

Інститут радіофізики та електроніки ім. О. Я. Усикова  
Національна академія наук України

Інститут радіофізики та електроніки ім. О. Я. Усикова  
Національна академія наук України

Кваліфікаційна наукова  
праця на правах рукопису

НАТАРОВ ДЕНИС МИХАЙЛОВИЧ

УДК 537.86 : 535.417.2

## ДИСЕРТАЦІЯ

# ПЛАЗМОННІ ТА ГРАТКОВІ МОДИ В РОЗСІЯННІ, ПОГЛИНАННІ ТА ВИПРОМІНЮВАННІ СВІТЛОВИХ ХВИЛЬ СКІНЧЕННИМИ РЕШІТКАМИ З НАНОНИТОК

01.04.03 – радіофізика

Подається на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

\_\_\_\_\_ Д. М. Натаров

Науковий керівник Носич Олександр Йосипович  
доктор фізико-математичних наук, професор

Харків – 2018

## АНОТАЦІЯ

*Натаров Д. М.* Плазмонні та граткові моди в розсіянні, поглинанні та випромінюванні світлових хвиль скінченними решітками з нанониток. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.03 «Радіофізика». – Інститут радіофізики та електроніки ім. О.Я. Усикова НАН України, Харків, 2018.

Розвиток нанотехнологій дозволив створювати частинки, що менші за довжину хвилі навіть у світловому діапазоні, та решітки з них. Завдяки сучасним технологіям напилення, осадження й витравлювання, тонкі нанонитки та нанострічки з благородних металів міцно ввійшли до складу багатьох приладів терагерцевого та світлового діапазонів довжин хвиль, наприклад, наноантен та біосенсорів. Також активно розвивається напрямок створення та моделювання нанолазерів. Явища, що спостерігаються при розсіянні, поглинанні чи випромінюванні світлових хвиль металевими нанорозмірними об'єктами, пов'язані, головним чином, зі збудженням локалізованих поверхневих плазмонних мод. Наприклад, при розробці біосенсорів плазмонні ефекти дозволяють суттєво посилити можливості виявлення, ідентифікації та діагностики біологічних речовин, наявних в малих концентраціях. Але особливу увагу притягують періодичні структури, тобто решітки з нанониток та нанострічок. Це пов'язано з нещодавно виявленими для них ефектами аномального відбиття, проходження, поглинання й випромінювання світла, а також гігантських ефектів Фарадея, Керра, Керкера, нелінійної генерації другої гармоніки та ін.

Виготовлення та експериментальне дослідження описаних вище приладів вимагає величезних фінансових витрат, тому їхнє попереднє моделювання та теоретичне дослідження фізичних ефектів, що спостерігаються в них, є обов'язковими та критично важливими.

Дану роботу присвячено аналізу характеристик розсіяння та поглинання електромагнітних хвиль світлового діапазону скінченними

решітками з діелектричних та срібних нанониток, а також аналізу частот, порогів самозбудження, полів власних лазерних мод таких решіток з активними зонами. Посилення у активній зоні моделюється через уявну частину показника заломлення, яка має негативне значення. Її порогове значення – поріг самозбудження – разом з довжиною хвилі формують пару власних значень лазерної моди. Аналіз проводиться за допомогою граничних задач для гармонічних лінійних рівнянь Максвелла, які зводяться до матричних рівнянь Фредгольма другого роду, що дозволяє отримати результат з заданою точністю. В роботі вивчаються ґраткові резонанси в задачі розсіяння, а також ґраткові моди в лазерній задачі на власні значення, які відповідають комплексним полюсам функції поля скінченно-періодичної структури. Демонструється посилення ефектів, пов'язаних з періодичністю, при збільшенні числа періодів в решітці, а також порівнюються скінченні та нескінченні решітки з нанониток. Для одиночних срібних нанониток і решіток з них вивчаються також плазмонні резонанси в задачі розсіяння та плазмонні моди нанолазерів на основі срібної нанонитки та нанотрубки з активними зонами. Проводиться класифікація лазерних мод, аналізуються їхні ближні поля та залежності порогів самозбудження та довжин хвиль від параметрів нанолазера.

**Далі перелічено нові результати,** що отримано при виконанні цієї дисертаційної роботи.

Вперше знайдено надвисокодобротні ґраткові резонанси при розсіянні Н-поляризованих хвиль скінченними решітками з діелектричних нанониток та показано, що їхня добротність збільшується при збільшенні кількості ниток в решітці.

Вперше продемонстровано наявність двох типів резонансів: на плазмонних та ґраткових модах при розсіянні та поглинанні Н-поляризованих електромагнітних хвиль скінченними решітками з металевих нанониток у світловому діапазоні, та вивчено їхній взаємний

вплив та вплив геометричних й матеріальних параметрів решітки на характеристики розсіяння та поглинання.

Вперше проведено порівняльний аналіз коефіцієнтів відбиття скінченних решіток з металевих нанониток з відповідними нескінченними.

Вивчено спроможність фокусування світлових хвиль дискретними параболічними рефлекторами з металевих нанониток за умови збудження плазмонного резонансу на кожній з ниток.

Вперше продемонстровано «ознаку періодичності», що з'являється на рельєфах перерізу повного розсіяння як функції довжини хвилі та кута падіння при наявності періодичного ланцюжка з нанониток у «хмарі» з доволі розташованих ниток.

Вперше знайдено та класифіковано власні моди нанолазерів на основі срібної нанонитки та нанотрубки з активними оболонкою та сердечником, вивчено вплив геометричних параметрів таких нанолазерів на частоти та пороги самозбудження їхніх власних мод. Розроблено рекомендації щодо розробки одномодового плазмонного нанолазера на основі металеві нанотрубки.

Вперше знайдено ґраткові лазерні моди решіток зі скінченного числа діелектричних або срібних нанониток, що мають низькі пороги самозбудження, вивчено вплив геометричних та матеріальних параметрів на їхні частоти та пороги самозбудження.

**Ключові слова:** нанонитка, нанолазер, скінченна решітка, резонанс, плазмонна мода, ґраткова мода, активна зона, поріг самозбудження.

## SUMMARY

*Natarov D. M.* Plasmon and grating modes in the scattering, absorption and emission of the optical waves by finite nanowire gratings. – Manuscript of qualifying scientific work.



Thesis for the degree of Candidate in Physics and Mathematics with the specialization 01.04.03 “Radiophysics”. – O.Ya. Usikov Institute for Radiophysics and Electronics of NAS of Ukraine, Kharkiv, 2018.

The development of nanotechnology has allowed the fabrication of particles that are smaller than wavelengths even in the light range and gratings of such particles. Thanks to the modern technologies of electron-beam epitaxy, deposition and etching, thin nanowires and nanostrips from noble metals have firmly been included in many devices of the terahertz and visible light wavelength ranges, for example, nanoantennas and biosensors. Also, the field of development and modeling of nanolasers is developing actively. The effects observed in the scattering, absorption or emission of light waves by metallic nanoscale objects are mainly connected with the excitation of localized surface plasmon modes. For example, in the development of biosensors, plasmon effects can significantly enhance the detection, identification and diagnosis of biological substances, which are presented in small concentrations. Still special attention is paid to periodic structures, that is, gratings of nanoparticles and nanowires. This is due to the recently discovered effects of abnormal reflection, transmission, absorption and emission of light, as well as the giant effects of Faraday, Kerr, Kerker, nonlinear generation of the second harmonic, and others, all related to specific grating-mode resonances of periodic nanostructures.

The manufacture and experimental study of the devices described above entails high financial costs, therefore their preceding modeling and the theoretical study of the physical effects observed in them are mandatory and critically important.

This work is dedicated to the analysis of characteristics of scattering and absorption of optical waves by finite gratings of dielectric and silver nanowires, as well as analysis of frequencies, self-excitation thresholds and fields of the lasing eigen-modes of such gratings with active regions. The gain in the active region is characterized by the imaginary part of refractive index, which is negative. Its threshold value – self-excitation threshold, for brevity – forms the eigenvalue of

the lasing mode together with the wavelength. The analysis is performed using the boundary value problems for linear time-harmonic Maxwell's equations, which are reduced to the Fredholm second kind matrix equations, that guarantees controlled accuracy of numerical results. We study grating resonances in the scattering and absorption characteristics of the scattering problem, as well as the grating modes in the lasing eigenvalue problem, which correspond to the complex poles of the field function of a periodic structure. We demonstrate amplification of effects associated with periodicity with increasing number of periods in the grating, and compare finite and infinite gratings of nanowires. For stand-alone silver nanowires and gratings of them, we study plasmon resonances in the scattering problem and plasmon modes of nanolasers based on silver nanowires and nanotubes with active regions. We classify laser modes, analyze their near fields and the dependences of self-excitation thresholds and wavelengths on the parameters of nanolaser.

**The main outcomes of the thesis** are the following:

The grating resonances in the scattering of H-polarized electromagnetic waves by finite gratings from dielectric nanowires have been investigated.

The presence of two types of resonances has been demonstrated: on the plasmon and the grating modes in the scattering and absorption of H-polarized electromagnetic waves by finite metal nanowires in the light range. We have studied their mutual influence and the influence of geometric and material parameters of the grating on the scattering and absorption characteristics.

A comparative analysis of the reflection coefficients of finite gratings of metallic nanowires and corresponding infinite ones has been carried out.

The ability to focus light waves using discrete parabolic reflectors of metal nanowires has been studied. It has been demonstrated that the plasmon resonance is excited on each of the wires; in contrast, grating resonances do not play a role in the focusing.

It has been found a "signature of periodicity" on the reliefs of the total scattering cross-section as a function of the wavelength and the angle of incidence

in the presence of a periodic chain of nanowires in a "cloud" of arbitrarily located nanowires.

The lasing modes of nanolasers based on silver nanowires and nanotubes with active shell and active core have been found and classified. It has been studied the influence of geometrical parameters of such nanolasers on the frequency and self-excitation thresholds of their eigenmodes. Recommendations on the design of single-mode plasmonic nanotube laser have been formulated.

The grating modes of the gratings of finite number of dielectric or silver nanowires with low self-excitation thresholds have been found. We have studied the influence of geometric and material parameters on their frequencies and self-excitation thresholds.

**Key words:** nanowire, nanolaser, finite grating, resonance, plasmon mode, grating mode, active region, self-excitation threshold.

#### **Список основних публікацій здобувача за темою дисертації**

1. D.M. Natarov, V.O. Byelobrov, R. Sauleau, T.M. Benson, A.I. Nosich. Periodicity-induced effects in the scattering and absorption of light by infinite and finite gratings of circular silver nanowires // *Optics Express*. – 2011. - Vol. 19, No. 22. - P. 22176-22190.
2. D.M. Natarov, R. Sauleau, A.I. Nosich. Periodicity-enhanced plasmon resonances in the scattering of light by sparse finite grids of circular silver nanowires // *IEEE Phot. Tech. Letters*. - 2012. - Vol. 24, No. 1. - P. 43-45.
3. D.M. Natarov, R. Sauleau, A.I. Nosich. Resonance scattering and absorption of light by finite two-period gratings of circular silver nanowires // *Int. J. Semiconductor Physics, Quantum Electronics, and Optoelectronics*. – 2012. - Vol. 15, No. 3. - P. 204-208.
4. D.M. Natarov, R. Sauleau, M. Marciniak, A.I. Nosich. Effect of periodicity in the resonant scattering of light by finite sparse configurations of many silver nanowires // *Plasmonics*. – 2014. - Vol. 9, No. 2. - P. 389-407.

5. D.M. Natarov. Modes of a core-shell silver wire plasmonic nanolaser beyond the Drude formula // IOP J. of Optics. - 2014. - Vol. 16, No. 6. - P. 075002/6.
6. D.M. Natarov, M. Marciniak, R. Sauleau, A.I. Nosich. Seeing the order in a mess: optical signature of periodicity in a cloud of plasmonic nanowires // Optics Express. – 2014. - Vol. 22, No. 23. - P. 28190–28198.
7. E.A. Velichko, D.M. Natarov. Localized versus delocalized surface plasmons: dual nature of optical resonances on a silver circular wire and a silver tube of large diameter // IOP J. of Optics. – 2018. - Vol. 20, No. 7. – P. 075002/9.
8. D.M. Natarov, O.V. Shapoval, M. Marciniak, A.I. Nosich. Rayleigh anomalies in the E-polarized scattering by finite flat gratings of silver nanostrips or nanowires // Proc. Int. Conf. Mathematical Methods in Electromagnetic Theory (MMET-12), Kharkiv, 2012, pp. 44-47.
9. D.M. Natarov, M. Marciniak, R. Sauleau. Modeling of discrete parabolic reflector made of sub-wavelength plasmonic wires // Proc. Int. Symp. Physics and Engineering of Microwaves, MM, and Sub-MM Waves (MSMW-13), Kharkiv, 2013, pp. 455-457.
10. D.M. Natarov. Electromagnetic analysis of a silver nanowire laser with a concentric active region // Proc. URSI General Assembly and Scientific Symp. (URSI-GASS-2014), Beijing, 2014, BP1.37.
11. D.M. Natarov. Grating resonances in the scattering of light by periodically structured dielectric nanowires // Proc. Int. Conf. Mathematical Methods in Electromagnetic Theory (MMET\*2016), Lviv, 2016, pp. 236-238.
12. D.M. Natarov. Lasing thresholds of plasmonic modes of a silver tube nanolaser with active shell and core // Proc. IEEE Ukraine Conf. Electrical Computer Eng. (UKRCON-2017), Kiev, 2017, pp. 748-751.
13. D.M. Natarov. Analysis of eigenmodes of laser based on finite quantum nanowire grating // Int. Workshop Direct and Inverse Problems of Electromagnetic and Acoustic Wave Theory (DIPED-2018), Tbilisi, 2018, pp. 76-79.

## ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ	11
ВСТУП	12
РОЗДІЛ 1 ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ І МЕТОДІВ ДОСЛІДЖЕННЯ	22
1.1 Методи та особливості аналізу розсіяння електромагнітних хвиль на скінченних решітках з кругових ниток	22
1.2 Діелектрична функція срібла у світловому діапазоні та плазмонні резонанси	27
1.3 Ґраткові резонанси в періодичних структурах	31
1.4 Характеристики розсіяння та поглинання, оптична теорема	33
1.5 Наноласери як метало-діелектричні резонатори з активними зонами	38
РОЗДІЛ 2 РОЗСІЯННЯ ТА ПОГЛИНАННЯ СВІТЛОВИХ ХВИЛЬ ЛІНІЙНИМИ РЕШІТКАМИ З НАНОНИТОК	42
2.1 Зведення задачі розсіяння хвиль на скінченному числі кругових ниток до фредгольмової СЛАР другого роду	42
2.2 Одиночна діелектрична або срібна нанонитка в однорідному середовищі	50
2.3 Лінійна решітка зі скінченного числа діелектричних нанониток	59
2.4 Лінійна решітка зі скінченного числа срібних нанониток	67
Висновки до розділу 2	80
РОЗДІЛ 3 РОЗСІЯННЯ ТА ПОГЛИНАННЯ СВІТЛОВИХ ХВИЛЬ СКЛАДНИМИ СКІНЧЕННИМИ ПЕРІОДИЧНИМИ СТРУКТУРАМИ ЗІ СРІБНИХ НАНОНИТОК	82
3.1 Багатошарові скінченні решітки	82
3.2 Дискретний кут	86
3.3 Дискретний хрест	92

3.4 Двоперіодичні решітки	100
3.5 Дискретний параболічний рефлектор з нанониток	107
3.6 Лінійна решітка у псевдо-випадковій хмарі зі срібних нанониток	112
Висновки до розділу 3	121
<b>РОЗДІЛ 4 ЧАСТОТИ, ПОРОГИ САМОЗБУДЖЕННЯ ТА ПОЛЯ МОД ПЛАЗМОННИХ ЛАЗЕРІВ НА ОСНОВІ СРІБНИХ НАНОНИТОК І НАНОТРУБОК</b>	<b>123</b>
4.1 Постановка задачі та основні рівняння для мод двовимірних нанолазерів кругового перерізу	123
4.2 Моді нанолазера на основі срібної нанонитки: порівняння кількох моделей опису діелектричної функції срібла	128
4.3 Моді нанолазера на основі срібної нанонитки: залежність частоти та порога самозбудження від параметрів	132
4.4 Моді нанолазера на основі срібної нанотрубки з активними сердечником та оболонкою	140
4.5 Постановка задачі та основні рівняння для скінченної решітки з нанониток з активними оболонками	146
4.6 Моді лазера на основі скінченної решітки з квантових нанониток	150
4.7 Моді лазера на основі скінченної решітки зі срібних нанониток з активними оболонками	155
Висновки до розділу 4	161
<b>ВИСНОВКИ</b>	<b>163</b>
<b>СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ</b>	<b>165</b>
<b>ДОДАТОК А СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ</b>	<b>182</b>
<b>ДОДАТОК Б КООРДИНАТИ ЦЕНТРІВ НИТОК ПСЕВДО-ВИПАДКОВОЇ ХМАРИ</b>	<b>186</b>

**ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ**

АР – аномалія Релея

ГМ – ґраткова мода

ДС – діаграма спрямованості

ЕМ – електромагнітний

ІР – інтегральне рівняння

ЛЗВЗ – лазерна задача на власні значення

ЛПП – локалізований поверхневий плазмон

ОТ – оптична теорема

ПЗР – переріз зворотного розсіяння

ПП – переріз поглинання

ППР – переріз повного розсіяння

СК – система координат

СЛАР – система лінійних алгебраїчних рівнянь

## ВСТУП

Дана робота присвячена аналізу розсіяння та поглинання світла скінченими решітками різних форм, побудованих з нанорозмірних діелектричних та срібних ниток, а також аналізу власних мод, їх частот та порогів самозбудження для таких решіток як скінчено-періодичних відкритих резонаторів. Аналіз проводиться за допомогою граничних задач для гармонійних в часі лінійних рівнянь Максвелла, які зводяться до матричних рівнянь Фредгольма другого роду.

**Актуальність теми.** Загальна тенденція розвитку радіофізики рухається в бік опанування короткохвильових діапазонів, тобто терагерцевого, інфрачервоного та світлового. Розвиток нанотехнологій дозволив створювати решітки з об'єктів, що менші за довжину хвилі навіть у світловому діапазоні. Також розвиток нанорозмірних матеріалів та приладів народив такі нові напрями, як нанофотоніка та нанооптика. Резонансні явища при розсіянні та поглинанні світлових хвиль металевими нанорозмірними об'єктами пов'язані, головним чином, зі збудженням поверхневих плазмонних резонансів, й мають широкий спектр практичних застосувань. Наприклад, при розробці біосенсорів, плазмонні ефекти дозволяють суттєво посилити можливості виявлення, ідентифікації та діагностики біологічних речовин, наявних в малих концентраціях.

Завдяки сучасним технологіям напилення, осадження й витравлювання, тонкі нанонитки та нанострічки з благородних металів міцно ввійшли у склад багатьох приладів терагерцевого та світлового діапазонів довжин хвиль, наприклад, наноантенн та біосенсорів. При цьому періодичні структури, тобто решітки з нанониток та нанострічок, притягують особливу увагу. Це пов'язано з нещодавно виявленими для них ефектами аномального відбиття, проходження, поглинання й випромінювання світла, а також гігантських ефектів Фарадея, Керра, Керкера, нелінійної генерації другої гармоніки та ін. В загальному випадку такі явища мають вигляд резонансів Фано та спостерігаються поблизу аномалій Релея відповідних нескінченних решіток.



На даний момент теоретичне вивчення цих явищ на моделях нескінчених решіток показало, що вони зумовлені існуванням специфічних високо добротних мод, що отримали назву ґраткових мод. Ці моди вивчалися зокрема у роботах В.О. Белоброва, Т.Л. Зіненко, О.В. Шаповал та О.Й. Носича отримали назву ґраткових мод. Важливо відмітити, що подібне вивчення ґраткових мод для скінчених решіток з нанониток раніше проведено не було.

В даній дисертаційній роботі досліджуються розсіюючі та поглинаючі властивості решіток, що складаються з десятків та сотен нанониток. Для цього використовується широко відоме, можна сказати класичне, розкладання функції поля в ряди Фур'є по азимутальним експонентам в локальних координатах кожної нитки. Використовуючи теореми додання для циліндричних функцій та застосовуючи граничні умови на поверхні кожної нитки, ми отримуємо скінчено-блочне матричне рівняння, в якому кожен блок нескінченний. Проте на відміну від більшості робіт, що використовували цей спосіб, для того, щоб розв'язок мав гарантовану збіжність, у даній роботі невідомі коефіцієнти перенормовуються у такий спосіб, щоб нескінченне матричне рівняння було рівнянням Фредгольма другого роду – тоді кожен його блок може бути усіченим до скінченного числа, і чим більшим буде це число, тим ближче розв'язок буде до точного.

Останнім часом також з'явився новий напрямок досліджень в нанофотоніці, пов'язаний з плазмонними модами – це аналіз та розробка плазмонних нанолазерів, де нанорозмірні металеві частинки, такі як нитки, пластинки чи трубки слугують в якості відкритого резонатору, а активна зона вводиться різними способами. У даній дисертаційній роботі розглянуті властивості власних мод срібних нанониток та нанотрубок, а також решіток з них. Проведено аналіз лазерних мод, їхніх полів, порогів самозбудження та частот за допомогою лазерної задачі на власні значення, введеної та сформульованої на початку 2000-х років в роботах О.І. Смотрової та О.Й. Носича. Цей підхід дозволяє знайти лазерні моди, їхні частоти та пороги

випромінювання за допомогою апарату класичної електродинаміки. У даній роботі знайдено також ґраткові моди нанолазерів на основі решіток з нанониток, що мають низькі пороги самозбудження та представляють величезний інтерес для розробників подібних пристроїв.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами та темами.** Дана робота виконана в лабораторії мікро- і нанооптики відділу квазіоптики ІРЕ ім. О.Я. Усикова НАН України в рамках наступних держбюджетних науково-дослідних робіт, а також цільових і конкурсних програм та тем:

1. Конкурсна наукова тема Міністерства освіти і науки України «Інноваційне чисельне моделювання квазіоптичних фокуруючих систем» (шифр «Фокус», номер держреєстрації 0109U005351, 2009-2010, виконавець).
2. Державна конкурсна цільова програма "Нанотехнології та наноматеріали": «Фундаментальні математичні та чисельні дослідження оптичних електромагнітних полів окремих та зв'язаних мікрорезонаторних лазерів з нанорозмірними активними кулями, нитками та стрічками» (шифр «Світло», номер держреєстрації 0110U004737, 2010-2014, виконавець).
3. Держбюджетна науково-дослідна робота ІРЕ ім. О.Я. Усикова НАН України: «Розробка методів оптики та квазіоптики для встановлення закономірностей та особливо взаємодії терагерцевого випромінювання з фізичними та біологічними об'єктами» (шифр «Ореол», номер держреєстрації 0111U001079, 2012-2016, виконавець).
4. Держбюджетна науково-дослідна робота ІРЕ ім. О.Я. Усикова НАН України: «Розвиток та застосування оптичних і квазіоптичних методів для дослідження процесів генерації і перетворення електромагнітних хвиль терагерцевого, інфрачервоного і видимого діапазонів» (шифр «Ореол-1», номер держреєстрації 0117U004036, 2017-2018, виконавець).
5. Програма наукового обміну НАН України з Держкомітетом з наукових і технічних досліджень Туреччини, спільно з Університетом Бількент,

Анкара ( «Innovative electromagnetic modeling of multielement quasioptical focusing systems - mm and terahertz ranges», #106E209, 2007-2009).

6. Науково-навчальна програма європейського наукового фонду «New frontiers in millimeter/sub-millimeter waves integrated dielectric focusing systems» спільно з Інститутом електроніки та телекомунікацій Університету м. Ренн 1, Франція. Тема «Resonances in the scattering and focusing of waves by periodically structured ensembles of metal and dielectric wires» («Newfocus», 2010).
7. Науково-навчальна програма європейського наукового фонду «New approaches to biochemical sensing with plasmonic nanobiophotonics» спільно з Інститутом фотоніки та електроніки АНЧР, Прага, Чеська республіка. Тема: «Modes of core-shell nanowire and nanotube plasmonic lasers» («Plasmon-Bionanosense», 2015).

Робота також була частково підтримана наступними конкурсними міжнародними стипендіями:

- «Resonant scattering of electromagnetic waves by finite periodic configurations of sub-wavelength circular wires», IEEE APS стипендія для аспірантів, 2011.
- «Broadband resonance absorption and scattering of light for ultrathin plasmonic solar cells and biosensors: modelling and optimization», Міжнародний Вишеградський фонд, Європейський Союз, спільно з Інститутом телекомунікацій, м. Варшава, Польща, 2012-2013.
- «Plasmon and periodicity assisted wideband absorbers for solar cells and biosensors», Rennes Metropole Mobility Grant спільно з Інститутом електроніки та телекомунікацій Університету м. Ренн 1, Франція, 2013.

**Мета та задачі дослідження.** Метою дослідження, по-перше, є вивчення особливостей та закономірностей розсіяння плоских електромагнітних хвиль решітками (одно- та двоперіодичними, у формі дискретного кута, хреста, параболічного рефлектора, у хмарі з довільно розташованих ниток) зі скінченного числа діелектричних або срібних

нанониток кругового перерізу в оптичному діапазоні довжин хвиль, по-друге, вивчення власних мод нанолазерів на основі срібної нанонитки та нанотрубки з активними оболонкою та сердечником (для трубки) та на основі решіток зі скінченного числа квантових (рівномірно активних) та срібних з активною оболонкою нанониток.

