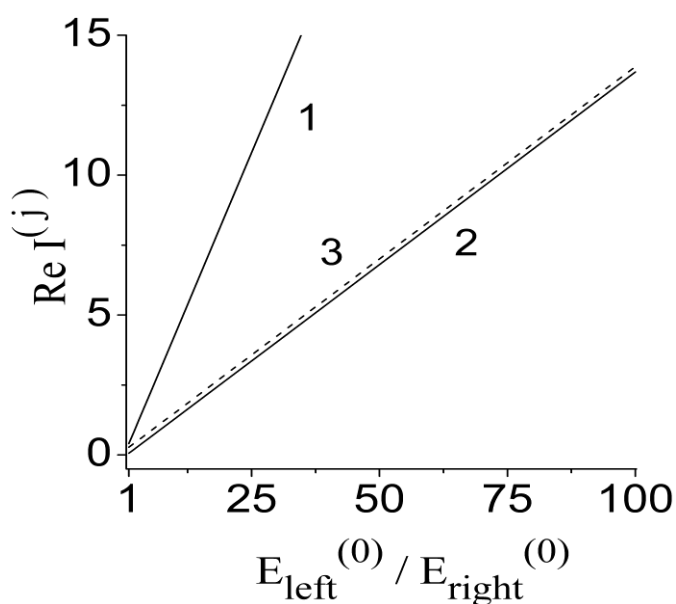


Рисунок 3.4.5. – Действительные токи, возбуждаемые в частице под номерами  $j = 3$  (кривая 1) и 5 (кривая 2) в случае цепочки длиной  $N = 10$  Si кремниевых частиц для  $j = 5$  (кривая 3) в случае  $N = 9$  частиц, при различном соотношении амплитуд двух падающих пучков  $E_{\text{left}}^{(0)} / E_{\text{right}}^{(0)}$ .

Рисунок 3.4.5 демонстрирует, что в случае специально подобранного числа частиц в цепочке, величины токов, возбуждаемых в частицах, зависят от соотношения амплитуд падающих пучков линейным образом. Следовательно, такие цепочки наночастиц могут быть использованы в качестве полностью оптических компараторов ЭМ сигнала. Изменение геометрической формы частиц в данном случае ведет к изменению функции Грина в представленных ранее выкладках (см. уравнение (2.1.6в)). Таким образом, эффект компаратора должен сохраняться и для частиц другой формы, например, цилиндрических, которые могут быть легко изготовлены в рамках существующей КМОП-технологии.

На практике, крайние частицы цепочки могут возбуждаться двумя внешними оптическими волокнами, а ток, возбуждаемый в частицах, может быть измерен с использованием эффекта генерации возбуждаемых плазмонами горячих электронов [136]. Величина измеряемого тока в компараторе будет линейно связана с отношением амплитуд двух сигналов, возбуждаемых в разных краях цепочки.

Кроме того, можно утверждать, что данная техника обработки оптических сигналов лучше масштабируется и встраивается в кремниевую технологию в сравнении с методом четырехволнового смешения [137]. Рассмотрим подробнее возможную конструкцию компаратора. На рисунке 3.4.6 представлена блок-схема оптического компаратора.

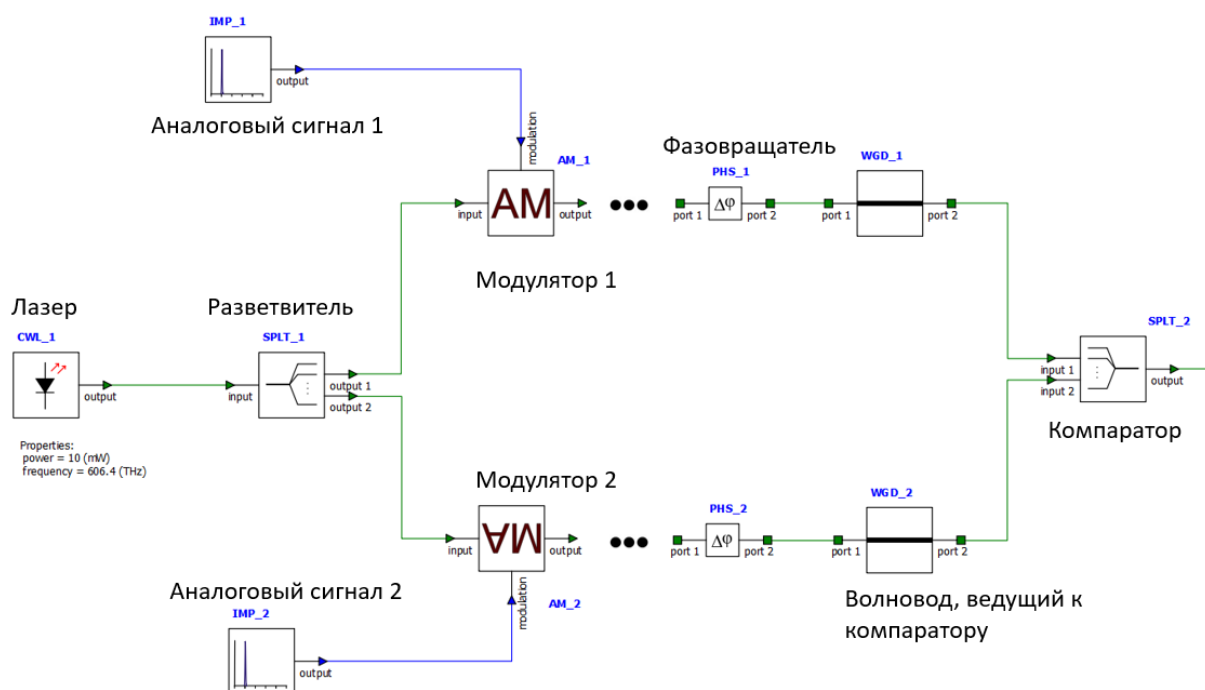


Рисунок 3.4.6. – Блок-схема ФИС оптического компаратора.

Излучение вводится в систему двумя внешними оптическими волокнами, при этом одно из волокон дополнено фазовращателем с целью создания синфазных сигналов на противоположных концах цепочки. В случае реализации компаратора в виде ФИС оптические волокна могут быть заменены планарными волноводами с ТЕ-модой распространения ЭМ сигнала, а фазовращатель может быть реализован в виде линии задержки или легированной области волновода с изменяемым под действием приложенного поля показателем преломления. Топология возможной ФИС оптического компаратора представлена на рисунке 3.4.7.

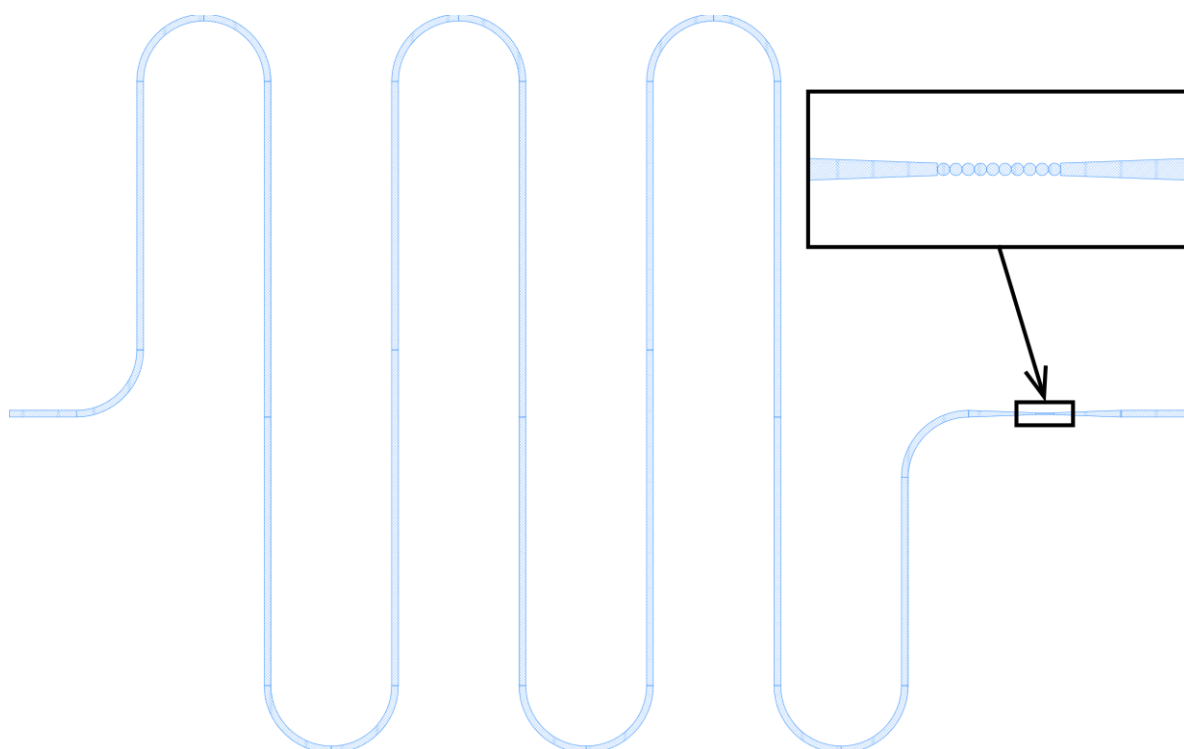


Рисунок 3.4.7. – Эскизная топология оптического компаратора. Слева и справа – волноводы с информационными сигналами для сравнения. Змееобразная структура представляет из себя линию задержки для корректировки фазы входного сигнала. Черной рамкой выделена непосредственно область оптического компаратора из 10 кремниевых частиц.

Предложенная на рисунках 3.4.6 и 3.4.7 конфигурация может быть использована в виде блока сравнения сигналов (блока оптического квантования) в фотонном аналого-цифровом преобразователе (далее – ФАЦП) [138]. В литературе [139] выделяется 4 класса ФАЦП:

- 1) с оптической поддержкой;
- 2) с оптической дискретизацией и электронным квантованием;
- 3) с электронной дискретизацией и оптическим квантованием;
- 4) с оптической дискретизацией и оптическим квантованием.

При этом, полностью оптические схемы (пункт 4) сталкиваются с рядом трудностей при миниатюризации [140], т.к. оптическое квантование чаще всего реализуется различными нелинейными методами (в том числе методом четырехволнового смешения), малосовместимыми с технологией кремниевой фотоники.

### 3.5 Выводы к главе 3

Аналитическое исследование комплексного параметра волнового взаимодействия соседних частиц показало, что темная мода дальнего распространения, возбуждаемая перпендикулярно поляризованным светом в линейной конечной цепочке сферических металлических частиц с дипольным взаимодействием ближайших соседей, отсутствует в цепочке частиц ряда диэлектрических материалов.