У першому випадку розглядається розсіяння та поглинання плоских хвиль двох поляризацій, вивчаються їхні закономірності та особливості при зміні параметрів решіток. У другому випадку шукаються власні поля лазерних мод структур, що вивчаються, і відповідні їм частоти та пороги самозбудження, досліджуються закономірності та особливості їхньої динаміки при зміні параметрів ниток, трубок та решіток з них.

Задля досягнення цих цілей було розглянуто наступні задачі:

- побудова двовимірної математичної моделі розсіяння Н- або Е-поляризованих плоских хвиль на довільному ансамблі зі скінченного числа паралельних діелектричних або срібних ниток кругового перерізу на основі збіжного методу;
- розробка чисельних алгоритмів для розрахунку характеристик розсіювання та поглинання хвиль, а також полів у ближній та дальніх зонах структур, що вивчалися;
- систематичний розрахунок характеристик резонансного розсіювання та поглинання хвиль, а також резонансних полів у ближній та дальніх зонах цих структур;
- розробка чисельних алгоритмів для розрахунку власних полів, частот та порогів самозбудження мод нанолазерів на основі одиночної срібної нитки та трубки з активною зоною та решіток зі скінченного числа квантових чи срібних ниток;
- розрахунок власних полів, частот та порогів самозбудження мод таких нанолазерів.

*Об'єктом дослідження є явища розсіяння та поглинання плоских електромагнітних хвиль скінченими періодичними решітками з круглих*

матеріальних нанониток, а також випромінювання електромагнітних хвиль відкритими активними резонаторами на основі нанониток та решіток з них.

*Предметом дослідження* є резонансні характеристики розсіяння та поглинання хвиль скінченими періодичними решітками з круглих матеріальних нанониток, а також власних мод таких решіток, тобто спектри частот та пороги самозбудження лазерних мод відкритих резонаторів на основі нанониток та решіток з них, разом з їх власними полями.

**Методи дослідження.** В роботі використовуються методи теорії граничних задач класичної електродинаміки. Задача розсіяння хвиль ставиться як гранична задача для функції поля, що задовольняє рівнянням Максвелла з точними граничними умовами, умові випромінювання на нескінченності та умові локальної обмеженості енергії. За допомогою часткового розділення змінних та використання теорем додання для циліндричних функцій, задача пошуку коефіцієнтів розкладання полів зводиться до блочного матричного рівняння Фредгольма другого роду. Кожен блок такого рівняння є нескінченим, але його усічення до числа  $N$  дає збіжність до точного рішення з ростом  $N$ . Лазерна задача на власні значення ставиться з такими ж умовами за відсутності падаючого поля, а частоти та пороги самозбудження лазерних мод відшукуються з контрольованою точністю, як корні відповідного детермінантного рівняння.

**Наукова новизна отриманих результатів** полягає у наступному:

- вперше знайдено надвисокодобротні ґраткові резонанси при розсіянні Н-поляризованих хвиль скінченими решітками з діелектричних нанониток та показано, що їхня добротність збільшується при збільшенні кількості ниток в решітці;
- продемонстровано наявність двох типів резонансів: на плазмонних та ґраткових модах при розсіянні та поглинанні Н-поляризованих електромагнітних хвиль скінченими решітками з металевих нанониток у світловому діапазоні, та вперше вивчено їхній взаємний вплив

та вплив геометричних й матеріальних параметрів решітки на характеристики розсіяння та поглинання;

- вперше було продемонстровано електромагнітно-індуковану прозорість в характеристиках розсіяння таких решіток при збігу частот плазмонного та ґраткового резонансів;

- вперше було проведено порівняльний аналіз коефіцієнтів відбиття скінченних решіток з металевих нанониток з відповідними нескінченними; було зроблено висновок, що навколо частот ґраткових резонансів для наближення значень коефіцієнта відбиття скінченної решітки до значень для нескінченної потрібно значно більше елементів решітки (не менше 100), ніж у всьому іншому діапазоні (порядка 10);

- встановлено спроможність фокусування світлових хвиль дискретними параболічними рефлекторами з металевих нанониток за умови збудження плазмонного резонансу на кожній з ниток; на відміну від цього, показано, що ґраткові резонанси не відіграють ролі в фокусуванні;

- вперше продемонстровано «ознаку періодичності», що з'являється на рельєфах перерізу повного розсіяння як функції довжини хвилі та кута падіння при наявності періодичного ланцюжка з нанониток у «хмарі» з довільно розташованих ниток;

- вперше знайдено та класифіковано власні моди нанолазерів на основі срібної нанонитки та нанотрубки з активними оболонкою та сердечником, встановлено вплив геометричних параметрів таких нанолазерів на частоти та пороги самозбудження їхніх власних мод;

- вперше знайдено ґраткові лазерні моди решіток зі скінченного числа діелектричних або срібних нанониток, що мають низькі пороги самозбудження, встановлено вплив геометричних та матеріальних параметрів на їхні частоти та пороги самозбудження.

**Практичне значення одержаних результатів.** Запропонований в даній роботі метод та розроблені на його основі чисельні алгоритми можна застосовувати для вивчення та аналізу характеристик розсіяння та

поглинання електромагнітних хвиль, ближніх та дальніх полів, а також частот та порогів самозбудження, лазерних мод ансамблів будь-якої конфігурації зі скінченного числа матеріальних ниток, отримуючи результати з заданою точністю.

Наведені в роботі результати чисельного аналізу характеристик розсіяння та поглинання світлових хвиль різноманітними решітками з кругових нанониток мають фундаментальне значення. Крім того, решітки з металевих та діелектричних нанониток знаходять широке застосування при проектуванні наноантен, біосенсорів, поглиначів у сонячних батареях тощо. Демонстрація корисних для перерахованих пристроїв резонансів на ґраткових модах, дозволить, використовуючи ці резонанси, покращити їхні характеристики.

Як вже було наголошено, ґраткові моди знаходять своє використання у нанолазерах. Ця група приладів тільки-но почала бурхливий розвиток, тому закономірності, що знайдено у даній дисертаційній роботі при вивченні плазмонних мод нанолазерів на основі одиночних срібних нанониток та нанотрубок, а також ґраткових мод решіток з нанониток, мають допомогти при створенні нових, більш ефективних нанолазерів з низькими порогамі самозбудження.

**Особистий внесок дисертанта.** Основні результати, що наведено в дисертації, належать автору. В написаних у співавторстві роботах [1-4, 6-25, 30-31, 34-35] цей внесок полягає у виведенні основних рівнянь, розробці чисельних алгоритмів та написанні відповідного програмного коду, а також систематичному розрахунку характеристик розсіювання та поглинання, діаграм розсіювання, полів у ближній зоні решіток зі скінченного числа нанониток, а також частот, порогів самозбудження і полів власних мод нанолазерів, разом з інтерпретацією отриманих результатів.

**Апробація результатів дисертації.** Результати роботи обговорювалися и доповідалися на наступний наукових семінарах: Інституту радіофізики та електроніки ім. О.Я. Усикова НАН України (кер. акад. П.М. Мележик),

Інституту досліджень з електромагнітної теорії ім. Дж. Гріна Університету м. Ноттінгем, Великобританія (кер. проф. Т.М. Бенсон), Інституту телекомунікацій, м. Варшава, Польща (кер. проф. М. Марчіняк), Інституту фотоніки та електроніки АН Чеської республіки, м. Прага (кер. проф. І. Чтирокі), Токійського технологічного університету, м. Токіо, Японія (кер. проф. Т. Ямасакі). Крім того, вони доповідалися на наступних міжнародних наукових конференціях, воркшопах та симпозіумах:

- Conference on Transparent Optical Networks (ICTON), Мюнхен (2010), Стокгольм (2011), Картагена (2013),
- International Symposium on Physics and Engineering of Microwaves, Millimeter and Sub millimeter Waves (MSMW), Харків (2010, 2013)
- Asia-Pacific Radio Science Conference (AP-RASC), Тояма (2010),
- IEEE Conference on Mathematical Methods in Electromagnetic Theory (MMET), Київ (2010), Харків (2012), Львів (2016),
- Conference on Theoretical and Computational Nanophotonics (TACONA), Бад Хонеф (2011),
- European Conference on Antennas and Propagation (EuCAP), Прага (2012),
- Conference on Near-Field Optics (NFO), Сан Себастьян (2012),
- Symposium on Antennas and Propagation (ISAP), Нагоя (2012),
- IEEE Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO), Київ (2013, 2014, 2015),
- Conference on Microwaves, Radar and Wireless Communications (MIKON), Гданськ (2014),
- URSI General Assembly and Scientific Symposium (URSI-GASS), Пекін (2014),
- IEEE Conference on Advanced Optoelectronics and Lasers (CAOL-LFNM), Севастополь (2010), Харків (2011), Судак (2013), Одеса (2016),
- Young Scientist Forum on Applied Physics and Engineering (YSF), Харків (2016),



- IEEE Conference UKRCON, Київ (2017),
- Workshop on Direct and Inverse Problems of Electromagnetic and Acoustic Wave Theory (DIPED), Тбілісі (2018).

**Публікації.** Результати дисертації опубліковано в 37 наукових роботах, в тому числі 7 статтях в наукових журналах [1-7] та 30 роботах в збірниках праць міжнародних конференцій [8-37].

## РОЗДІЛ 1

### ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ ТА МЕТОДІВ ДОСЛІДЖЕННЯ

#### 1.1 Методи та особливості аналізу розсіяння електромагнітних хвиль на скінченних решітках з кругових ниток

Оскільки об'єктом дослідження у цій дисертаційній роботі є явища розсіяння світлових хвиль скінченними решітками з кругових ниток, то в даному підрозділі викладається історія цієї проблеми та методи, якими користувалися дослідники.

Першим вченим, що став систематично використовувати дифракційні решітки (починаючи з 1821 року) був німецький оптик Фраунгофер [38-39]. Це сталося після того, як шотландський математик та астроном Грегорі, що жив у 17-му сторіччі, розробив закони дифракційних решіток, а американський астроном Ріттенхауз у 1795 році зробив першу дифракційну решітку [40].

Явищем, яке привернуло увагу Фраунгофера, була властивість решіток розкладати падаюче біле світло на складові кольори. Слід зазначити, що чим менше період решітки в порівнянні з довжиною хвилі світла, тим більше кутова відстань між кольорами. Оптичні решітки виготовлялися нанесенням подряпин на скло, і таким чином представляли собою періодично збурену границю розділу двох середовищ. У міжнародній літературі за такими структурами закріпився термін «gratings». Поляризаційні властивості оптичних дифракційних решіток були відкриті Фізо в 1861 р., проте не знайшли застосування. Тільки досліди Г. Герца в 1895 р., в яких була доведена тотожність світла і електромагнітних хвиль [41], відродили цей інтерес, але, на відміну від оптики, для хвиль, довжини яких були значно більше періоду решітки. До того ж решітка Герца була суттєво іншою, ніж ґрати, що застосовувалися в оптиці - вона була зроблена з мідних дротів

діаметром 1 см, натягнутих на рамку, з періодом 3 см. Згодом решітки з металевих елементів (дротів круглого і некруглого перерізу, стрічок і т.д.), розташованих у вільному просторі або укріплених на поверхні прозорої підкладки, отримали назву «grids». В українській мові такі структури також називають ґратами. Довжина хвилі в дослідах Герца дорівнювала 66 см, що перевищувало період в 22 рази – таким чином, решітка Герца не була дифракційною в оптичному сенсі, оскільки не породжувала ніякої іншої хвилі, крім відбитої. У разі якщо довжина хвилі близька до періоду решітки або менше його, відбиття і пропускання набувають значно складнішого характеру. При таких значеннях довжини хвилі можна спостерігати безліч різноманітних різких варіацій розсіяного поля як функції довжини хвилі. Завдяки експериментальній роботі Вуда 1902 г. [42] вони мають загальну назву «аномалії Вуда». В 1907 р. [43] Релеєм було вперше помічено, що деякі з цих «аномалій» відповідають ситуації, коли період нескінченної решітки збігається з цілим числом довжин хвиль при нормальному падінні плоскої хвилі. Він визначив, що зазначені явища відповідають появі нових плоских хвиль, що поширюються в розсіяному нескінченною решіткою полі. Такі ефекти отримали назву «аномалій Релея». Більш детально резонансні явища, пов'язані з періодичністю, будуть розглянуті у п. 1.3.

З точки зору математичної фізики, аналіз розсіяння плоскої хвилі решіткою з  $M$  паралельних ниток кругового поперечного перерізу – це гранична задача для рівняння Гельмгольца,

$$(\Delta + k^2 \varepsilon_{1,2..s})U(x, y) = 0 \quad (1.1)$$

де  $\Delta$  – двовимірний оператор Лапласа,  $k$  – хвильове число у вільному просторі,  $\varepsilon_s$  – діелектрична функція в кожній з часткових областей, а функція  $U(x, y)$  є  $z$ -компонентою електромагнітного поля, тобто,  $E_z$  чи  $H_z$ , в залежності від поляризації, яка повинна задовольняти граничним умовам на поверхні

кожної нитки в локальній системі полярних координат  $\{r_n, \varphi_n\}$ . Крім цього, поле повинно задовольняти умові локальної обмеженості енергії та умові випромінювання на нескінченності, яке виключає присутність інших хвиль, які приходять до решітки, окрім падаючої. Ці умови записані у Розділі 2. За таких умов може існувати тільки одна функція  $U$ .