Численно показано, что, в отличие от металлических частиц, в случае цепочки частиц из кремния выполняется только одно из двух условий дальнего распространения электромагнитного возбуждения вдоль цепочки. В частности, на резонансной частоте моды дальнего распространения мнимая часть диэлектрической проницаемости кремния мала. Второе условие – отрицательная величина действительной части диэлектрической проницаемости, не выполняется. При положительной величине действительной части диэлектрической проницаемости, электрическое поле возбуждения локализовано в основном в объеме кремниевых частиц, что и обуславливает быстрое затухание возбуждения.

Ближние и дальние поля дают противоположный по знаку вклад в токи в металлических частицах цепочки. В частности, дальние волновые поля вносят вклад порядка 20% в токи проводимости в частицах и порядка 33% в токи поляризации в частицах золота (Au). Вклад дальних соседей в распространение электромагнитного возбуждения по цепочке металлических частиц практически не зависит от номера частицы в цепочке, за исключением осциллирующего характера вклада на краях цепочки. На конце цепочки взаимодействие дальних частиц обуславливает уменьшение амплитуды токов по сравнению с учетом только взаимодействия ближайших соседей.

В разделе 3.3 предложен приближенный метод расчета частоты резонансной моды, распространяющейся по линейной цепочке частиц без рассеяния в окружающее пространство и затухающей только за счет истинного поглощения в материале частиц. Метод состоит в исследовании параметра волнового взаимодей-



ствия соседних частиц. В резонансном случае выведена приближенная формула для этого параметра. Показано, что выведенная приближенная формула справедлива только для частот электромагнитного излучения на которых мнимая часть диэлектрической проницаемости материала частиц имеет локальный минимум, близкий к нулю, при отрицательной величине действительной части.

В разделе 3.4 предложен принцип функционирования цепочки частиц в режиме оптического компаратора. В частности, установлен характер зависимости токов, наведенных в короткой цепочке кремниевых частиц, от отношения амплитуд электрического поля в двух пучках электромагнитного излучения, возбуждающих крайние частицы цепочки.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

В заключении кратко сформулируем основные результаты и выводы, полученные в рамках данной диссертационной работы:

1. Аналитическое исследование комплексного параметра волнового взаимодействия соседних частиц показало, что неизлучающая мода дальнего распространения, возбуждаемая перпендикулярно поляризованным светом в линейной конечной цепочке сферических металлических частиц с дипольным взаимодействием ближайших соседей, отсутствует в цепочке частиц ряда полупроводниковых и диэлектрических материалов.
2. Численно показано, что, в отличие от металлических частиц, в случае цепочки частиц из кремния выполняется только одно из двух условий дальнего распространения электромагнитного возбуждения вдоль цепочки. В частности, на резонансной частоте моды дальнего распространения мнимая часть диэлектрической проницаемости кремния мала (менее единицы). Второе условие – отрицательная величина действительной части диэлектрической проницаемости, не выполняется. При положительной величине действительной части диэлектрической проницаемости, электрическое поле возбуждения локализовано в основном в объеме кремниевых частиц, что и обуславливает быстрое затухание возбуждения.
3. В приближении волнового взаимодействия ближайших соседей точное резонансное условие возбуждения неизлучающей моды дальнего распространения состоит в равенстве нулю мнимой части параметра парного взаимодействия частиц.
4. Равенство нулю мнимой части параметра парного взаимодействия частиц имеет простой физический смысл. В системе из двух частиц (димере) могут быть возбуждены две собственные моды с комплексными собственными значениями. Собственные частоты этих двух мод определяются из условия равенства нулю мнимой части собственных значений, которое совпадает с усло-

- вием равенство нулю мнимой части параметра парного взаимодействия частиц.
5. Ближние и дальние поля дают противоположный по знаку вклад в токи в металлических частицах цепочки. В частности, дальние волновые поля вносят вклад порядка 20% в токи проводимости в частицах и порядка 33% в токи поляризации в частицах Au.
  6. Вклад дальних соседей в распространение электромагнитного возбуждения по цепочке металлических частиц практически не зависит от номера частицы в цепочке за исключением осциллирующего характера вклада на краях цепочки. На конце цепочки взаимодействие дальних частиц обуславливает уменьшение амплитуды токов по сравнению с учетом только взаимодействия ближайших соседей.
  7. Разработан приближенный метод расчета частоты резонансной моды, распространяющейся по линейной цепочке частиц без рассеяния в окружающее пространство и затухающей только за счет истинного поглощения в материале частиц. Выведена приближенная формула для параметра волнового взаимодействия соседних частиц. Сопоставление с результатами точного расчета показало, что приближенная формула справедлива только для длин волн электромагнитного излучения, на которых мнимая часть диэлектрической проницаемости материала частиц имеет близкий к нулю минимум при отрицательной действительной части.
  8. Предложен механизм функционирования цепочки частиц в режиме оптического компаратора. В частности, установлен характер зависимости токов, наведенных в короткой цепочке кремниевых частиц, от отношения амплитуд электрического поля в двух пучках электромагнитного излучения, возбуждающих крайние частицы цепочки.

## СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ

ФИС	– фотонная интегральная схема;
ИС	– интегральная схема;
ЭМ	– электромагнитный;
IRDS	– International Roadmap for Devices and Systems;
Low-k	–класс материалов, у которых диэлектрическая проницаемость диэлектрики меньше, чем у классического SiO <sub>2</sub>
ППП (SPP)	– поверхностный плазмон-поляритон (surface plasmon-polariton)
CROW	– Coupled Resonator Optical Waveguide
TDDDB	– time-dependent dielectric breakdown
DWDM	– Dense Wavelength Division Multiplexing
КНИ (SOI)	– Кремний-на-изоляторе (silicon on insulator)
TE-мода	– поляризованная волна с вектором электрического поля E, перпендикулярным плоскости падения
TM-мода	– поляризованная волна с вектором электрического поля E, параллельным плоскости падения
ММЦ (MZM)	– модулятор Маха-Цендера (Mach Zehnder modulator)
AWG	– arrayed waveguide grating
FSR	– free spectral range
МШГ (WGM)	– моды «шепчущей галереи» (whispering gallery modes)
Уравнение	– уравнение Липмана-Швингера
ЛШ	
КС	– квази-сепарабельный
УБИС (ULSI)	– Ультрабо́льшая интегральная схема (Ultra Large Scale Integration)

**СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ**

- A1. А. А. Сапегин, М. Ю. Барабаненков, А. Г. Итальянцев, Интегрированные в структуры микроэлектроники волноводы на дискретных наноразмерных элементах, *Наноиндустрия*. № 9 (2018) 252-256, УДК 581.787 , DOI: 10.22184/1993-8578.2018.82.252.256 (ВАК, RSCI, WoS)
- A2. M. Yu. Barabanenkov, A. G. Italyantsev, A. A. Sapegin, Comparative Study of Light Guiding by Free Standing Linear Chains of Spherical Au and Si Nanoparticles, *Physica Status Solidi (b)*, v.257 (2020) 2000151 <https://doi.org/10.1002/pssb.202000151> (Scopus, WoS)
- A3. A A Sapegin, M Yu Barabanenkov, A G Italyantsev, All-optical comparator based on linear chain of silicon nanoparticles, *J. Phys.: Conf. Ser.* v. 1482 (2020) 012033 doi:10.1088/1742-6596/1482/1/012033 (Scopus)
- A4. А.А. Сапегин, М.Ю. Барабаненков, Упрощенное описание условий формирования темной моды в дискретном нановолноводе, *Электронная техника. Серия 3. Микроэлектроника*, вып.3 (183) (2021) 62-65 DOI: 10.7868/S2410993221030088

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Г.Я. Красников, Н.А. Зайцев. Нанoeлектроника: состояние, проблемы и перспективы развития // Нано- и микросистемная техника, 2009. №1. С. 2-5.
2. Г.Я. Красников, Н.А. Зайцев, А.Г. Красников Современное состояние разработок в области энергонезависимой памяти // Нано- и микросистемная техника. 2015. № 4 (177). С. 60-64
3. О.Н. Ермаков, Прикладная оптоэлектроника, М.: Техносфера, 2004, 414 с.
4. А.И. Сидоров, Н.В. Никоноров, Материалы и технологии интегральной оптики, СПб.: СПбГУ ИТМО, 2009. - 107 с
5. E. L. Hu, M. Brongersma, A. Vasa, (2011). Applications: Nanophotonics and Plasmonics. In: Nanotechnology Research Directions for Societal Needs in 2020. Science Policy Reports, vol 1. Springer, Dordrecht. [https://doi.org/10.1007/978-94-007-1168-6\\_10](https://doi.org/10.1007/978-94-007-1168-6_10)
6. Yu. Vlasov, Silicon Integrated Nanophotonics: Road from Scientific Explorations to Practical Applications, CLEO 2012 Plenary Session, [https://en.wikipedia.org/wiki/Yurii\\_Vlasov](https://en.wikipedia.org/wiki/Yurii_Vlasov)
7. Э. Розеншер, Б. Винтер, Оптоэлектроника, М.: Техносфера, 2004, 592 с.
8. В.М. Агранович, Д. Миллс (ред), Поверхностные поляритоны. Электромагнитные волны на поверхностях и границах раздела, Сборник статей. М.: Наука, 1985, 528 с.
9. В. В. Климов, Наноплазмоника, М.: Физматлит, 2009, 480 с.
10. S. Lal, J.H. Hafner, N.J. Halas, S. Link, P. Nordlander, Noble metal nanowires: from plasmon waveguides to passive and active devices, Accounts of Chemical Research (Acc Chem Res.) 45(11) (2012) 1887-1895
11. V.S. Volkov, Z. Han, M.G. Nielsen, K. Leosson, H. Keshmiri, J. Gosciniaik, O. Albrektsen, S.I. Bozhevolnyi. Opt. Lett. 36 (2011) 4278.
12. V.A. Zenin, Z. Han, V.S. Volkov, K. Leosson, I.P. Radko, S.I. Bozhevolnyi. Opt. Express 21 (2013) 8799.

13. Takahara, S. Yamagishi, H. Taki, A. Morimoto, T. Kobayashi, Guiding of a one-dimensional optical beam with nanometer diameter, *Optics Letters*, 22 (1997) 475.
14. M. Quinten, A. Leitner, J. R. Krenn, F. R. Aussenegg, Electromagnetic energy transport via linear chains of silver nanoparticles, *Opt. Lett.*, v.23 (1998) 1331 <https://doi.org/10.1364/OL.23.001331>
15. A. Yariv, Y. Xu, R. K. Lee, A. Scherer, Coupled-resonator optical waveguide: a proposal and analysis, *Opt. Lett.*, v.24 (1999) 711 <https://doi.org/10.1364/OL.24.000711>
16. D. Solis, B. Willingham, S. L. Nauert, L. S. Slaughter, J. Olson, P. Swanglap, A. Paul, W.-S. Chang, S. Link, *Nano Letters* 12 (2012) 1349
17. B. Wild, L. Cao, Y. Sun, B. P. Khanal, E. R. Zubarev, S. K. Gray, N. F. Scherer, M. Pelton, *ACS Nano* 6 (2012) 472
18. M. Mayer, P. L. Potapov, D. Pohl, A. M. Steiner, J. Schultz, B. Rellinghaus, A. Lubk, T. A. F. König, A. Fery, Direct Observation of Plasmon Band Formation and Delocalization in Quasi-Infinite Nanoparticle Chains, *Nano Letters* 19 (2019) 3854 – 3862 <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.9b01031>
19. J. Koomey, S. Berard, M. Sanchez and H. Wong, "Implications of Historical Trends in the Electrical Efficiency of Computing," in *IEEE Annals of the History of Computing*, vol. 33, no. 3, pp. 46-54, March 2011, doi: 10.1109/MAHC.2010.28.
20. Makimoto, Tsugio. (2013). Implications of Makimoto's Wave. *Computer*. 46. 32-37. 10.1109/MC.2013.294.
21. Sun, Shuai & Narayana, Vikram & Miscuglio, Mario & Kimerling, Lionel & El-Ghazawi, Tarek & Sorger, Volker. (2020). CLEAR: A Holistic Figure-of-Merit for Post- and Predicting Electronic and Photonic-based Compute-system Evolution. *Scientific Reports*. 10. 6482. 10.1038/s41598-020-63408-7.
22. Karl Rupp. 50 Years of microprocessor trend data. [Электронный ресурс] // Microprocessor trend data directory. URL: <https://github.com/karlrupp/microprocessor-trend-data> (дата обращения: 27.01.2024).

23. M. Badaroglu, "More Moore," 2021 IEEE International Roadmap for Devices and Systems Outbriefs, Santa Clara, CA, USA, 2021, pp. 01-38, doi: 10.1109/IRDS54852.2021.00010.

24. Chawla, Jasmeet & Gstrein, Florian & O'Brien, K. & Clarke, J. & Gall, Daniel. (2011). Electron scattering at surfaces and grain boundaries in Cu thin films and wires. *Phys. Rev. B.* 84. 10.1103/PhysRevB.84.235423.

25. Влияние процесса плазмохимического травления на молекулярную структуру и интегральные свойства диэлектриков с ультранизкой диэлектрической проницаемостью: диссертация кандидата физико-математических наук: 05.27.01 / Резванов Аскар Анварович; Москва, 2019. 191 с.

26. Fritze A. Integration of optoelectronic devices, electronic circuitry and optical waveguides : PhD Thesis / Fritze A. – Edinburg., 2002.

27. Sharma, R., Kumar, S. Design of energy-aware interconnects for next generation micro systems. *CSIT* 7, 215–220 (2019).

28. R. L. M. Dang and N. Shigyo, "A two-dimensional simulation of LSI interconnect capacitance," *IEEE Electron Device Lett.*, vol EDL-2, p. 196, 1981

29. Baets, Roel & Dumon, Pieter & Bogaerts, Wim et al. (2005). Silicon-on-insulator based nano-photonics: Why, How, What for?. 168 - 170. 10.1109/GROUP4.2005.1516441.

30. Makarov, Mikhail & Sapegin, A & Minnullin, Ramil. (2021). Numerical simulation of effective light transmission through a photonic memory cell. *Journal of Physics: Conference Series.* 2086. 012090. 10.1088/1742-6596/2086/1/012090

31. G. T. Reed, *Silicon Photonics. An introduction* (John Wiley & Sons Ltd, Wiley, 2004), pp. 76

32. Макаров, М. Э. Моделирование интегрального фазового модулятора с фазовращателем на основе и-образного рп-перехода / М. Э. Макаров, А. Г. Итальянцев, М. Ю. Барабаненков // *Электроника и микроэлектроника СВЧ.* – 2019. – Т. 1. – С. 420-425. – EDN NEHFRB.



33. Полупроводниковые гетероструктуры со сверхтонкими напряженными квантовыми ямами и лазеры спектрального диапазона 1525-1565 нм на их основе: диссертация кандидата физико-математических наук: 01.04.07 / Колодезный Евгений Сергеевич; Санкт-Петербург, 2018. - 149 с.

34. R. Broeke, "European InP Photonic Integrated Circuit Foundry Platform Development," in Optical Fiber Communication Conference, OSA Technical Digest (online) (Optica Publishing Group, 2016), paper W4H.5.

35. Qi, Yifan & Li, Yang. (2020). Integrated lithium niobate photonics. Nanophotonics. 9. 10.1515/nanoph-2020-0013.

36. Vivien, Laurent and Lorenzo Pavesi. "Handbook of Silicon Photonics." (2013).

37. Ridder, R.M. & Warhoff, K. & Driessen, Alfred & Lambeck, P.V. & Albers, Hannes. (1998). Silicon oxynitride planar waveguiding structures for application in optical communication. Selected Topics in Quantum Electronics, IEEE Journal of. 4. 930 - 937. 10.1109/2944.736079.

38. Weik, M.H. (2000). refractive-index contrast. In: Computer Science and Communications Dictionary. Springer, Boston, MA. [https://doi.org/10.1007/1-4020-0613-6\\_15869](https://doi.org/10.1007/1-4020-0613-6_15869)

39. Bogaerts, Wim & Chrostowski, Lukas. (2018). Silicon Photonics Circuit Design: Methods, Tools and Challenges. Laser & Photonics Reviews. 12. 1700237. 10.1002/lpor.201700237.

40. DWDM системы: научное издание / В. Н. Листвин, В. Н. Трещиков. - Москва: Наука, 2013. - 267 с. ISBN 978-5-9902333-6-2

41. Melloni, Andrea & Costa, R. & Cusmai, G. & Morichetti, Francesco. (2009). The role of index contrast in dielectric optical waveguides. International Journal of Materials & Product Technology - INT J MATER PROD TECHNOL. 34. 10.1504/IJMPT.2009.024998.

42. Giewont, Ken et al. (2019). 300mm Monolithic Silicon Photonics Foundry Technology. IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics. PP. 1-1. 10.1109/JSTQE.2019.2908790.
43. Takenaka, Mitsuru & Nakano, Yoshiaki. (2007). InP photonic wire waveguide using InAlAs oxide cladding layer. Optics express. 15. 8422-7. 10.1364/OE.15.008422.
44. Bauters, Jared et al. (2011). Ultra-low-loss high-aspect-ratio Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> waveguides. Optics express. 19. 3163-74. 10.1364/OE.19.003163.
45. Chen, Nuo et al. (2023). High-Efficiency Electro-Optic Modulator on Thin-Film Lithium Niobate with High-Permittivity Cladding. Laser & Photonics Reviews. 17. 10.1002/lpor.202200927.
46. Dragic, Peter & Pan, Guanyi & Yu, Nanjie & Meehan, Bailey & Hawkins, Thomas & Ballato, John. (2020). Thermo-optic coefficient of B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and GeO<sub>2</sub> co-doped silica fibers. Optical Materials Express. 10. 10.1364/OME.397215.
47. GLOBALFOUNDRIES Silicon Photonics Platform [Электронный ресурс] // Japan SOI Design Workshop (2018) URL: <http://soiconsortium.eu/events/25-26-october-2018-japan-soi-design-workshop/> (дата обращения: 30.01.2024).
48. A.Bakhtiar, Leily. (2011). The Design of half-subtractor Logic Function Based on Nonlinear Directional Coupler. Journal of Advances in Computer Research.
49. Майер С. А. Плазмоника // Теория и приложения. М. – 2011 296 с. ISBN 978-5-93972-875-1
50. Smith C. L., Stenger N., Kristensen A., Mortensen N. A., Bozhevolnyi S. I. Gap and channeled plasmons in tapered grooves: a review // Nanoscale. – 2015. – Т. 7. – № 21. – С. 9355-9386
51. R. Zia, J.A. Schuller, M.L. Brongersma, Near-field characterization of guided polariton propagation and cutoff in surface plasmon waveguides, Phys. Rev. B, 74, 165415(2006)

52. T. Holmgaard, J. Gosciniak, S.I. Bozhevolnyi, Long-range dielectric-loaded surface plasmon-polariton waveguides, *Optics express*, v. 18, Is. 22 (2010) 23009 – 23015

53. J. R. Krenn, B. Lamprecht, H. Ditlbacher, G. Schider, M. Salerno, A. Leitner and F. R. Aussenegg, Non-diffraction-limited light transport by gold nanowires, *Europhysics Letters*, 60, 663 – 669 (2002)

54. V. V. Kornienko et al., "Quarter-Millimeter Propagating Plasmons in Thin-Gold-Film-Based Waveguides for Visible Spectral Range," in *Journal of Lightwave Technology*, vol. 38, no. 17, pp. 4794-4800, 1 Sept.1, 2020, doi: 10.1109/JLT.2020.2993594.

55. Федянин, Д. Ю. Усиление поверхностных плазмон-поляритонов в наноразмерных волноводах: специальность 01.04.03 "Радиофизика": диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Федянин Дмитрий Юрьевич. – Долгопрудный, 2013. – 138 с.

56. Высокодобротные оптические микрорезонаторы с модами типа шепчущей галереи и их применение в прецизионных измерениях / М. Л. Городецкий, Ю. А. Демченко, Д. Ф. Зайцев [и др.] // *Метрология*. – 2014. – № 12. – С. 22-40.