Для чисельного моделювання розсіяння хвиль решітками з круглих ниток, дослідники розробили кілька підходів і методів. Найбільш послідовним виявився метод, запропонований Тверським у 1956 р., який зводить задачу розсіяння плоскої хвилі [44, 45] до нескінченного матричного рівняння. Фактично, цей метод використовує ту обставину, що розсіяння хвиль одиничним круговим циліндром може бути вирішено в аналітичній формі за допомогою поділу змінних. Використання цього рішення в задачі розсіяння хвиль на решітці дає матричне рівняння, яке є рівнянням другого роду. Відправною точкою в методі Тверського є представлення рішення у вигляді ряду Фур'є від азимутальної змінної в локальних полярних координатах кожної нитки  $(r_n, \varphi_n)$ . Такі ряди задовольняють рівнянню (1.1) для кожного члену ряду окремо та дозволяють зручно застосувати граничні умови до кожного азимутальної порядку. Для нескінченної решітки, врахувавши періодичність структури, разом з теоремами додання для циліндричних функцій, можна отримати нескінченні суми функцій Ханкеля, або ґраткові суми. Такі суми є основним інструментом для вивчення подібних задач. Дані суми сходяться дуже повільно і непридатні для чисельного рішення, тому до них застосовують методи перетворення для прискорення збіжності. Та ж схема, застосована для скінченної решітки з  $M$  ниток приводить до блочного матричного рівняння, що складається з  $M \times M$  нескінченних блоків. Тож чим більше ниток в решітці, тим більшим є матричне рівняння. В свою чергу, такий метод дозволяє розглядати довільну конфігурацію (ансамбль) зі скінченного числа паралельних ниток, у якому необов'язково присутня періодичність.

Однак по-перше, перераховані вище класичні роботи Тверського мають суттєвий недолік. При розкладанні поля в азимутальні ряди Фур'є в локальних системах координат кожної нитки, невідомі коефіцієнти вибиралися найпростішим, але не оптимальним, чином. Це призводило до експоненціального зростання, з індексом, коефіцієнтів для внутрішнього поля і до експоненціального зменшення подібних коефіцієнтів для зовнішнього поля. В результаті матричні рівняння, отримані Тверським (і які пізніше застосовували Рагхев, Фельбак, Аль-Шербені та інші [46-49]), були формально рівняннями другого роду, але не були рівняннями Фредгольма. В силу цього вони, строго кажучи, не можуть бути основою розрахункового алгоритму для чисельного моделювання - такий алгоритм розходиться при збільшенні порядку усічення матриці. Більшість авторів перерахованих вище робіт нехтували цією обставиною, хоча деякі з них помічали зазначену розбіжність і зазвичай приписували її «поганій обумовленості». Разом з тим, такі дефектні алгоритми, при невеликому порядку усічення, здатні давати рішення з відносною похибкою близько  $10^{-2}$ , чого нерідко достатньо для практичного застосування.

Мабуть, вперше цей недолік був подоланий В.Г. Сологубом у звіті з НДР, який згодом перетворився в розділ у відомій книзі [50]. Через 10 років після цього, той самий прийом був використаний Ф. Богдановим [51]. Для того, щоб отримане матричне рівняння було фредгольмовим, досить в рівняннях Тверського зробити заміну невідомих коефіцієнтів, яка забезпечує їх алгебраїчну поведінку при зростанні індексу. У даній дисертаційній роботі цей прийом використовується систематично, тому всі чисельні результати отримані за допомогою збіжних алгоритмів. Зауважимо, що нещодавно цей же прийом був «відкритий» авторами робіт [52, 53], які, втім, не зуміли зрозуміти, що отримали фредгольмове рівняння другого роду, а тільки помітили, що всі проблеми з «поганою обумовленістю» зникли.

По-друге, чисельні результати для решіток з діелектричних ниток, наведені в роботах [51,54,55], демонструють резонансну поведінку

коефіцієнтів відбиття і проходження як функцій нормованої на період частоти. Однак в жодній з цих робіт не було помічено, що частоти деяких резонансів прагнуть до аномалій Релея, якщо період зростає при фіксованому радіусі ниток. Ці резонанси є резонансами на так званих ґраткових модах, що відрізняються надзвичайно високою добротністю. Ці моди є основним об'єктом дослідження у даній роботі (див. також п. 1.3).

Щодо інших методів аналізу решіток, що застосовуються дослідниками, то насамперед слід відмітити метод скінченних різниць у часовій області (СРЧО, *англ.* FDTD), метод скінченних елементів (МСЕ, *англ.* FEM) та методи інтегральних рівнянь (ІР).

Методи СРЧО [56, 57] та МСЕ [58,59] полягають в дискретизації рівнянь Максвела на просторово-часовій або просторовій сітці за допомогою скінченних прирощень. З цього витікає необхідність використання великих ресурсів машинної пам'яті при дискретизації розсіювачів та зовнішнього простору. Ще більша проблема таких методів в нееквівалентності реальної задачі та її дискретної моделі через неможливість точного задоволення граничних умов, а особливо умові випромінювання на нескінченності. Також майже завжди при використанні цих методів неможливо контролювати похибки обчислень, що призводить до невірних результатів, наприклад, поблизу високо добротних резонансів на круговому діелектричному циліндрі [60]. Незважаючи на це, методи СРЧО та МСЕ завдяки своїй універсальності є основою комерційних та відкритих програмних пакетів для аналізу, розв'язання та симуляції різноманітних фізичних та інженерних проблем. Найбільш відомими є пакети Lumerical FDTD Solutions [61] та COMSOL [62], в основі останнього лежить МСЕ. Говорячи про розвиток методів СРЧО слід зазначити роботи [63, 64], присвячені застосуванню та удосконаленню цього методу для відкритих резонансних структур з дифракційними решітками, у яких Ю.К. Сіренко було введено удосконалені «поглинаючі» умови на штучних границях, що

дозволило розглядати «відкриті» крайові задачі в теорії поширення та розсіювання несинусоїдальних хвиль, як «закриті».

Методи, що засновані на інтегральних рівняннях, можна вважати найбільш універсальними та привабливими, бо при їх використанні точно враховуються граничні умови та умова випромінювання. Задачі розсіювання на ізотропних діелектричних тілах за допомогою ІР можна звести або до ІР по області, зайнятій тілом [65], або по границі (поверхні чи контуру перерізу) [66]. Найбільш вигідним з точки зору ефективності обчислювань є зведення задачі до граничних ІР. Використовуючи метод представлення полів у вигляді потенціалів простого шару, двійного шару або їх комбінації. При спеціальному виборі коефіцієнтів в комбінації потенціалів простого та двійного шару можна отримати ІР Мюллера (ІРМ) [67], які є найбільш привабливою формою ІР з математичної точки зору. ІРМ є повністю еквівалентними початковій задачі для рівнянь Максвелу й тим самим не мають хибних власних значень (дефектних частот). Вони мають тільки гладкі та слабо-сингулярні ядра, тим самим являючись фредгольмовими ІР, й мають структуру рівнянь другого роду. ІРМ можна віднести до методів аналітичної регуляризації.

## **1.2 Діелектрична функція срібла у світловому діапазоні та плазмонні резонанси**

У нашому дослідженні розсіювання світлових хвиль на скінченних решітках з нанониток найбільше уваги буде приділено металевим, а саме срібним, ниткам. Це пов'язано з тим, що при розсіянні світла на металевих частинках можливо виникнення специфічних резонансів на локалізованих поверхневих плазмонних модах (для стислості – ЛПП або плазмонні резонанси).

Плазмонні резонанси відіграють важливу роль у сучасній фотоніці. Це пояснюється тим, що на відповідних довжинах хвиль спостерігається

потужне посилення ефектів розсіяння та поглинання світла, що використовується при розробці оптичних наноантен, біо- та хемо-сенсорів, ультра тонких поглиначів, а також нанолазерів. Сферичні та стрижневі металеві частинки, а також металеві нанонитки у випадку їхнього опромінення світлом, яке поляризоване ортогонально вісі нитки (так званий випадок TE- або ж H-поляризації), приваблює як елементарні розсіювачі, які здатні демонструвати інтенсивні плазмонні резонанси в інфрачервоному та оптичному діапазонах [68]. Плазмонні резонанси квазістатичні по своїй природі [69], тому їхні довжини хвиль сильно залежать від форми розсіювача. Якщо довжина нанонитки складає кількадесят або більше довжин хвиль у вільному просторі, то розсіяння світла може бути досліджене з використанням двовимірної моделі. Ця обставина дозволяє спростити аналіз плазмонних ефектів при розсіянні плоскої світлової хвилі на одиночних металевих нитках різноманітних форм поперечного перерізу, від круглих до стрічкоподібних прямокутних та багатокутних. Для нитки кругового перерізу, розділення змінних призводить до аналітичного розв'язку для розсіяного поля у вигляді нескінченних сум з відомими коефіцієнтами. Для субхвильової срібної нитки кругового перерізу з радіусом  $a \ll \lambda$  у вільному просторі цей розв'язок дає одиночний широкий пік розсіяння, трохи зсунутий у червону зону від значення довжини хвилі  $\lambda^p = 338$  нм [70], на якій дійсна частина діелектричної проникності срібла дорівнює -1, тобто  $\text{Re } \varepsilon(\lambda^p) = -1$ . Детальний розгляд показує, що цей пік зумовлений наявністю нескінченного числа близько розташованих полюсів – власних значень ЛПП мод з азимутальними індексами  $m \geq 1$ . Відповідні резонанси в характеристиках розсіювання, однак, зливаються, тому що на цій довжині хвилі срібло має втрати:  $\text{Im } \varepsilon(\lambda^p) \approx 0.31$ , хоча в резонансному ближньому полі круглої нитки з  $a \ll \lambda$  домінують дипольні члени з  $m = \pm 1$ . Аналіз ниток не кругового перерізу потребує більш складних методів, таких як об'ємні IP [70,71] або граничні IP [72,73]. Вони дозволяють встановити, що у цьому випадку виникає не один, а багато залежних від форми поперечного перерізу



та кута опромінення плазмонних резонансів (тобто піків, наприклад, перерізу повного розсіяння) різного типу. Те ж саме дійсно для конфігурацій, складених з двох або трьох ниток (даймери та траймери) [71-74].

Виникнення плазмонів можливе тільки в середовищі з властивостями плазми, при  $\text{Re} \varepsilon(\lambda) < 0$ . Такими середовищами є благородні метали (золото, срібло, мідь) на оптичних частотах, а також сучасні штучні матеріали, найбільш відомим з яких є графен, у інфрачервоному та терагерцевому діапазонах. Для демонстрації плазмонних ефектів на нанонитках, найбільш придатним матеріалом є срібло, втрати в якому менші, ніж у золоті чи міді.

Як відомо, срібло це благородний метал, що характеризується комплексною діелектричною функцією  $\varepsilon_{Ag}(\lambda)$  у видимому діапазоні. Найбільш видатною обставиною є те, що її дійсна частина є негативною завдяки домінуючому вкладу газу з вільних електронів на видимих частотах. Як результат цього, значення  $\text{Re} \varepsilon_{Ag}(\lambda)$  змінюються від +0.93 до -30 в діапазоні довжин хвиль між 200 нм та 800 нм [75]. Експериментальні значення комплексних діелектричних функцій благородних металів, знайдені на дискретних довжинах хвиль, можна знайти, наприклад, у класичних роботах [75,76]. Але у комп'ютерному моделюванні ці значення потрібні на будь-якій довільній довжині хвилі. Цього можна досягти двома способами: застосувавши чисельну інтерполяцію чи отримавши наближені аналітичні формули.

Щодо аналітичного опису, то теорія Друде електронної провідності довгий час широко використовувалася для характеристики діелектричної проникності подібних до плазми матеріалів. Загальноприйнята формула Друде має два параметри: плазмову частоту  $\omega_p$  та час релаксації  $\tau_D$ , які можуть вважатися незалежними від форми об'єкту константами, якщо зразок металу має розмір більше 3 нм [68]. Відповідно до [77], знайдена за допомогою формули Друде  $\text{Re} \varepsilon_{Ag}(\lambda)$  срібла найкраще співпадає з експериментальними даними при  $\omega_p = 1.32 \cdot 10^{16} \text{ c}^{-1}$  та  $\tau_D = 1.45 \cdot 10^{-14} \text{ c}$ , однак

все одно дає впливову помилка при  $\lambda \leq 400$  нм. Вибір таких параметрів дає також адекватну апроксимацію  $\text{Im} \varepsilon_{Ag}(\lambda)$ , тільки якщо довжина хвилі лежить у діапазоні між 350 нм та 650 нм, але є катастрофічно хибним для  $\lambda \leq 300$  нм (див. Рис. 1.1). Як результат, використання формули Друде зміщує в ультрафіолет прогнозовані позиції ЛПП резонансів у середовищі з  $\varepsilon_{host} > 0$ , які як відомо зібрані біля довжини хвилі, що задовольняє рівнянню  $\text{Re} \varepsilon_{Ag}(\lambda) \approx -\text{Re} \varepsilon_{host}$  (див. також обговорення цього у п. 4.2).