57. Chrostowski, Lukas & Hochberg, Michael. (2015). *Silicon Photonics Design: From Devices to Systems*. 10.1017/cbo9781316084168

58. Y. Zhao, P. Larimer, R. T. Pressler, Ben W. Strowbridge and C. Burda, "Wireless Activation of Neurons in Brain Slices Using Nanostructured Semiconductor Photoelectrodes", *Angewandte Chemie International Edition*, 48, 2407–2410 (2009). doi:10.1002/anie.200806093

59. Sh. Mukherjee, F. Libisch, N. Large, O. Neumann, L. V. Brown, J. Cheng, J. B. Lassiter, E. A. Carter, P. Nordlander, N. J. Halas, "Hot Electrons Do the Impossible: Plasmon-Induced Dissociation of H<sub>2</sub> on Au", *Nano Letters*, 13, 240-247 (2013)

60. Wang, Z.B., Luk'yanchuk, B.S., Guo, W., Edwardson, S.P., Whitehead, D.J., Li, L., Liu, Z., Watkins, K.G., The influences of particle number on hot spots in

strongly coupled metal nanoparticles chain, *The Journal of Chemical Physics*, 128, 094705 (2008)

61. M. S. Gudixsen, L. J. Lauhon, J. Wang, D. C. Smith, C. M. Lieber, “Growth of nanowire superlattice structures for nanoscale photonics and electronics,” *Nature* 415, 617-620 (2002).

62. P. Mühlischlegel, H.-J. Eisler, B. Hecht, D. W. Pohl, “Resonant optical antennas,” *Science* 308, 1607-1609 (2005).

63. Maier, Stefan & Brongersma, Mark & Kik, Pieter & Atwater, Harry. (2002). Observation of near-field coupling in metal nanoparticle chains using far-field polarization spectroscopy. *Physical Review B*. 65. 10.1103/PhysRevB.65.193408.

64. S.A. Maier, P.G. Kik, L. A. Sweatlock, H.A. Atwater, Energy transport in metal nanoparticle plasmon waveguides, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, 777, T7.1.1-T7.1.12 (2003)

65. Yu.N. Barabanenkov, M.Yu. Barabanenkov, Radiation losses and dark mode at light guiding by a liner chain of nanoparticles, *JOSA A*, vol.34, Is.3, pp.321 – 330 (2017) <https://doi.org/10.1364/JOSAA.34.000321>

66. Ю.Н.Барабаненков, М.Ю.Барабаненков, Метод квази-сепарабельного Т-оператора рассеяния для прямого вычисления локальных полей в задачах многократного рассеяния волн, *Журнал радиоэлектроники*, №4 (2013) 1 -52 <http://jre.cplire.ru/jre/apr 13/5/text.html>

67. М. Борн, Э. Вольф, Основы оптики, М.: Наука; Издание 2-е, испр.,1973, 720 стр.

68. К. Борен, Д. Хафман Д, Поглощение и рассеяние света малыми частицами / Перевод с англ. Фейзулина З.И.,Виноградова А.Г., Апресяна Л.А. с предисловием член – корр. Татарского / М.: Мир, 1986. 413 с.

69. Р. Ньютон , Теория рассеяния волн и частиц. - М., Мир, 1969

70. В. А. Lippmann, J. Schwinger, Variational principles for scattering processes. I., *Phys. Rev.*, v. 79 (1950) 469 - 480 <https://doi.org/10.1103/PhysRev.79.469>

71. M. Silveirinha, Metamaterial homogenization approach with application to the characterization of microstructured composites with negative parameters, *Phys. Rev. B*, v. 75, Is. 11 (2007) 115104 <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.75.115104>

72. W. C. Chew. *Waves and Fields in Inhomogeneous Media*, New York : IEEE Press Series on Electromagnetic Waves, 1995.

73. М. Голдбергер, К. Ватсон, Теория столкновений, Москва : Мир 1967 г. ,823 стр.

74. Ю.Н. Барабаненков, Многократное рассеяние волн на ансамбле частиц и теория переноса излучения, УФН, т. 117 (1975) 49–78  
10.3367/UFNr.0117.197509b.0049

75. Гозман, М. И. Теория волноводов на основе низкоразмерных фотонных кристаллов: специальность 01.04.07 "Физика конденсированного состояния": диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Гозман Михаил Игоревич. – Москва, 2010. – 192 с. – EDN QFDLTZ.

76. А.М. Пикалов, Дискретные магنونные и плазмонные волноводы и плазмон-магنونное взаимодействие: специальность 01.03.12 (01.04.11) "Физика магнитных явлений": диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Пикалов Антон Михайлович. – Москва, 2021. – 108 с.

77. R. E. Benner, P. W. Barber, J. F. Owen, R. K. Chang, Observation of Structure Resonances in the Fluorescence Spectra from Microspheres, *Phys. Rev. Lett.*, v.44, Is.7 (1980) 475—478 <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.44.475>

78. Zh. Chen, A. Taflove, V. Backman, Photonic nanojet enhancement of backscattering of light by nanoparticles: a potential novel visible-light ultramicroscopy technique, *Opt. Express*, v.12 (2004) 1214-1220  
<https://doi.org/10.1364/OPEX.12.001214>

79. Д.А. Козлов, Моды шепчущей галереи в диэлектрическом цилиндре с круглым сечением, Компьютерная оптика, т.41, № 3 (2017) 377 – 384 DOI: 10.18287/2412-6179-2017-41-3-377-384

80. S. Yang, V.N. Astratov; Photonic nanojet-induced modes in chains of size-disordered microspheres with an attenuation of only 0.08 dB per sphere, *Appl. Phys. Lett.*, v.92 (26) (2008) 261111. <https://doi.org/10.1063/1.2954013>

81. Исимару А, Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородных средах (М.: Мир, 1981); Ishimaru A *Wave Propagation and Scattering in Random Media* Vol. 1, 2 (New York: Academic Press, 1978)

82. W.J. Wiscombe, *Mie Scattering Calculations: Advances in Technique and Fast, Vector-Speed Computer Codes*, NCAR Technical Note, Atmospheric Analysis And Prediction Division, National Center For Atmospheric Research, Boulder, Colorado, June 1979

83. N.A. Logan, Survey of some early studies of the scattering of plane waves by a sphere. *Proc. IEEE*, v.53 (1965) 773-785.

84. K.S. Shifrin, *Scattering of Light in a Turbid Medium*, 1951, English translation, NASA TTF-477, Washington, D.C., 1968.

85. Хюлст Г. ван де, *Рассеяние света малыми частицами*, Москва: Издательство иностранной литературы, 1961.

86. M. Kerker, *The Scattering of Light and Other Electromagnetic Radiation*, Academic Press, New York, 1969

87. Трибельский М.И., Мирошниченко А.Е., Резонансное рассеяние электромагнитных волн малыми металлическими частицами: новый взгляд на старую проблему, *УФН*, т.192 (2022) 45–68 <https://ufn.ru/ru/articles/2022/1/c/>

88. R. Ruppin, Optical properties of small metal spheres, *Phys. Rev. B*, v.11 (1975) 2871–2876 <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.11.2871>

89. P. Clippe, R. Evrard, A. A. Lucas, Aggregation effect on the infrared absorption spectrum of small ionic crystals,” *Phys. Rev. B*, v.14 (1976) 1715–1721 <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.14.1715>

90. Ausloos M., Clippe P., Lucas A. A. Infrared active modes in large clusters of spheres // *Physical Review B*. – 1978. – Т. 18. – №. 12. – С. 7176.

91. Gérardy J. M., Ausloos M. Absorption spectrum of clusters of spheres from the general solution of Maxwell's equations. II. Optical properties of aggregated metal spheres //Physical Review B. – 1982. – Т. 25. – №. 6. – С. 4204.

92. Pustovit V. N., Sotelo J. A., Niklasson G. A. Coupled multipolar interactions in small-particle metallic clusters //JOSA A. – 2002. – Т. 19. – №. 3. – С. 513-518.

93. Pack A., Hietschold M., Wannemacher R. Failure of local Mie theory: optical spectra of colloidal aggregates //Optics communications. – 2001. – Т. 194. – №. 4-6. – С. 277-287.

94. Smith G. B., Reuben A. J. Normal mode analysis of optical polarisation response in nanocomposite particles //Nanostructured Materials. – 1999. – Т. 12. – №. 1-4. – С. 353-356.

95. Cruz L., Fonseca L. F., Gómez M. T-matrix approach for the calculation of local fields in the neighborhood of small clusters in the electrodynamic regime //Physical Review B. – 1989. – Т. 40. – №. 11. – С. 7491.

96. Ильин В. Б., Лоскутов А. А., Фарафонов В. Г. Модификация и исследование метода Т-матриц при рассеянии плоской волны абсолютно проводящим осесимметричным телом //Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2004. – Т. 44. – №. 2. – С. 350-370.

97. Farafonov V. G., Il'in V. B., Henning T. A new solution of the light scattering problem for axisymmetric particles //Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 1999. – Т. 63. – №. 2-6. – С. 205-215.

98. Brongersma M. L., Hartman J. W., Atwater H. A. Electromagnetic energy transfer and switching in nanoparticle chain arrays below the diffraction limit //Physical Review B. – 2000. – Т. 62. – №. 24. – С. R16356.

99. Koenderink A. F., Polman A. Complex response and polariton-like dispersion splitting in periodic metal nanoparticle chains //Physical Review B. – 2006. – Т. 74. – №. 3. – С. 033402.

100. Weber W. H., Ford G. W. Propagation of optical excitations by dipolar interactions in metal nanoparticle chains //Physical Review B. – 2004. – T. 70. – №. 12. – C. 125429.
101. Maier S. A., Kik P. G., Atwater H. A. Optical pulse propagation in metal nanoparticle chain waveguides //Physical Review B. – 2003. – T. 67. – №. 20. – C. 205402.
102. Liang C., Lo Y. T. Scattering by two spheres //Radio Science. – 1967. – T. 2. – №. 12. – C. 1481-1495.
103. Bruning J., Lo Y. Multiple scattering of EM waves by spheres part I-- Multipole expansion and ray-optical solutions //IEEE Transactions on Antennas and Propagation. – 1971. – T. 19. – №. 3. – C. 378-390.
104. Bruning J., Lo Y. Multiple scattering of EM waves by spheres part II-- Numerical and experimental results //IEEE Transactions on Antennas and Propagation. – 1971. – T. 19. – №. 3. – C. 391-400.
105. Fuller K. A., Kattawar G. W. Consummate solution to the problem of classical electromagnetic scattering by an ensemble of spheres. I: Linear chains //Optics letters. – 1988. – T. 13. – №. 2. – C. 90-92.
106. Fuller K. A., Kattawar G. W. Consummate solution to the problem of classical electromagnetic scattering by an ensemble of spheres. II: Clusters of arbitrary configuration //Optics letters. – 1988. – T. 13. – №. 12. – C. 1063-1065.
107. Mackowski D. W. Analysis of radiative scattering for multiple sphere configurations //Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences. – 1991. – T. 433. – №. 1889. – C. 599-614.
108. Borghese F. et al. Electromagnetic scattering by a cluster of spheres //Applied Optics. – 1979. – T. 18. – №. 1. – C. 116-120.
109. Borghese F. et al. Multiple electromagnetic scattering from a cluster of spheres. I. Theory //Aerosol Science and Technology. – 1984. – T. 3. – №. 2. – C. 227-235.