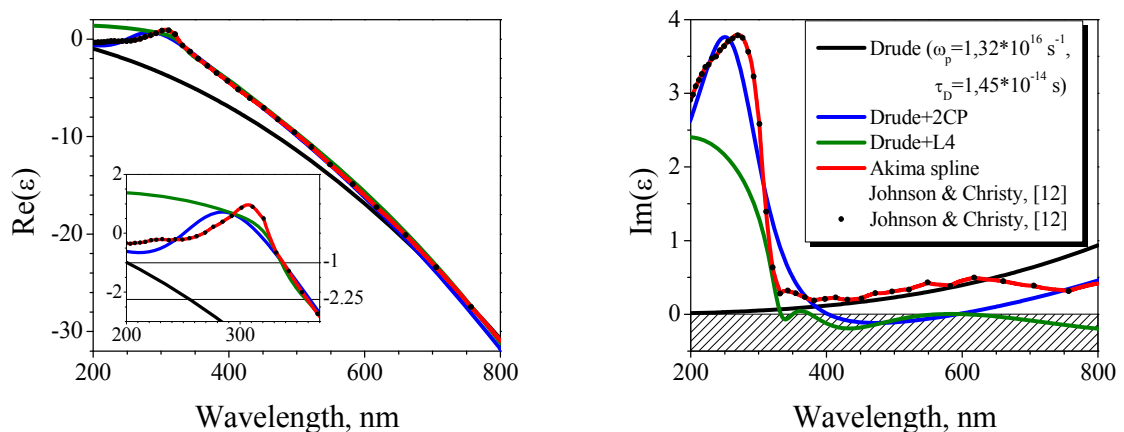


Рис. 1.1. Дійсна та уявна частини відносної діелектричної проникності срібла як функції довжини хвилі, а також порівняння аналітичних наближень та експериментальних даних.

Саме тому, у зв'язку зі зростаючим попитом на точне моделювання плазмонних ефектів, почався пошук більш адекватних аналітичних описів діелектричних функцій металів. Так, дві вдосконалені моделі були введені у [78-80]: Друде плюс 4 Лоренціани (D+4L) та Друде плюс дві критичні точки (D+2CP). На Рис. 1.1 зображено залежності довжини хвилі від дійсної та уявної частин діелектричної проникності срібла в діапазоні 200-800 нм, що були пораховані за допомогою цих двох аналітичних моделей. Також приведено експериментальні дані з роботи [75], інтерпольовані за допомогою сплайнів Акіми [81]. Бачимо краще узгодження моделі D+2CP з даними з [75]. Проте обидві моделі D+2CP та D+4L, мають інший серйозний дефект, що застерігає від їхнього застосування при аналізі лазерів у важливій частині

видимого діапазону. Вони дають негативну уявну частину  $\varepsilon_{Ag}$  у діапазоні довжин хвиль між 400 нм та 600 нм, що формально відповідає помилковій появі посилення у сріблі замість втрат.

Експерименти також показали, що діелектрична проникність срібних наночастинок залежить від якості зразка та його гладкості, а також від матеріалів з якими зразок має спільні границі [82,83]. При наших обчисленнях ми використовували експериментальні дані з [75], які оцінюють як найбільш точні та добре сумісні з нанонитками та нанострічками [83]. Треба також пам'ятати, що якщо розмір металевої частки більший за 3 нм, то при вивченні її оптичних характеристик можна знехтувати всіма нелокальними ефектами та використовувати об'ємні значення діелектричної функції [68].

### **1.3 Граткові резонанси в періодичних структурах**

Приблизно у 2003 р. було виявлено, що скінченні періодичні решітки з нанорозмірних сфер з благородних металів можуть проявляти посилене розсіяння світла на довжинах хвиль, дуже близьких до значення періоду. Це було спочатку передбачено теоретично з використанням простого дипольного наближення для кожної сфери [84], а потім підтверджено за допомогою обчислень, заснованих на дискретному дипольному наближенні та методі T-матриць [85,86]. Пізніше, гострі резонанси з півшириною у кілька нанометрів були експериментально виявлені в періодичних масивах металевих наночастинок біля довжин хвиль аномалій Релея в роботах [87-90]. Їхню природу спочатку було віднесено до плазмонів, тому термінологія, що використовувалася, містила такі (помилкові) назви як «незгасні плазмони», «надтонкі плазмонні резонанси» та «плазмонні резонанси, засновані на дифракційному зв'язку локалізованих плазмонів». В роботі [90] було використано назву «колективний резонанс», більш близьке до природи цього явища. В роботі [91] було запропоновано будувати мультичастотні

наноантенн зі скінченних масивів частинок, які розташовані з періодом, близьким до довжин хвиль, на яких можливий «фотонний резонанс». Однак поступово стало зрозуміло, що фактично мова йде про резонанси на так званих ґраткових модах (також зустрічаються назви геометричні, колективні, структурні, Брегівські моди [92-111]). Ці моди відповідають специфічним комплексним полюсам поля як функції довжини хвилі [104,105,110,111], існування яких обумовлене періодичністю решітки. Інакше кажучи, ґраткові моди не є різновидом плазмонних мод, незважаючи на те, що останні також присутні в решітках з металевих елементів у оптичному діапазоні хвиль.

Якщо розмір елементу решітки є малою частиною періоду, довжини хвиль ґраткових мод знаходяться дуже близько до довжин хвиль аномалій Релея, які дорівнюють  $\lambda_{RA}^{\pm m} = (p/|m|)(1 \pm \cos \varphi_0)$ ,  $m=1,2,\dots$ , де  $p$  – період решітки, а  $\varphi_0$  – кут, під яким падає плоска хвиля, однак не співпадають з ними. Значення  $\lambda_{RA}$  з'являються в теорії розсіяння хвиль на нескінченних решітках та є чисто дійними величинами – точками розгалуження функції поля. Вони відомі як точки, в яких послідовно «виходять з-за обрїю», тобто починають випромінюватися [43] нові вищі дифракційні порядки (гармоніки Флоке). Для випадку нормального падіння плоскої хвилі ці значення є результатом ділення періоду решітки до решти:  $p/m$ ,  $m=1,2,\dots$ . На відміну від точок розгалуження  $\lambda_{RA}^{\pm m}$ , полюси ґраткових мод мають комплексні довжини хвиль, що відповідає наявності втрат на випромінювання. Для нескінченної решітки з ниток вони були знайдені явно, у формі асимптотичних виразів [1]. Подібний результат було отримано також для нескінченної решітки з тонких плоских стрічок [110]. В розсіянні плоскої хвилі на нескінченних решітках, наявність цих полюсів призводить до майже повного відбиття падаючого поля розрідженою решіткою зі субхвильових розсіювачів у вузькому частотному діапазоні [92-111]. Важливо, що резонанси на ґраткових модах в характеристиках розсіяння були знайдені на решітках як з металевих, так і діелектричних елементів, а в останньому

випадку в двох альтернативних поляризаціях [54,92,94,104,105,108]. Таких чином, на відміну від плазмонних резонансів, ґраткові резонанси проявляються як у випадку Н-, так і у випадку Е-поляризації.

Причиною того, що раніше ґраткових резонансам не приділялося належної уваги, може бути їхня надзвичайна близькість до точок розгалуження функції поля – аномалій Релея, особливо для решіток з тонких ниток. Наслідком цього є те, що ґраткові резонанси мають високу добротність навіть при наявності втрат у матеріалі ниток. Якщо нитки можуть бути накачані до виникнення інверсної населеності носіїв заряду (квантові нитки), то ці ж моди нескінченної решітки демонструють ультра низькі пороги самозбудження [104].

Проте реальні решітки складаються зі скінченного числа елементів, що й обумовило нашу зацікавленість до дослідження ґраткових мод та відповідних їм резонансів на скінченних решітках з тонких ниток.

#### **1.4 Характеристики розсіяння та поглинання, оптична теорема**

Розсіяння плоских хвиль на одиночних розсіювачах або їхніх скінченних ансамблях підпорядковується деяким закономірностям, які засновані на законі збереження енергії. У цьому підрозділі описано характеристики розсіяння та поглинання, що використовуються нами під час досліджень, а також оптична теорема (ОТ), яка пов'язує їх.

Під час дослідження задач розсіяння на перешкодах складної форми, зручно вивчати інтегральні характеристики перешкоди, що розсіює. Основними такими величинами є переріз повного розсіяння (ППР,  $\sigma_s$ ), а також переріз зворотного розсіяння (ПЗР,  $\sigma_b$ ) та, у випадку наявності втрат у матеріалі розсіювача, переріз поглинання (ПП,  $\sigma_a$ ).

ППР характеризує повну розсіяну потужність, усереднену за період коливань, та може бути обчислений за формулою [112,113]

$$\sigma_s = \frac{1}{P_0} \oint_S P_r^{sc} r d\varphi, \quad (1.2)$$

$$P_0 = \frac{1}{2} \operatorname{Re}[\mathbf{E}^{inc} \times \mathbf{H}^{inc*}], P_r^{sc} = \frac{1}{2} \operatorname{Re}[\mathbf{E}^{sc} \times \mathbf{H}^{sc*}], \quad (1.3)$$

де  $P_0$  и  $P_r^{sc}$  – це середня за період щільність потоку потужності падаючого та розсіяного полів, відповідно. ППР також може бути обчислений через діаграму спрямованості (ДС) розсіювача у дальній зоні  $\Phi(\varphi)$  за формулою [112]

$$\sigma_s = \frac{2}{\pi k} \int_0^{2\pi} |\Phi(\varphi)|^2 d\varphi, \quad (1.4)$$

ПЗР визначається як відношення повної потужності, яку б розсіював фіктивний ізотропний розсіювач, який створює по всім напрямкам поле, що дорівнює полю, яке створює істинна перешкода в напрямі на джерело опромінювання, та абсолютного значення вектору Пойнтинга плоскої хвилі, що падає на перешкоду під кутом  $\varphi_0$

$$\sigma_b = \frac{P_r(\varphi = \varphi_0)}{P_0}. \quad (1.5)$$

Через ДС ПЗР виражається наступним чином:

$$\sigma_b = \frac{4}{k} |\Phi(\varphi_0)|^2. \quad (1.6)$$

ПП характеризує повну потужність електричного поля, яка поглинена в області, зайнятій матеріалом з втратами,

$$\sigma_a = k \operatorname{Im} \varepsilon \int_V |\mathbf{E}|^2 dV. \quad (1.7)$$

Тепер, на прикладі двовимірного розсіяння плоскої хвилі на циліндрі довільного поперечного перерізу, виведемо так звану оптичну теорему. Якщо на циліндр з дійсною діелектричною проникністю ( $\operatorname{Im} \varepsilon = 0$ ), який розташований у вільному просторі, в площині його поперечного перерізу (ХОУ) падає під кутом  $\varphi_0$  плоска хвиля, то в полярних координатах  $\{r, \varphi\}$   $z$ -компоненти падаючого ( $U^{inc}$ ) та розсіяного ( $U^{sc}$ ) полів можна розкласти в збіжні ряди (більш детально це описане в Розділі 2)

$$U^{inc}(r, \varphi) = e^{ikr \cos(\varphi - \varphi_0)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n J_n(kr) e^{in(\varphi - \varphi_0)}, \quad (1.8)$$

$$U^{sc}(r, \varphi) = \sum_{(n)} b_n H_n^{(1)}(kr) e^{in\varphi}, \quad (1.9)$$

де  $b_n$  – числові коефіцієнти,  $J_n$  и  $H_n^{(1)}$  – функції Бесселя та Ханкеля 1-го роду, відповідно, причому в (1.9)  $r$  повинен бути більшим, ніж максимальний радіус розсіювача.

Користуючись асимптотичним розкладанням функції Ханкеля для великого значення аргументу [114]

$$H_n^{(1)}(z) \underset{z \rightarrow \infty}{\sim} \sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^{i \left[ z - \frac{\pi}{2} \left( n + \frac{1}{2} \right) \right]}, \quad (1.10)$$

та підставивши його в (1.9), отримуємо ДС розсіяного поля в дальній зоні

$$U^{sc} \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} \sqrt{\frac{2}{i\pi kr}} e^{ikr} \Phi(\varphi), \quad (1.11)$$

$$\Phi(\varphi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-i)^n b_n e^{in\varphi}. \quad (1.12)$$

Застосуємо формулу Гріна [115] до функцій  $U = U^{sc} + U^{inc}$  та  $U^*$  в області  $V$  з границею  $S$  (див. Рис. 1.2)

$$\int_V (U \Delta U^* - U^* \Delta U) dV = \oint_S \left( U \frac{\partial U^*}{\partial n} - U^* \frac{\partial U}{\partial n} \right) dS. \quad (1.13)$$

Інтеграл у лівій частині (1.13) дорівнює 0, тому вираз можна переписати в наступному вигляді:

$$\oint_{S=S_1+S_2} \left( U \frac{\partial U^*}{\partial r} - U^* \frac{\partial U}{\partial r} \right) r d\varphi = 2i \oint_S \operatorname{Im} \left( U \frac{\partial U^*}{\partial r} \right) r d\varphi = 0. \quad (1.14)$$

Перейдемо до границь  $S_1 \rightarrow 0$  та  $S_2 \rightarrow \infty$ . Якщо поглинання в розсіювачі відсутнє, то оскільки при будь-якій поляризації функція поля  $U$  неперервна на границі діелектричного розсіювача, а  $\partial U / \partial r$  зазнає стрибку

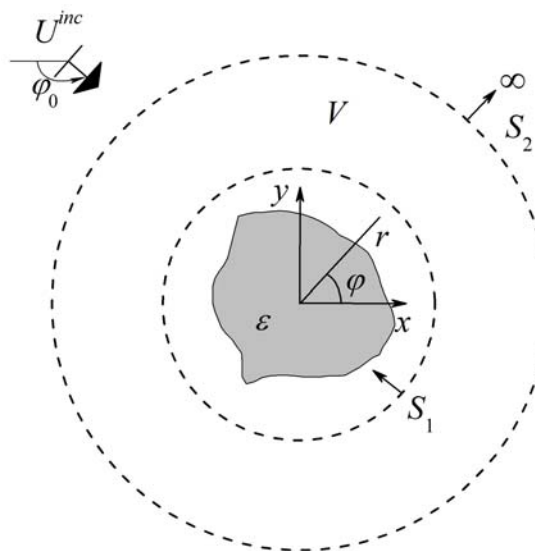


Рис. 1.2. Поперечний переріз циліндру довільної форми у вільному просторі.



величиною або  $\sqrt{\varepsilon}$ , або  $1/\sqrt{\varepsilon}$ , то при  $\text{Im } \varepsilon = 0$  інтеграл по  $S_1$  обертається в нуль.

Після диференціювання (1.8), (1.11), а потім почленного інтегрування (1.14) по  $S_2$ , після всіх перетворень отримуємо наступний вираз:

$$\frac{2}{\pi k} \int_0^{2\pi} |\Phi(\varphi)|^2 d\varphi = -\frac{4}{k} \text{Re} \sum_{n=-\infty}^{\infty} [i^n b_n e^{in\varphi_0}]. \quad (1.15)$$

Як видно з (1.12), сума в правій частині (1.15) є ДС у прямому напрямі, тобто  $\Phi(\varphi_0 + \pi)$ , а вираз у лівій частині (1.15) – це ППР. Величина, яка стоїть у правій частині (1.15), представляє з себе переріз екстинкції

$$\sigma_{ext} = -\frac{4}{k} \text{Re}[\Phi(\varphi_0 + \pi)]. \quad (1.16)$$

Тому як розглядався розсіювач без втрат, то в (1.15) відсутній доданок, що відповідає за поглинання енергії. Проте якщо втрати не нульові, то аналогічні викладки призводять до виразу

$$\sigma_s + \sigma_a = \sigma_{ext}, \quad (1.17)$$

де  $\sigma_a$  – це ПП. Цей вираз і називають оптичною теоремою. Вона є зручним та потужним інструментом для часткової перевірки правильності обчислень, а також може використовуватися для обчислення ПП як різниця між  $\sigma_{ext}$  та  $\sigma_s$ . При розрахунках характеристик розсіяння, що представлені в даній дисертаційній роботі, оптична теорема виконувалася з машинною точністю.

## **1.5 Наноласери як метало-діелектричні резонатори з активними зонами**

Важливою частиною нашого дослідження є дослідження порогових властивостей лазерів на ЛПП модах і на ґраткових модах для металевих нанониток і нанотрубок кругового перерізу.

Можливість досягти більш інтенсивної взаємодії світла з речовиною у наноструктурованих конфігураціях, що складаються з металевих частинок, у поєднанні з контрольованою точністю їхнього виготовлення, вже перетворили плазмоніку в область досліджень у сучасних оптиці та фотоніці, що дуже динамічно розвивається. Фізичною основою цього посилення є наявність дуже повільних (у сенсі фазової швидкості) і коротких (у сенсі довжини хвилі) поверхневих плазмонних хвиль, які розповсюджуються вздовж границь метал-діелектрик або вздовж тонких металевих шарів, й породжених ними стоячих хвиль, що називають ЛПП модами. Це стається, як вже було сказано у підрозділі 1.2, через специфічні властивості комплексних діелектричних функцій металів в оптичному діапазоні, а саме від'ємних значень їхньої дійсної частини [116,117]. У теперішній час резонанси на ЛПП модах широко використовуються при проектуванні наноантен і наносенсорів малих змін показника заломлення уміщального середовища, що дозволяє безпосередньо вимірювати низькі концентрації різноманітних речовин. Останнім часом також з'явився новий напрям досліджень, пов'язаний з ЛПП модами – вивчення та розробка плазмонних нанолазерів (також їх називають «спазерами»). У цих пристроях нанорозмірні металеві частинки, нитки, пластинки або трубки слугують в якості мініатюрних відкритих резонаторів, споряджених активними зонами. У кінці 2000-х років це призвело до експериментальної демонстрації наймініатюрнішого плазмонного лазера у вигляді випадкового ансамблю колоїдних золотих нанокулочок, вкритих кремнієвими оболонками з вкрапленнями барвника [118]. При цьому було

припущено, що випромінювання світла відбувалося на дипольній ЛПП моді сферичного нанорезонатора сердечник-оболонка.

До публікацій про теоретичне вивчення сферичних (тривимірних) та кругових циліндричних (двовимірних) моделей нанолазерів типу сердечник-оболонка відносяться роботи [119-128]. Ці статті дають певні корисні результати, проте вони не вільні від вад. Наприклад замість вивчення власних електромагнітних мод, роботи [119-121] аналізують розсіяння та поглинання плоскої хвилі активним розсіювачем. У результаті традиційну та повністю адекватну умову «посилення=втрати» для визначення порогового значення посилення помилково замінено умовою про «нульовий переріз екстинкції». Роботи [122-124] коректно вивчають проблеми на власні значення, припускаючи наявність активних зон, та здобувають порогові значення посилення з характеристичних рівнянь. Більш специфічна робота [122] вивчає ефект від додавання металевої оболонки на пороги випромінювання мод шепочучої галереї активного сердечника, але не вивчає випромінювання на ЛПП модах. У статті [123] не було враховано дисперсію діелектричної проникності металу. У роботі [124] було використано специфічний підхід, що оснований на обчисленнях методом FDTD, яким не можна безпосередньо вивчати задачі на власні значення.

Останнім часом увага дослідників зосередилась також на вивченні оптичних властивостей періодичних масивів з металевих наночастинок, що знаходяться на поверхні активного шару або занурені в нього [129-132], або ж мають активні області інших конфігурацій [105]. В таких структурах випромінювання світла відбувається на ґраткових модах, які мають нижчі пороги.

Для вивчення лазерних мод у даній дисертаційній роботі використовується точний та математично обґрунтований підхід, який має назву «лазерна задача на власні значення» (ЛЗВЗ), що нещодавно була успішно застосована до кількох типів мікрорезонаторних лазерів [133-140].

ЛЗВЗ – це електромагнітна гранична задача на власні значення в модифікованому формулюванні, яка адекватним чином враховує наявність активної зони та, як наслідок, дає можливість знайти пороги самозбудження (випромінювання) та зв'язати їх з властивостями дискретного спектру мод у відкритому резонаторі. Її було запропоновано в роботах О.І. Смотрової та О.Й. Носича [133-134]. В цій постановці активна зона – це частина об'єму резонатора, яка заповнена немагнітним діелектричним матеріалом, що має макроскопічне підсилення. Воно може бути введено одним з наступних способів: як уявна частина показника заломлення  $\nu = \alpha - i\gamma$ , або як уявна частина діелектричної проникності  $\varepsilon_a = \text{Re } \varepsilon_a - i \text{Im } \varepsilon_a$  при залежності від часу  $e^{-i\omega t}$ . Ці два способи еквівалентні один одному, тому що  $\text{Re } \varepsilon_a = \alpha^2 - \gamma^2$ ,  $\text{Im } \varepsilon_a = 2\alpha\gamma$ . На границі активної зони вводиться додаткова умова неперервності тангенційних компонент поля, а на нескінченності ставиться умова випромінювання. Задача складається з відшукування таких упорядкованих пар дійсних чисел  $(\lambda, \gamma)$ , при яких існують не рівні тотожно нулю функції  $\{\mathbf{E}, \mathbf{H}\}$  як рішення рівнянь Максвелу з вказаними вище умовами.

Важливо підкреслити, що ЛЗВЗ залишається лінійною задачею в тому сенсі, що у неї не входить нелінійна залежність матеріальних параметрів резонатору від амплітуди поля. Тим не менш, такої модифікації виявляється достатньо для того, щоб відшукувати не тільки частоти, але й пороги самозбудження. Більше того, вона дозволяє увести в розгляд такі фактори, як розташування, розміри та форму активної зони і описати їхній вплив на поля власних мод лазера, їхні частоти та пороги самозбудження, що надзвичайно важливо при проектуванні таких пристроїв.

Слід відмітити, що ідея опису активного матеріального середовища здатного не поглинати хвилі, а випромінювати їх, за допомогою необхідного знаку уявної частини показника заломлення або діелектричної проникності існує давно [141]. У кінці 1970х років виникла дискусія навколо незвичних

ефектів, які було виявлено при теоретичному дослідженні розсіяння хвиль на частинках з від'ємним поглинанням. Однак вона припинилася після того, як стало зрозуміло, що при такій постановці задачі губиться єдність розв'язку при співпадінні частоти падаючого поля з дійсною власною частотою активної частинки [142].

Незадовго до цього з'явилася робота [143], у якій спочатку було знайдено певну комплексну власну частоту відкритого резонатору з діелектричним стрижнем, а потім було запропоновано шукати таке значення  $\text{Im } \varepsilon < 0$ , яке зробить нульовою її уявну частину. Це значення пов'язувалося з порогом самозбудження. За наступні 30 років такий прийом застосовувався ще кілька разів при дослідженні різних лазерних моделей [144-149], однак поріг випромінювання не розглядався як елемент власного значення. Мабуть цю ситуацію можна пояснити тим, що лазери довгий час лишалися пристроями, розміри яких у багато тисяч разів перевищували довжину хвилі їхнього випромінювання. Тому моделювання їхніх порогів самозбудження зводилося до підрахунку довжини геометро-оптичного шляху променя по замкнутій траєкторії та помноженню цієї величини на показник посилення,  $\gamma$ . Така наближена теорія отримала назву «напівкласичної теорії лазерів».

Існують також інші, подібні ЛЗВЗ, формулювання задач, що спрямчані на знаходження порогів самозбудження власних мод [150-154]. Деякі з них відрізняються від ЛЗВЗ лише вибором параметру матеріального підсилення, яким може бути, наприклад, уявна частина діелектричної проникності,  $\text{Im } \varepsilon_a = 2\alpha\gamma$ , або підсилення на одиницю довжини  $g = k\gamma$  (де  $k$  – хвильове число), що характерно для «напівкласичної теорії лазерів». У будь-якому випадку, принципово лише те, що поріг самозбудження в тому чи іншому вигляді шукається у вигляді власного значення. Це повністю відповідає фундаментальним спостереженням, які відомі ще з початку дослідження лазерів, того, що пороги самозбудження лазерних мод тісно пов'язані з модовими полями та їхнім перекриттям з активними зонами.

## РОЗДІЛ 2

### РОЗСІЯННЯ ТА ПОГЛИНАННЯ СВІТЛОВИХ ХВИЛЬ ЛІНІЙНИМИ РЕШІТКАМИ З НАНОНИТОК

У цьому розділі чисельно досліджені характеристики розсіяння та поглинання ЕМ хвиль світлового діапазону для одиночної нанонитки та лінійної решітки нанониток з діелектрика і срібла. Метод дослідження заснований на зведенні задачі дифракції плоскої ЕМ хвилі на скінченному числі циліндрів кругового перерізу до СЛАР Фредгольма другого роду з використанням методу часткового розділення змінних та теорем додавання для циліндричних функцій. В результаті підтверджено присутність плазмонних та ґраткових резонансів в характеристиках розсіяння та поглинання світла лінійними решітками зі срібних нанониток. Матеріали розділу 2 опубліковано в роботах [1, 2, 7, 9-14, 23].