110. Wang Y. M., Chew W. C. A recursive T-matrix approach for the solution of electromagnetic scattering by many spheres //IEEE transactions on antennas and propagation. – 1993. – Т. 41. – №. 12. – С. 1633-1639.
111. Xu Y. Electromagnetic scattering by an aggregate of spheres //Applied optics. – 1995. – Т. 34. – №. 21. – С. 4573-4588.
112. Xu Y., Wang R. T. Electromagnetic scattering by an aggregate of spheres: Theoretical and experimental study of the amplitude scattering matrix //Physical Review E. – 1998. – Т. 58. – №. 3. – С. 3931.
113. Стретт Д. В. Теория звука, т. I./Дж. В. Стретт (Лорд Рэлей) //М.: Гос-техиздат. – 1955.
114. Burin A. L. Bound whispering gallery modes in circular arrays of dielectric spherical particles //Physical Review E. – 2006. – Т. 73. – №. 6. – С. 066614.
115. Shen J. Algorithm of numerical calculation on Lorentz Mie theory //PIERS Online. – 2005. – Т. 1. – №. 6. – С. 691-694.
116. Rasskazov I. L. et al. Remarkable predictive power of the modified long wavelength approximation //The Journal of Physical Chemistry C. – 2021. – Т. 125. – №. 3. – С. 1963-1971.
117. Гинзбург В. Л., Мотулевич Г. П. Оптические свойства металлов //Успехи физических наук. – 1955. – Т. 55. – №. 4. – С. 469-535.
118. Абромовиц А., Стиган И. Справочник по специальным функциям (с формулами, графиками и математическими таблицами) //М. Абромовица и М. Стиган.–М.: Наука.–1979.–832 С. – 1979.
119. Fleming J. W. et al. Handbook of optical materials. – CRC press, 2018.
120. Palik E. D. (ed.). Handbook of optical constants of solids. – Academic press, 1998. – Т. 3.
121. Vuye G. et al. Temperature dependence of the dielectric function of silicon using in situ spectroscopic ellipsometry //Thin Solid Films. – 1993. – Т. 233. – №. 1-2. – С. 166-170.

122. Šik J., Hora J., Humlíček J. Optical functions of silicon at high temperatures //Journal of Applied Physics. – 1998. – T. 84. – №. 11. – C. 6291-6298.
123. Sun J. P. et al. Influence of the temperature-dependent dielectric constant on the photoacoustic effect of gold nanospheres //Physical Chemistry Chemical Physics. – 2022. – T. 24. – №. 48. – C. 29667-29682.
124. Blaber M. G., Arnold M. D., Ford M. J. Search for the ideal plasmonic nanoshell: the effects of surface scattering and alternatives to gold and silver //The Journal of Physical Chemistry C. – 2009. – T. 113. – №. 8. – C. 3041-3045.
125. Ordal M. A. et al. Optical properties of the metals al, co, cu, au, fe, pb, ni, pd, pt, ag, ti, and w in the infrared and far infrared //Applied optics. – 1983. – T. 22. – №. 7. – C. 1099-1119.
126. Sigalas M. M. et al. Metallic photonic band-gap materials //Physical Review B. – 1995. – T. 52. – №. 16. – C. 11744.
127. El-Kady I. et al. Metallic photonic crystals at optical wavelengths //Physical Review B. – 2000. – T. 62. – №. 23. – C. 15299.
128. Zeman E. J., Schatz G. C. An accurate electromagnetic theory study of surface enhancement factors for silver, gold, copper, lithium, sodium, aluminum, gallium, indium, zinc, and cadmium //Journal of Physical Chemistry. – 1987. – T. 91. – №. 3. – C. 634-643.
129. Metwally K., Mensah S., Baffou G. Fluence threshold for photothermal bubble generation using plasmonic nanoparticles //The Journal of Physical Chemistry C. – 2015. – T. 119. – №. 51. – C. 28586-28596.
130. Savelev R. S. et al. Subwavelength waveguides composed of dielectric nanoparticles //Physical Review B. – 2014. – T. 89. – №. 3. – C. 035435.
131. Meier M., Wokaun A. Enhanced fields on large metal particles: dynamic depolarization //Optics letters. – 1983. – T. 8. – №. 11. – C. 581-583.
132. Alu A., Engheta N. Theory of linear chains of metamaterial/plasmonic particles as subdiffraction optical nanotransmission lines //Physical Review B. – 2006. – T. 74. – №. 20. – C. 205436.

133. Park S. Y., Stroud D. Surface-plasmon dispersion relations in chains of metallic nanoparticles: An exact quasistatic calculation //Physical Review B. – 2004. – Т. 69. – №. 12. – С. 125418.
134. Maier S. A., Kik P. G., Atwater H. A. Observation of coupled plasmon-polariton modes in au nanoparticle chain waveguides of different lengths: Estimation of waveguide loss //Applied Physics Letters. – 2002. – Т. 81. – №. 9. – С. 1714-1716.
135. Downing C. A., Weick G. Topological collective plasmons in bipartite chains of metallic nanoparticles //Physical Review B. – 2017. – Т. 95. – №. 12. – С. 125426.
136. Clavero C. Plasmon-induced hot-electron generation at nanoparticle/metal-oxide interfaces for photovoltaic and photocatalytic devices //Nature Photonics. – 2014. – Т. 8. – №. 2. – С. 95-103.
137. Kibria R., Austin M. W. All optical signal-processing techniques utilizing four wave mixing //Photonics. – MDPI, 2015. – Т. 2. – №. 1. – С. 200-213.
138. Valley G. C., Hurrell J. P., Seifler G. A. Photonic analog-to-digital converters: fundamental and practical limits //Integrated Optical Devices, Nanostructures, and Displays. – SPIE, 2004. – Т. 5618. – С. 96-106.
139. Valley G. C. Photonic analog-to-digital converters A tutorial //2009 Conference on Optical Fiber Communication. – IEEE, 2009. – С. 1-48.
140. Стариков Р. С. Фотонные АЦП //Успехи современной радиоэлектроники. – 2015. – Т. 1. – №. 3. – С. 3.

**ПРИЛОЖЕНИЕ 1**  
**УПРОЩЕНИЕ Т-ОПЕРАТОРА РАССЕЙЯНИЯ В СЛУЧАЕ МАЛЫХ**  
**СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ**

Применим КС Т-оператор (1.8.24) к описанию рассеяния на уединенной однородной сферической частице радиуса  $r_0$  в свободном пространстве. Выберем базис в виде векторных магнитных  $\vec{M}_{e(o)mn}(k)$  и электрических  $\vec{N}_{e(o)mn}(k)$  сферических гармоник в сферической системе координат  $r, \vartheta, \varphi$ . Здесь индексы «e» и «o» обозначают четные и нечетные сферические гармоники, соответственно, а  $mn$  - индексы сферических гармоник. Аргумент  $k = (\omega/c)\hat{\varepsilon}^{1/2}$  обозначает волновое число внутри сферической частицы. Введём мультииндексы  $\hat{p} = \vec{M}_{e(o)mn}(k)$  или  $\vec{N}_{e(o)mn}(k)$  и далее будем записывать базисные функции как  $\vec{t}_{\hat{p}}(\vec{r})$  или  $\vec{t}_{\hat{q}}(\vec{r})$ .

В [65] показано, что генерирующую матрицу в правой части (1.8.24)

$$\langle n | \chi^{(0)} | m \rangle = \int d\vec{r} \frac{1}{V(\vec{r})} \vec{t}_n(\vec{r}) \vec{t}_m(\vec{r}) - \langle n | g^{(0)} | m \rangle \quad (\text{П1.1})$$

можно преобразовать к интегралу по объёму  $\Omega$  и поверхности  $\Sigma$  сферической частицы

$$\chi_{\hat{p}\hat{q}}^{(0)} = -\frac{1}{k_0^2 - k^2} \int_{\Omega} d\vec{r} \int_{\Sigma} d\Sigma' \vec{v}(\vec{r}') \left[ \vec{p}(\vec{r}') \times \nabla' \times \vec{t}_{\hat{q}}(\vec{r}') - \vec{t}_{\hat{q}}(\vec{r}') \times \nabla' \times \vec{p}(\vec{r}') \right] \quad (\text{П1.2})$$

где вектор  $\vec{p}(\vec{r}') = \vec{G}^{(0)}(\vec{r}' - \vec{r}) \vec{t}_{\hat{p}}(\vec{r})$ . Интегрирование (П1.2) приводит к диагональной матрице с мультииндексами  $\hat{p} = \vec{M}_{e(o)mn}(k)$  или  $\vec{N}_{e(o)mn}(k)$

$$\chi_{\hat{p}\hat{q}}^{(0)} = \chi_{\hat{p}}^{(0)} \delta_{\hat{p}\hat{q}} \quad (\text{П1.3})$$

Штрихованные гармоники относятся к штрихованной сферической системе координат  $r', \vartheta', \varphi'$ . Подставляя (П1.3) в (1.8.24) получим для Т- оператора рассеяния выражение

$$\begin{aligned}
T^{(0)}(\vec{r}, \vec{r}') &= \sum_{mn} \frac{1}{\chi_{Me(o)mn}^{(0)}} \vec{M}_{e(o)mn}(k) \otimes \vec{M}'_{e(o)mn}(k) \\
&+ \sum_{mn} \frac{1}{\chi_{Ne(o)mn}^{(0)}} \vec{N}_{e(o)mn}(k) \otimes \vec{N}'_{e(o)mn}(k)
\end{aligned} \tag{П1.4}$$

Обозначение  $\vec{A} \otimes \vec{B}$  расписывается как  $(\vec{A} \otimes \vec{B})_{\alpha\beta}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = A_\alpha(\vec{r}_1) B_\beta(\vec{r}_2)$ .

Элементы диагональной матрицы  $\chi_{\hat{p}}^{(0)}$  могут быть записаны в терминах коэффициентов рассеяния Ми  $a_n, b_n, c_n, d_n$  и билинейной функции, составленной из сферических векторных волновых функций. Обозначим билинейный функционал  $(k_0, k)$  сферических векторных волновых функций на сфере объемом  $\Omega$

$$\begin{aligned}
[\vec{M}_{e(o)mn}(k_0), \vec{M}_{e(o)mn}(k)] &\equiv \int_{\Omega} d\vec{r} (\vec{M}_{e(o)mn}(k_0) \vec{M}_{e(o)mn}(k)) \\
&= \kappa_{mn} \frac{1}{k_0 k (k_0^2 - k^2)} \times [k \psi_n(k_0 r_0) \psi'_n(k r_0) - k_0 \psi_n(k r_0) \psi'_n(k_0 r_0)]
\end{aligned} \tag{П1.5}$$

и

$$\begin{aligned}
[\vec{N}_{e(o)mn}(k_0), \vec{N}_{e(o)mn}(k)] &\equiv \int_{\Omega} d\vec{r} (\vec{N}_{e(o)mn}(k_0) \vec{N}_{e(o)mn}(k)) \\
&= \kappa_{mn} \frac{1}{k_0 k (k_0^2 - k^2)} \times [k_0 \psi_n(k_0 r_0) \psi'_n(k r_0) - k \psi_n(k r_0) \psi'_n(k_0 r_0)]
\end{aligned} \tag{П1.6}$$

Здесь введена вспомогательная матрица

$$\kappa_{mn} = 2\pi(1 + \delta_{m0}) \frac{n(n+1)(n+m)!}{2n+1(n-m)!} \tag{П1.7}$$

$\psi_n(\rho)$  – функция Риккати-Бесселя. Далее получаем формулы для диагональных элементов матрицы  $\chi_{\hat{p}}^{(0)}$

$$\begin{aligned}
\frac{ik_0}{\chi_{Me(o)mn}^{(0)}} &= \frac{\kappa_{mn} b_n}{[\vec{M}_{e(o)mn}(k_0), \vec{M}_{e(o)mn}(k)]^2}, \\
\frac{ik_0}{\chi_{Ne(o)mn}^{(0)}} &= \frac{\kappa_{mn} a_n}{[\vec{N}_{e(o)mn}(k_0), \vec{N}_{e(o)mn}(k)]^2}
\end{aligned} \tag{П1.8}$$

Можно показать, что существуют простые соотношения между коэффициентами рассеяния и пропускания Ми

$$\begin{aligned} \frac{b_n}{c_n} &= ik_0 \frac{k_0^2 - k^2}{\kappa_{1n}} \left[ \vec{M}_{e(o)1n}(k_0), \vec{M}_{e(o)1n}(k) \right], \\ \frac{a_n}{d_n} &= ik_0 \frac{k_0^2 - k^2}{\kappa_{1n}} \left[ \vec{N}_{e(o)1n}(k_0), \vec{N}_{e(o)1n}(k) \right] \end{aligned} \quad (\text{П1.9})$$

T- оператор рассеяния (П1.4) может быть записан в виде суммы «электрической» и «магнитной» частей при индексе  $n = 1$ , который соответствует электрическому диполю  $\vec{N}_{e(o)m1}$  и электрическому полю магнитного диполя  $\vec{M}_{e(o)m1}$  (возможны угловые части четных электрических  $\vec{N}_{(e)01}$ ,  $\vec{N}_{(e)11}$  и магнитных  $\vec{M}_{(e)01}$ ,  $\vec{M}_{(e)11}$  гармоник и нечетных гармоник  $\vec{N}_{(o)11}$ ,  $\vec{M}_{(o)11}$ )

$$T^{(0)}(\vec{r}, \vec{r}') = T^{(0)electr}(\vec{r}, \vec{r}') + T^{(0)magn}(\vec{r}, \vec{r}') \quad (\text{П1.10})$$

В случае малых сферических частиц радиуса  $r_0$ , таких что  $k_0 r_0 \ll 1$  и  $kr_0 \ll 1$ , получим

$$\begin{aligned} T^{(0)electr}(\vec{r}, \vec{r}') &\cong -4\pi k_0^2 \eta \delta(\vec{r}) \delta(\vec{r}') \bar{\bar{I}}, \\ T^{(0)magn}(\vec{r}, \vec{r}') &\cong -4\pi \mu (\nabla \times) \otimes (\nabla' \times) \delta(\vec{r}) \delta(\vec{r}') \bar{\bar{I}} \end{aligned} \quad (\text{П11})$$

где  $\eta = (3i/2k_0^3)a_1$  и  $\mu = (3i/2k_0^3)b_1$  - электрическая и магнитная поляризуемость сферической частицы соответственно.

## ПРИЛОЖЕНИЕ 2

### РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТОВ МИ

Разработка эффективных методов численного расчета коэффициентов Ми имеет достаточно длинную историю (см., например, [115, 116]). Коэффициенты Ми рассчитываются по формулам

$$a_n = \frac{m^2 j_n(mx_s) [x_s j_n(x_s)]' - j_n(x_s) [mx_s j_n(mx_s)]}{m^2 j_n(mx_s) [x_s h_n^{(1)}(x_s)]' - h_n^{(1)}(x_s) [mx_s j_n(mx_s)]} \quad (\text{П.2.1a})$$

$$b_n = \frac{j_n(mx_s) [x_s j_n(x_s)]' - j_n(x_s) [mx_s j_n(mx_s)]}{j_n(mx_s) [x_s h_n^{(1)}(x_s)]' - h_n^{(1)}(x_s) [mx_s j_n(mx_s)]} \quad (\text{П.2.1б})$$

где  $j_n(z)$ ,  $y_n(z)$  и  $h_n^{(1,2)}$  это сферические функции Бесселя. Штрих обозначает производную по аргументу в скобках; длина волны в среде с действительным коэффициентом преломления  $n_b$ ,  $\Im n_b = 0$  равна  $\lambda_b = \lambda_0 / n_b$ . Два параметра теории Ми обозначены как  $x_s = 2\pi r_0 / \lambda_b$  и  $z = mx_s$ , где  $m = n_s / n_b$ . Комплексный коэффициент преломления материала сферы  $n_s = n'_s - in''_s$  связан с диэлектрической проницаемостью материала сферы  $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$  формулами [117]

$$n'_s = \sqrt{\frac{\varepsilon'}{2} + \sqrt{\left(\frac{\varepsilon'}{2}\right)^2 + \left(\frac{\varepsilon''}{2}\right)^2}} = \sqrt{\frac{\varepsilon'}{2} + \sqrt{\left(\frac{\varepsilon'}{2}\right)^2 + \left(\frac{2\pi\sigma}{\omega}\right)^2}}, \quad (\text{П.2.2a})$$

$$n''_s = \sqrt{-\frac{\varepsilon'}{2} + \sqrt{\left(\frac{\varepsilon'}{2}\right)^2 + \left(\frac{\varepsilon''}{2}\right)^2}} \quad (\text{П.2.2б})$$

где  $\sigma$  удельная электрическая проводимость материала сферы.

Коэффициенты рассеяния (П.2.1) можно несколько упростить, введя функции Риккати-Бесселя  $\psi_n(z) = zj_n(z)$  и  $\zeta_n(z) = zh_n^{(1)}(z)$

$$a_n = \frac{m\psi_n(mx_s)\psi'_n(x_s) - \psi_n(x_s)\psi'_n(mx_s)}{m\psi_n(mx_s)\zeta'_n(x_s) - \zeta_n(x_s)\psi'_n(mx_s)} \quad (\text{П.2.3a})$$

$$b_n = \frac{\psi_n(mx_s)\psi'_n(x_s) - m\psi_n(x_s)\psi'_n(mx_s)}{\psi_n(mx_s)\zeta'_n(x_s) - m\zeta_n(x_s)\psi'_n(mx_s)} \quad (\text{П.2.36})$$

Заметим, что  $a_n$  и  $b_n$  исчезают при  $m \rightarrow 1$ . Так и должно быть - когда частица исчезает, исчезает и рассеянное поле. Для устранения производных  $\psi'_n$  and  $\zeta'_n(z)$  в численных расчетах коэффициентов рассеяния удобно ввести логарифмическую производную  $A_n(z) = \frac{d}{dz} \ln \psi_n(z)$  и используя рекуррентные соотношения

$$\psi'_n(z) = \psi_{n-1}(z) - \frac{n\psi_n(z)}{z}, \quad \zeta'_n(z) = \zeta_{n-1}(z) - \frac{n\zeta_n(z)}{z} \quad (\text{П.2.4})$$

переписать (П.2.3) в виде

$$a_n = \frac{\left[ \frac{A_n(mx)}{m} + \frac{n}{x_s} \right] \psi_n(x_s) - \psi_{n-1}(x_s)}{\left[ \frac{A_n(mx)}{m} + \frac{n}{x_s} \right] \zeta_n(x_s) - \zeta_{n-1}(x_s)} \quad (\text{П.2.5a})$$

$$b_n = \frac{\left[ mA_n(mx) + \frac{n}{x_s} \right] \psi_n(x_s) - \psi_{n-1}(x_s)}{\left[ mA_n(mx) + \frac{n}{x_s} \right] \zeta_n(x_s) - \zeta_{n-1}(x_s)} \quad (\text{П.2.5б})$$

В качестве примера покажем вывод формулы (П.2.5a). Преобразуем (П.2.3a)

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{m\psi_n(mx_s)\psi'_n(x_s) - \psi_n(x_s)\psi'_n(mx_s)}{m\psi_n(mx_s)\zeta'_n(x_s) - \zeta_n(x_s)\psi'_n(mx_s)} = \frac{\psi_n(mx_s)}{\psi_n(mx_s)} \frac{m\psi'_n(x_s) - \psi_n(x_s)A_n(mx_s)}{m\zeta'_n(x_s) - \zeta_n(x_s)A_n(mx_s)} \\ &= \frac{m\psi_{n-1}(x_s) - m\frac{n}{x_s}\psi_n(x_s) - \psi_n(x_s)A_n(mx_s)}{m\zeta_{n-1}(x_s) - m\frac{n}{x_s}\zeta_n(x_s) - \zeta_n(x_s)A_n(mx_s)} = \frac{-m}{-m} \times (\text{П.5a}) \end{aligned}$$

Логарифмическая производная удовлетворяет рекуррентным соотношениям как следствие известных рекуррентных соотношений для сферических функций Бесселя (см. ниже)



$$A_{n-1}(z) = \frac{n}{z} - \frac{1}{A_n(z) + \frac{n}{z}}, \quad A_n(z) = -\frac{n}{z} + \frac{1}{\frac{n}{z} - A_{n-1}(z)} \quad (\text{П.2.6})$$

Действительно

$$A_n(z) = \frac{d}{dz} \ln \psi_n(z) = \frac{\psi_n'}{\psi_n} = \frac{\psi_{n-1}}{\psi_n} - \frac{n}{z}, \quad A_{n-1} = \frac{\psi_{n-1}'}{\psi_{n-1}} = \frac{\psi_{n-2}}{\psi_{n-1}} - \frac{n-1}{z},$$

$$\frac{\psi_{n-1}}{\psi_n} = A_n + \frac{n}{z}, \quad \frac{\psi_{n-2}}{\psi_{n-1}} = A_{n-1} + \frac{n-1}{z} \quad \text{что и ведет к (П.2.6).}$$