#### 2.1 Зведення задачі розсіяння хвиль на скінченному числі кругових ниток до фредгольмової СЛАР другого роду

Розглянемо задачу дифракції плоскої хвилі на скінченному числі ниток круглого перерізу (циліндрів). Нехай в однорідному та ізотропному просторі (з залежністю від часу  $\sim e^{-i\omega t}$ , де  $\omega$  – циклічна частота) з проникностями  $\varepsilon_{ext} = 1, \mu_{ext} = 1$  знаходиться  $M$  паралельних нескінченно довгих немагнітних ( $\mu = 1$ ) ниток круглого перерізу радіусу  $a$  та з діелектричною проникністю  $\varepsilon$ . Поперечний переріз такої структури площиною  $XOY$  показано на Рис. 2.1. Через  $\alpha = \varepsilon^{1/2}$  позначимо показник заломлення матеріалу нитки, який може бути комплексною величиною. Центр глобальної СК нехай знаходиться в центрі якої-небудь нитки, відстані між осями будь-яких двох  $j$ -ї та  $q$ -ї ниток  $d_{jq}$ , кути між їхніми локальними СК  $(r_q, \varphi_q)$   $\psi_{jq}$  та  $\psi_{qj}$  (Рис. 2.1). На нитки

падає плоска монохроматична хвиля, яка розповсюджується в площині їхнього поперечного перерізу під кутом  $\varphi_0$ , як показано на рисунку.

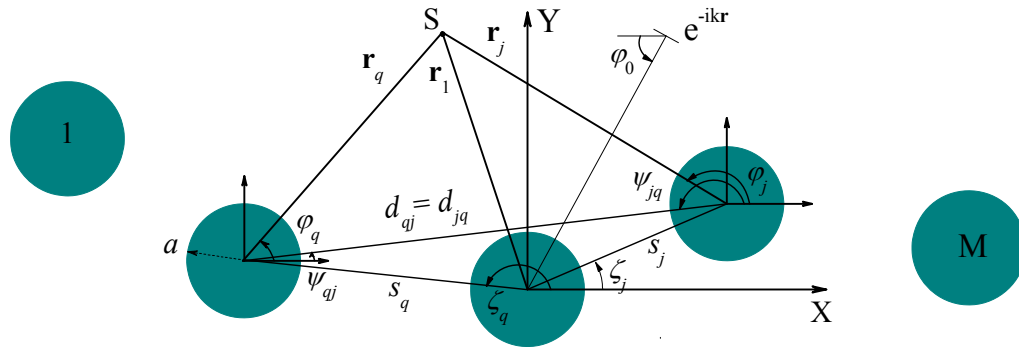


Рис. 2.1. Дифракція плоскої хвилі на  $M$  кругових циліндрах.

Задача складається зі знаходження невідомого поля  $\{\vec{E}, \vec{H}\}$  всередині ниток та зовні їх у випадках паралельної (Е) та перпендикулярної (Н) поляризацій. В залежності від поляризації компоненти полів для наочності можна представити таким чином:

Поляризація	Компоненти поля
Е	$\begin{cases} \vec{E}_E = (0; 0; -E_z) \\ \vec{H}_E = (H_x; H_y; 0) \end{cases}$
Н	$\begin{cases} \vec{E}_H = (E_x; E_y; 0) \\ \vec{H}_H = (0; 0; H_z) \end{cases}$

Функцією  $U(\vec{r})$  будемо позначати  $z$ -компоненту полів  $\vec{E}$  і  $\vec{H}$  у Е- і Н-поляризаціях, відповідно. Для розв'язання поставленої задачі дифракції, необхідно, щоб виконувалися наступні умови для функції  $U(\vec{r})$ , які забезпечують єдність розв'язку:

1. Рівняння Гельмгольца поза границь ниток:

$$(\Delta + k_s^2)U_s(\vec{r}) = 0, \quad k_s = k_0\sqrt{\epsilon_s}, \quad (2.1)$$

де  $s = 1, 2$  – це номер області всередині ниток (якщо  $r_j \leq a$ , то  $s = 1$ ) та ззовні їх (якщо  $r_j > a$ , то  $s = 2$ ),  $j = 1, \dots, M$ .

2. Граничні умови на поверхні ниток:

$$\begin{cases} U_s(\vec{r})|_{r_j=a-0} = U_{s+1}(\vec{r})|_{r_j=a+0} \\ \beta_s \frac{\partial U_s(\vec{r})}{\partial r}|_{r_j=a-0} = \beta_{s+1} \frac{\partial U_{s+1}(\vec{r})}{\partial r}|_{r_j=a+0} \end{cases}, \quad (2.2)$$

де  $\beta_s = 1$  або  $\beta_s = 1/\varepsilon_s$  у випадку Е- чи Н-поляризації відповідно.

3. Умова випромінювання на нескінченності для розсіяного поля,

$$U^{sc}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sqrt{\frac{2i}{\pi k_0 r}} e^{-ik_0 r} \Phi(\varphi), \quad (2.3)$$

де  $\Phi(\varphi)$  - діаграма спрямованості розсіяного поля в дальній зоні.

4. Умова локальної обмеженості потужності поля,

$$\int_{S \subset \mathbb{R}^2} \left( \frac{\partial}{\partial \omega} (\omega \varepsilon(\omega)) |E|^2 + |H|^2 \right) dS < \infty. \quad (2.4)$$

Застосуємо для розв'язання поставленої задачі метод часткового розділення змінних. Перш за все, дотримуючись робіт [45,47-49], розкладемо функцію поля всередині кожної нитки в ряди Фур'є по азимутальним експонентам з коефіцієнтами, які залежать від функцій Бесселя та Ханкеля, в локальних полярних координатах, що пов'язані з кожною ниткою,

$$U^{int(q)}(r, \varphi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} y_n^{(q)} J_n(kvr_q) e^{in\varphi}, \quad r_q < a, \quad (2.5)$$

Поле поза всіх ниток представимо у вигляді суперпозиції полів, які розсіяні кожною ниткою,

$$U^{ext}(r, \varphi) = U^0 + \sum_{q=1}^M \sum_{n=-\infty}^{\infty} z_n^{(q)} H_n^{(1)}(kr_q) e^{in\varphi}, \quad r_q > a, \quad q = 1, \dots, M, \quad (2.6)$$



де  $U^0$  це падаюче поле:

$$U^0 = e^{-ikr \cos(\varphi - \varphi_0)}. \quad (2.7)$$

У нашій задачі розглядається падіння плоскої хвилі в площині  $ХОУ$ , тому позначивши центри локальних полярних координат  $q$ -ї нитки в глобальній СК  $(s_q, \zeta_q)$ , запишемо розкладене у ряд Фур'є для циліндричних функцій падаюче поле для  $q$ -ї нитки,

$$U^{0(q)}(r, \varphi) = e^{-iks_q \cos(\zeta_q - \varphi_0)} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-i)^n J_n(kr_q) e^{-in\varphi_0}. \quad (2.8)$$

Використовуючи теорему додавання для циліндричних функцій [114],

$$H_n^{(1)}(kr_q) e^{in\varphi_q} = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} J_m(kr_j) H_{m-n}^{(1)}(kd_{jq}) e^{i(n-m)\psi_{jq}} e^{im\varphi_j}, \quad r_q > r_j, \quad (2.9)$$

застосуємо граничні умови (2.2) на поверхні кожної з  $M$  ниток.

Рівняння, отримані з граничних умов на  $q$ -й нитці, виглядають наступним чином:

$$\left\{ \begin{aligned} & \sum_{n=-\infty}^{\infty} y_n^{(q)} J_n(kva) e^{in\varphi_q} - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq q}}^M \left\{ \sum_{n=-\infty}^{\infty} z_n^{(j)} \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(ka) H_{m-n}(kd_{jq}) e^{i(n-m)\psi_{jq}} e^{im\varphi_j} \right\} - \\ & - \sum_{n=-\infty}^{\infty} z_n^{(q)} H_n(ka) e^{in\varphi_q} = e^{-iks_q \cos(\zeta_q - \varphi_0)} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-i)^n J_n(ka) e^{-in\varphi_0}, \\ & \beta^{E,H} \sum_{n=-\infty}^{\infty} y_n^{(q)} J'_n(kva) e^{in\varphi_q} - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq q}}^M \left\{ \sum_{n=-\infty}^{\infty} z_n^{(j)} \sum_{m=-\infty}^{\infty} J'_m(ka) H_{m-n}(kd_{jq}) e^{i(n-m)\psi_{jq}} e^{im\varphi_j} \right\} - \\ & - \sum_{n=-\infty}^{\infty} z_n^{(q)} H'_n(ka) e^{in\varphi_q} = e^{-iks_q \cos(\zeta_q - \varphi_0)} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-i)^n J'_n(ka) e^{-in\varphi_0}, \end{aligned} \right. \quad (2.10)$$

де  $\beta^{E,H} = \nu^{\pm 1}$ .

Помножимо кожне рівняння (2.10) на  $e^{im\varphi_q}$  та проінтегруємо на інтервалі  $[0, 2\pi]$ . В силу ортогональності тригонометричних функцій у просторі  $L_2[0, 2\pi]$  отримуємо для  $q$ -ї нитки ( $q = 1, \dots, M$ ),

$$\left\{ \begin{aligned} & y_{-m}^{(q)} J_m(\nu ka) - z_{-m}^{(q)} H_m(ka) - J_m(ka) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq q}}^M z_n^{(j)} H_{n+m}(kd_{jq}) e^{i(n+m)\psi_{jq}} = \\ & = e^{-iks_q \cos(\zeta_q - \varphi_0)} (-i)^{-m} J_m(ka) e^{im\varphi_0}, \\ & \beta^{E,H} y_{-m}^{(q)} J'_m(\nu ka) - z_{-m}^{(q)} H'_m(ka) - J'_m(ka) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq q}}^M z_n^{(j)} H_{n+m}(kd_{jq}) e^{i(n+m)\psi_{jq}} = \\ & = e^{-iks_q \cos(\zeta_q - \varphi_0)} (-i)^{-m} J'_m(ka) e^{im\varphi_0}. \end{aligned} \right. \quad (2.11)$$

В системі (2.11) усього  $2M$  рівнянь. Зробимо наступні перетворення: кожне  $q$ -е рівняння системи помножимо на  $J'_m(ka)$  та віднімемо з отриманого результату кожне  $(q+M)$ -е рівняння системи, помножене на  $J_m(ka)$ . В результаті отримуємо систему з  $M$  рівнянь, яка дозволяє виразити невідомі коефіцієнти  $y_n^{(q)}, z_n^{(q)}$  один через одного:

$$\begin{aligned} & y_{-m}^{(q)} \left[ J_m(\nu ka) J'_m(ka) - \beta^{E,H} J'_m(\nu ka) J_m(ka) \right] = \\ & = z_{-m}^{(q)} \left[ H_m(ka) J'_m(ka) - H'_m(ka) J_m(ka) \right]. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Введемо наступні позначення:

$$V_m^{E,H} = J_m(\nu ka) J'_m(ka) - \beta^{E,H} J'_m(\nu ka) J_m(ka), \quad (2.13)$$

$$W = H_m(ka) J'_m(ka) - H'_m(ka) J_m(ka) = -\frac{2i}{\pi ka}. \quad (2.14)$$

Таким чином, виразивши  $y_m^{(q)}$  через  $z_m^{(q)}$  і підставивши у перші  $M$  рівнянь системи (2.11) після перетворень отримаємо  $M \times M$  блочне матричне рівняння, в якому кожен блок нескінченний:

$$Z + PZ = Q, \quad (2.15)$$

$$Z = \{Z^{(q)}\}_{q=1}^M, \quad Z^{(q)} = \{z_m^{(q)}\}_{m=-\infty}^{+\infty} \quad (2.16)$$

$$P = \{P^{(q,j)}\}_{q,j=1}^M, \quad P^{(q,j)} = \{P_{m,n}^{(q,j)}\}_{m,n=-\infty}^{+\infty}, \quad Q = \{Q^{(q)}\}_{q=1}^M, \quad Q^{(q)} = \{\tilde{B}_m^{(q)}\}_{m=-\infty}^{+\infty}, \quad (2.17)$$

$$P_{m,n}^{(q,j)} = \frac{H_{n-m}(kd_{jq})V_m(ka,\nu)}{F_m(ka,\nu)} e^{i(m-n)\nu_{jq}}, \quad Q_m^{(q)} = \frac{(-i)^m V_m(ka,\nu)}{F_m(ka,\nu)} e^{-iks_q \cos(\zeta_q - \varphi_0) - im\varphi_0} \quad (2.18)$$

$$F_m^{E,H} = \beta^{E,H} H_m(ka) J'_m(\nu ka) - H'_m(ka) J_m(\nu ka) \quad (2.19)$$

Матричне рівняння (2.15) та подібні йому можуть бути знайдені в більшості робіт, де розглядалися подібні задачі (див. наприклад [45-49]). Вони використовувалися для отримання багатьох чисельних результатів, незважаючи на те, що деякі автори скаржилися на, як вони це назвали, «накопичення похибок округлювання», коли порядок усічення  $N$  кожного з блоків матриці брався великим. Насправді неважко показати, що (2.15) не може гарантувати збіжність чисельних розв'язків. При цьому збіжність слід розуміти в математичному сенсі, як можливість мінімізації похибки обчислень при розв'язанні матричних рівнянь з порядком редукції, що збільшується. Чисельна схема на основі (2.15) здатна дати декілька точних перших знаків у розв'язку, однак не спроможна забезпечити кращу точність. Це виходить з того, що матричні елементи в (2.15) зменшуються вздовж стовпців (тобто з індексом  $m$ ), однак експоненційно зростають уздовж рядків (тобто з індексом  $n$ ). Тому, строго кажучи, неможливо замінити матрицю (2.15) скінченним аналогом. Таку поведінку розв'язків (2.15) було вивчено у [53], де було продемонстровано, що найкраща точність, якої можна досягти, при «дуже великих» значеннях  $N$  – це близько  $10^{-2}$  (див. розділ 3.4 в [53]).