Например

$$A_1(z) = \frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_0(z)}{\psi_1(z)} - \frac{1}{z} = -\frac{1}{z} + \frac{\sin z}{\frac{1}{z} \sin z - \cos z} = -\frac{1}{z} + \frac{1 - \exp(-i2z)}{\frac{1}{z} [1 - \exp(-i2z)] - i [1 + \exp(-i2z)]} \quad (\text{П.2.7})$$

В пределе  $x \rightarrow 0$  коэффициенты Ми (П.2.5) принимают вид [82]

$$a_n \approx i \frac{n+1}{(2n-1)!! (2n+1)!!} \frac{m^2-1}{nm^2+n+1} x^{2n+1}, \quad (\text{П.2.8a})$$

$$b_n \approx i \frac{m^2-1}{(2n+3) [(2n+1)!!]^2} x^{2n+3} \quad (\text{П.2.8б})$$

где

$$(2k)!! = 2 \cdot 4 \cdot 6 \cdot \dots \cdot 2k = \prod_{i=1}^k 2i = 2^k k!, \quad (\text{П.2.9a})$$

$$(2k+1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2k+1) = \prod_{i=0}^k (2i+1) = \frac{(2k+1)!}{2^k k!}, \quad \text{и } 0!! = 1. \quad (\text{П.2.9б})$$

В приближении Рэлея для малых сфер  $r_0 k_0 \ll 1$  для первых коэффициентов известна другая асимптотика [68]

$$a_1 \approx -i \frac{2x^3}{3} \frac{m^2-1}{m^2+2} + i \frac{2x^5}{5} \frac{(m^2-2)(m^2-1)}{(m^2+2)^2} + \frac{4x^6}{9} \left( \frac{m^2-1}{m^2+2} \right)^2 \quad (\text{П.2.10a})$$

$$b_1 \approx -i \frac{x^5}{45} (m^2-1) \quad (\text{П.2.10б})$$

Рекуррентные соотношения для сферических функций Бесселя первого  $j_n(z)$ , второго  $y_n(z)$  и третьего (функции Ханкеля)  $h_n^{(1,2)}(z) = j_n(z) \pm iy_n(z)$  рода  $G_n = \{j_n, y_n, h_n^{(1,2)}\}$  имеют вид [118]

$$G_{n-1}(z) + G_{n+1}(z) = \frac{2n+1}{z} G_n(z), \quad (2n+1) \frac{d}{dz} G_n(z) = nG_{n-1}(z) - (n+1)G_{n+1}(z) \quad (\text{П.2.11})$$

Например, для нулевого и первого порядков

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z}, \quad j_1(z) = \frac{\sin z}{z^2} - \frac{\cos z}{z}; \quad (\text{П.2.12})$$

$$y_0(z) = -\frac{\cos z}{z}, \quad y_1(z) = -\frac{\cos z}{z^2} - \frac{\sin z}{z} \quad (\text{П.2.13})$$

Функции Ханкеля имеют асимптотики [68] для уходящей

$$h_n^{(1)}(kr) \approx \frac{(-i)^n e^{ikr}}{ikr} \quad (\text{П.2.14})$$

и приходящей

$$h_n^{(2)}(kr) \approx -\frac{i^n e^{-ikr}}{ikr} \quad (\text{П.2.15})$$

сферической волны.

Аналогичные рекуррентные соотношения известны для сферических функций Риккати-Бесселя [118]

$$\psi_n(z) = zj_n(z), \quad zy_n(z), \quad zh_n^{(1)}(z) = zj_n(z) + izy_n(z) = \zeta_n(z) \quad (\text{П.2.16})$$

$$\psi_0(z) = \sin z, \quad \psi_1(z) = \frac{\sin z}{z} - \cos z, \quad (\text{П.2.17})$$

$$\zeta_0(z) = \sin z - i \cos z, \quad \zeta_1(z) = \frac{\sin z}{z} - \cos z - i \left( \frac{\cos z}{z} + \sin z \right) \quad (\text{П.2.18})$$

**ПРИЛОЖЕНИЕ 3**  
**ЧАСТОТНАЯ ДИСПЕРСИЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ**  
**МАТЕРИАЛА ЧАСТИЦ**

На рис. ПЗ.1 приведены графики частотной дисперсии действительной  $n'$  и мнимой  $n''$  частей комплексного показателя преломления Au в зависимости от энергии фотонов по данным таблиц [119]. На рис. ПЗ.2 приведены графики частотной зависимости диэлектрической

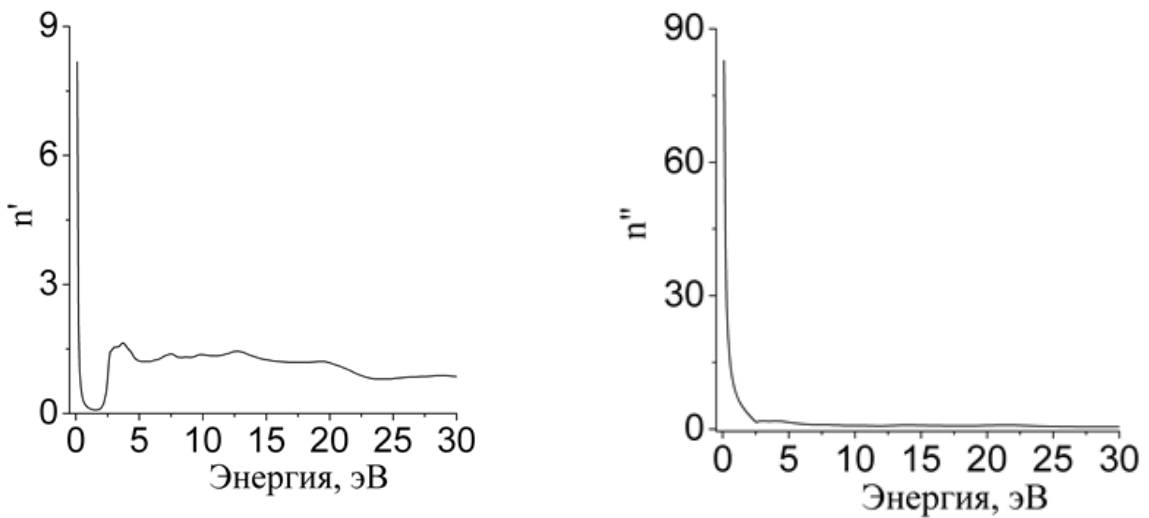


Рисунок ПЗ.1. – Действительная  $n'$  (левая панель) и мнимая  $n''$  (правая панель) части показателя преломления Au в зависимости от энергии фотонов от 0.1 до 30 эВ [119].

проницаемости Au  $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$ , пересчитанной по формулам  $\varepsilon' = n'^2 - n''^2$  и  $\varepsilon'' = 2n'n''$ .

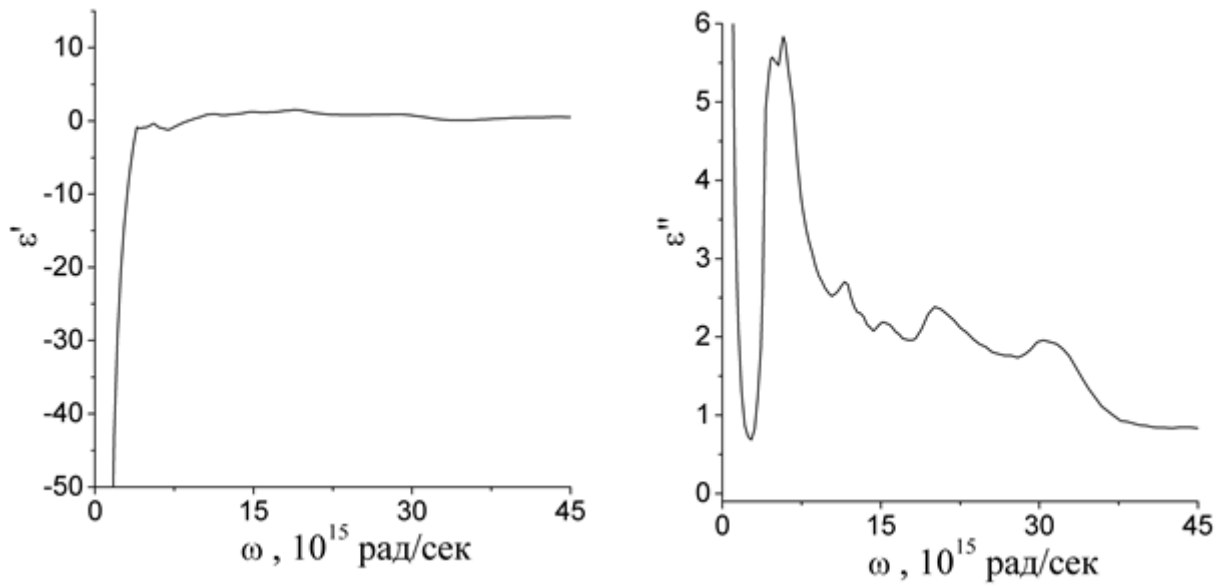
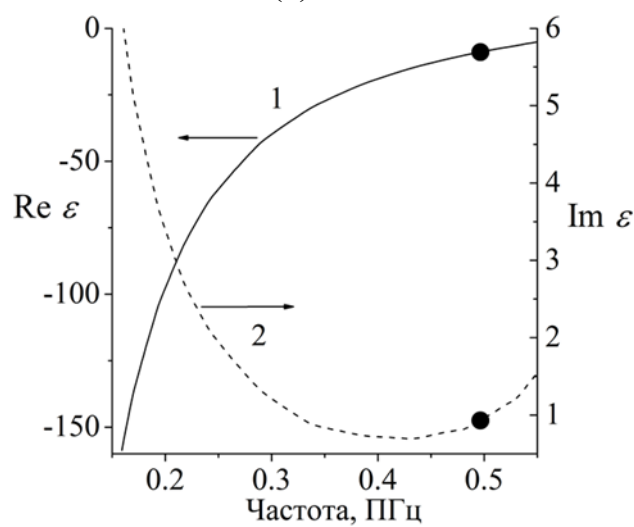
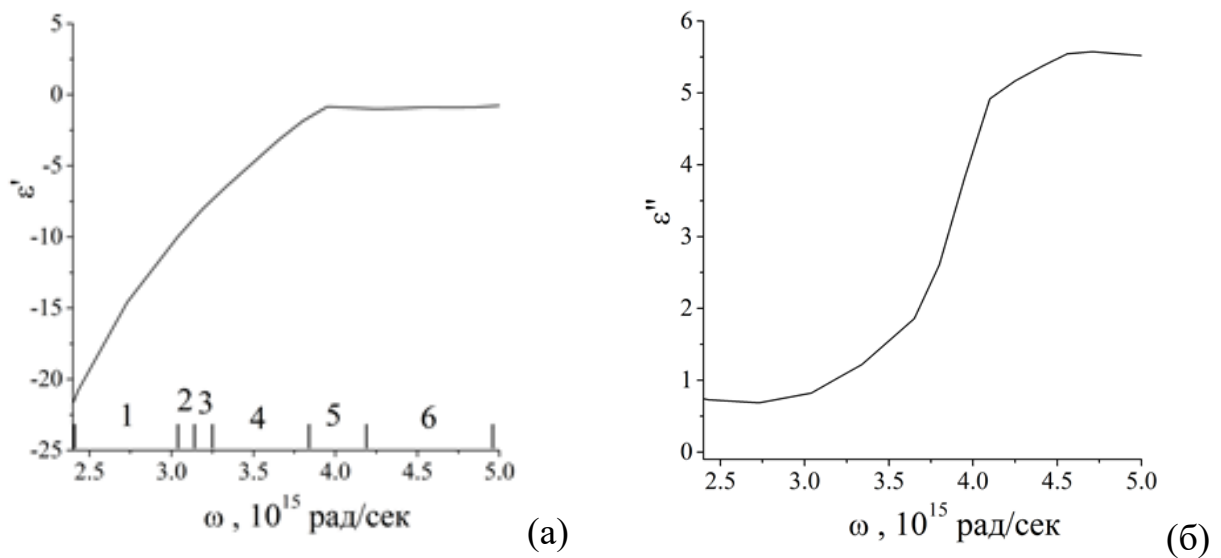


Рисунок ПЗ.2. – Действительная (левая панель) и мнимая (правая панель) части диэлектрической проницаемости Au.

На рис.ПЗ.3 более детально показан частотный диапазон видимого света.



(B)

Рисунок ПЗ.3. – Действительная (а) и мнимая (б) части диэлектрической проницаемости Au в видимом диапазоне частот ЭМ излучения. Цифрами помечены диапазоны красного (1), оранжевого (2), желтого (3), зеленого (4), синего (5) и фиолетового цвета видимого ЭМ излучения. На панели (в) символами (●) отмечена действительная и мнимая части диэлектрической проницаемости Au при резонансной частоте (см. Таблицу 3.2.1).

На рис.ПЗ.4 – ПЗ.6 приведены зависимости диэлектрической проницаемости Au, Ag и Al от длины волны ЭМ излучения.

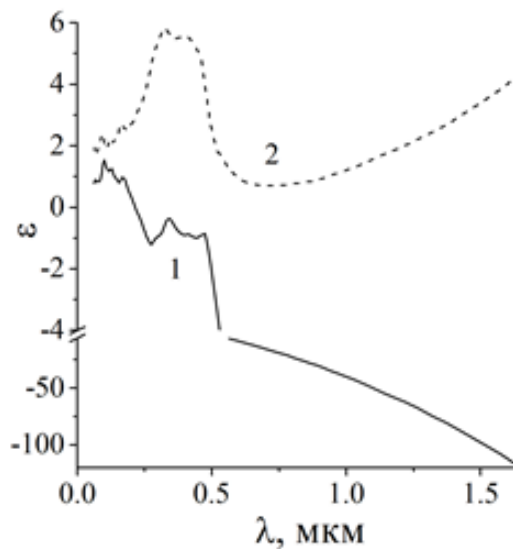


Рисунок ПЗ.4. – Действительная (1) и мнимая (2) части диэлектрической проницаемости Au в зависимости от длины волны ЭМ излучения.

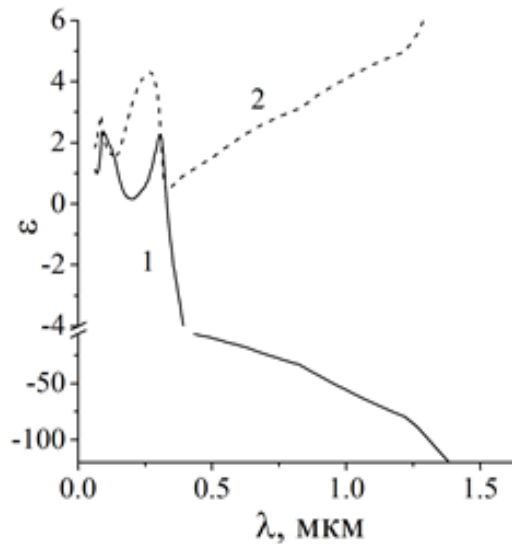


Рисунок ПЗ.5. – Действительная (1) и мнимая (2) части диэлектрической проницаемости Ag в зависимости от длины волны ЭМ излучения.

На рис. ПЗ.7 приведена зависимость диэлектрической проницаемости Si от частоты ЭМ излучения.

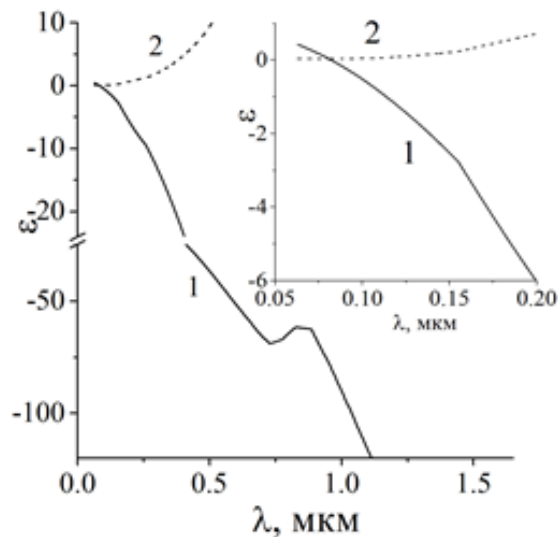


Рисунок ПЗ.6. – Действительная (1) и мнимая (2) части диэлектрической проницаемости Al в зависимости от длины волны ЭМ излучения.

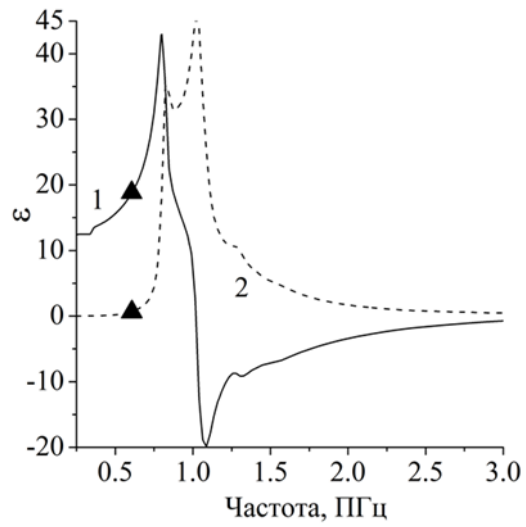


Рисунок ПЗ.7. – Действительная (1) и мнимая (2) части диэлектрической проницаемости Si в зависимости от частоты ЭМ излучения. Символами (▲) отмечена действительная и мнимая части диэлектрической проницаемости Si при резонансной частоте (см. Таблицу 3.2.1).

## ПРИЛОЖЕНИЕ 4

### СОБСТВЕННЫЕ МОДЫ ДИМЕРА

Алгебраическая система уравнений для самосогласованных токов

$$I^{(j)} = a_j + \sum_{j=1}^N \sum_{j' \neq j=1}^N a_{jj'} I^{(j')} \quad (2.1.5)$$

для димера имеет вид

$$\begin{cases} I^{(1)} - a_{12} I^{(2)} = a_1 \\ I^{(2)} - a_{21} I^{(1)} = a_2 \end{cases} \quad (П.4.1)$$

или

$$\begin{pmatrix} 1 & -a_{12} \\ -a_{21} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I^{(1)} \\ I^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \quad (П.4.2)$$

,где  $a_{21} = a_{12}$ . Детерминант и решение системы даются соотношениями

$$\det \begin{pmatrix} 1 & -a_{12} \\ -a_{21} & 1 \end{pmatrix} = 1 - a_{12}^2 \quad (П.4.3)$$

$$I^{(1)} = \frac{1}{1-a_{12}^2} \begin{vmatrix} a_1 & -a_{12} \\ a_2 & 1 \end{vmatrix} = \frac{a_1 + a_{12} a_2}{1-a_{12}^2} \quad (П.4.4)$$

$$I^{(2)} = \frac{1}{1-a_{12}^2} \begin{vmatrix} 1 & a_1 \\ -a_{12} & a_2 \end{vmatrix} = \frac{a_2 + a_{12} a_1}{1-a_{12}^2} \quad (П.4.5)$$

Задача нахождения собственных мод и собственных значений формулируется как:

$$\begin{cases} I^{(1)} - a_{12} I^{(2)} = \lambda I^{(1)} \\ I^{(2)} - a_{21} I^{(1)} = \lambda I^{(2)} \end{cases} \quad (П.4.6)$$

Решение ищем в блоховском виде

$$I^{(2)} = p I^{(1)} \quad (П.4.7)$$

Подстановка (П.4.7) в (П.4.6) даёт

$$1 - a_{12} p = \lambda, \quad p - a_{12} = \lambda p \quad (П.4.8)$$

Умножим второе уравнение на  $p$

$$p^2 - a_{12} p = \lambda p^2 \quad (П.4.9)$$



Соотношение (П.4.9) совпадает с первым соотношением в (П.4.8) при  $p^2 = 1$  или  $p = \pm 1$ . Следовательно:

$$p = +1, \quad I^{(2)} = I^{(1)}, \quad 1 - a_{12} = \lambda_1 \quad (\text{П.4.10a})$$

$$p = -1, \quad I^{(2)} = -I^{(1)}, \quad 1 + a_{12} = \lambda_2 \quad (\text{П.4.10б})$$

Таким образом, димер имеет две собственные моды и два собственных значения

$$(I^{(1)}_1, I^{(2)}_1) = (1, 1), \quad \lambda_1 = 1 - a_{12} \quad (\text{П.4.11a})$$

$$(I^{(1)}_2, I^{(2)}_2) = (1, -1), \quad \lambda_2 = 1 + a_{12} \quad (\text{П.4.11б})$$