Причину такої низької точності легко зрозуміти: граничні умови на контурі  $q$ -ї нитки пов'язують два коефіцієнти, в кожному з яких присутній азимутальний індекс  $n$ :  $y_n^{(q)} J_n(\nu ka)$  та  $z_n^{(q)} H_n(ka)$ . Щоб ця умова задовольнялась для великих  $n$ , коефіцієнти  $y_n^{(q)}$  повинні урівноважувати експоненційне зменшення функцій Бесселя для  $n \gg \nu ka$ , тоді як коефіцієнти  $z_n^{(q)}$  повинні урівноважувати експоненційне зростання функцій Ханкеля. Це й призводить до вказаної вище істотно різної поведінки матричних елементів по номеру рядку та номеру стовпця.

Однак, цей дефект можна виправити шляхом заміни невідомих коефіцієнтів. Дійсно, введемо нові невідомі коефіцієнти  $x_n^{(q)}$  як

$$z_n^{(q)} = x_n^{(q)} J_n(ka). \quad (2.20)$$

Матричне рівняння для коефіцієнтів  $x_n^{(q)}$  приймає вигляд

$$X + AX = B, \quad (2.21)$$

$$X = \{X^{(q)}\}_{q=1}^M, \quad X^{(q)} = \{x_m^{(q)}\}_{m=-\infty}^{+\infty} \quad (2.22)$$

$$A = \{A^{(q,j)}\}_{q,j=1}^M, \quad A^{(q,j)} = \{A_{m,n}^{(q,j)}\}_{m,n=-\infty}^{+\infty}, \quad B = \{B^{(q)}\}_{q=1}^M, \quad B^{(q)} = \{B_m^{(q)}\}_{m=-\infty}^{+\infty}, \quad (2.23)$$

$$A_{m,n}^{(q,j)} = \frac{H_{n-m}^{(1)}(kd_{jq}) V_m(ka, \nu) J_n(ka)}{F_m(ka, \nu) J_m(ka)} e^{i(m-n)\psi_{jq}}, \quad B_m^{(q)} = \frac{(-i)^m V_m(ka, \nu)}{F_m(ka, \nu) J_m(ka)} e^{-iks_q \cos(\zeta_q - \varphi_0) - im\varphi_0}. \quad (2.24)$$

Це блочне матричне рівняння Фредгольма 2-го роду, що витікає з виконання нерівностей

$$\sum_{n,m=-\infty}^{+\infty} |A_{mn}^{(q,j)}|^2 < \infty, \quad \sum_{m=-\infty}^{+\infty} |B_m^{(q)}|^2 < \infty, \quad (q, j = 1, \dots, M) \quad (2.25)$$

які справедливі при всіх  $d_{jq} > 2a$ , тобто якщо циліндри не торкаються один одного. Це може бути доказано аналітично після заміни циліндричних функцій першими членами їхній відповідних розкладань по степеням аргументів [155].

Після такої заміни, теореми Фредгольма з операторного аналізу гарантують, що розв'язок рівняння (2.21), де кожен блок усічений до скінченного числа  $N$ , збігається до точного розв'язку, якщо  $N \rightarrow \infty$ . Для розв'язку «рівняння Тверського», тобто усіченого рівняння (2.15), як було вказано вище, ця властивість не виконується.

Щоб отримати вираз для ДС в дальній зоні, підставимо у вираз для розсіяного поля, взятий з (2.6)  $U^{sc} = U^{ext} - U^0$ , асимптотичне розвинення функції Ханкеля (1.10),

$$U^{sc}(r, \varphi) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} \sum_{q=1}^M \sum_{n=-\infty}^{\infty} z_n^{(q)} \sqrt{\frac{2}{\pi k r_q}} e^{i\left(kr_q - \frac{n\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right)} e^{in\varphi_q}. \quad (2.26)$$

Далі, використовуючи біноміальне розвинення,

$$(1+x)^v = 1 + vx + \frac{v(v-1)}{2!}x^2 + \dots + \frac{v(v-1)\dots(v-m+1)}{m!}x^m + \bar{o}(x^m), \quad x \rightarrow 0, \quad (2.27)$$

а також тригонометричні формули, виразимо  $r_q$  та  $\varphi_q$  через  $r$  та  $\varphi$  в глобальній СК, нехтуючи при цьому величинами, які менші за  $\bar{o}(1/r)$ . Таким чином (2.26), з урахуванням перетворень, можна записати у вигляді,

$$U^{sc}(r, \varphi) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi k r}} e^{i\left(kr - \frac{\pi}{4}\right)} \sum_{q=1}^M \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-i)^n z_n^{(q)} e^{-iks_q \cos(\zeta_q - \varphi)} e^{in\varphi} + \bar{o}\left(\frac{1}{r}\right), \quad r \rightarrow \infty \quad (2.28)$$

ДС в дальній зоні - це частина (2.28), яка залежить від  $\varphi$ ,

$$\Phi(\varphi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-i)^n \xi_n(\varphi) e^{in\varphi}, \quad (2.29)$$

$$\text{де } \xi_n(\varphi) = \sum_{q=1}^M z_n^{(q)} e^{-iks_q \cos(\zeta_q - \varphi)}.$$

## 2.2 Одиночна діелектрична або срібна нанонитка в однорідному середовищі

В даному підрозділі розглянуто розсіяння плоскої ЕМ хвилі на однорідній нанонитці з діелектрика чи срібла у світловому діапазоні. Нанонитка моделюється як однорідний нескінченний циліндр кругового перерізу радіусу  $a$  з комплексною відносною діелектричною проникністю  $\varepsilon$ . Аналітичне розв'язання подібної задачі добре відомо та може бути отримане методом розділення змінних [141]. Отримані чисельні результати для срібної та діелектричної нанониток ілюструють наявність та відсутність плазмонного резонансу при  $a \ll \lambda$ , відповідно, а також допомагають в подальшому при порівнянні характеристик розсіяння та поглинання світла різноманітними решітками з нанониток визначити вплив періодичності на формування резонансів.

Розглянемо дифракцію плоскої хвилі на нескінченній нитці кругового перерізу радіусу  $a$ , яка розповсюджується в площині її нормального перерізу. Будемо вважати, що нитка має параметри  $\varepsilon_1$  та  $\mu_1 = 1$  (внутрішня область), а зовнішнє середовище –  $\varepsilon_2$  та  $\mu_2 = 1$ . (Якщо інше не вказане, то будемо вважати зовнішнє середовище вільним простором, тобто  $k \equiv k_2$ ,  $k_1 = k\alpha = k\sqrt{\varepsilon_1}$ .) Також індексами 1 та 2 будемо позначати й хвильовий імпеданс, який відноситься до відповідних областей.

Запишемо поле всередині та ззовні нитки у вигляді розкладання в ряди по кутовим експонентам,

$$U_1(\vec{r}) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m a_m^{E,H} J_m(k_1 r) e^{im\varphi}, \quad r < a, \quad (2.30)$$

$$U_2(\vec{r}) = U^0(\vec{r}) + U^{sc}(\vec{r}) = U^0(\vec{r}) + \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m b_m^{E,H} H_m(kr) e^{im\varphi}, \quad r > a. \quad (2.31)$$

Тут  $a_m^{E,H}$  та  $b_m^{E,H}$  - невідомі коефіцієнти, а  $J_m(\cdot)$  та  $H_m(\cdot)$  - функції Бесселя і Ханкеля 1-го роду відповідно.

$$U^0(\vec{r}) = e^{ikr \cos \varphi} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m J_m(kr) e^{im\varphi}. \quad (2.32)$$

Ортогональність і повнота системи функцій  $e^{im\varphi}$ ,  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  на інтервалі  $[0, 2\pi]$  дозволяють застосувати ГУ й розглядати співвідношення між коефіцієнтами незалежно для кожного значення індексу  $m$ . Виходячи з умов (2.2) та розкладень для тангенційних компонент зовнішнього, внутрішнього та падаючого поля, знаходимо невідомі коефіцієнти  $a_m^{E,H}$  та  $b_m^{E,H}$ ,

$$\begin{cases} b_m^{E,H} H_m(ka) - a_m^{E,H} J_m(k_1 a) = J_m(ka) \\ b_m^{E,H} H_m'(ka) - a_m^{E,H} \beta^{E,H} J_m'(k_1 a) = J_m'(ka) \end{cases}. \quad (2.33)$$

З рівняння (2.33) знаходяться невідомі коефіцієнти розкладання полів  $a_m^{E,H}$  та  $b_m^{E,H}$ ,

$$a_m^{E,H} = \frac{J_m'(ka) H_m(ka) - J_m(ka) H_m'(ka)}{D_m^{E,H}}, \quad (2.34)$$

$$b_m^{E,H} = \frac{J_m'(ka) J_m(k_2 a) - \beta^{E,H} J_m(ka) J_m'(k_2 a)}{D_m^{E,H}}, \quad (2.35)$$

де  $D_m^{E,H} = J_m(k_1 a) H_m'(ka) - \beta^{E,H} J_m'(k_1 a) H_m(ka)$ ,  $\beta^E = \alpha$ ,  $\beta^H = 1/\alpha$ .

Дослідженню дифракції плоскої хвилі на циліндричному розсіювачі приділялося багато уваги в літературі. В аспекті даної роботи інтерес викликають результати для субхвильової срібної нитки в світловому діапазоні. Ці результати будуть слугувати прикладом для порівняння характеристик розсіяння скінченних ланцюжків та решіток з нанониток.

ППР для одиночної нитки, який розраховано за допомогою (1.2) має наступний вигляд:

$$\sigma_s = \frac{1}{P_0} \int_0^{2\pi} P_r r d\varphi = \frac{4}{k} \sum_{m=-\infty}^{\infty} |b_m^{E,H}|^2. \quad (2.36)$$

Для випадку розсіяння світла на субхвильовій срібній нитці цікавий випадок Н-поляризації та виникаючий у цьому випадку плазмонний резонанс. На Рис. 2.2 представлено залежності ППР від довжини хвилі в діапазоні від 300 нм до 500 нм для срібних нанониток радіусу від 20 нм до 80 нм. Як видно з рисунку, дійсно, довжина хвилі плазмонного резонансу мало залежить від радіусу нитки, й знаходиться поблизу значення 350 нм. Разом з тим, радіус впливає на добротність резонансів, чим він більший, тим ширшими стають резонанси й трохи зсуваються в червону сторону спектру.

Якщо ж розглядати діелектричні нанонитки, в яких немає плазмонних

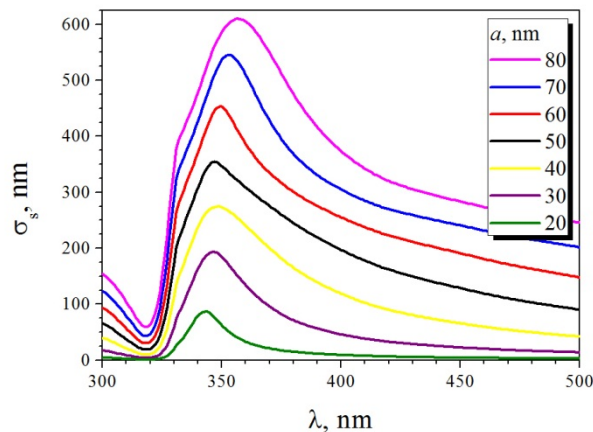


Рис. 2.2. ППР одиночних срібних нанониток різних радіусів в залежності від довжини хвилі.



мод та відповідних їм резонансів, то в діапазон, що розглядається, в обох поляризаціях мають можливість попасти один або невелике число резонансів на внутрішніх модах нитки з радіусом  $a \ll \lambda$ , однак тільки при умові, що  $\text{Re} \varepsilon \gg 1$ .

### Срібні нитки великого радіусу

Як відомо, наприклад, з роботи [162], зміщення довжини хвилі плазмонного резонансу на моді  $m$ -го азимутального індексу відносно його «книжкового» значення (для срібних нанониток це довжина хвилі, на якій  $\text{Re} \varepsilon_{Ag} = -1$ ,  $\lambda = 338$  нм) пропорційно відношенню  $m^{-1}(a/\lambda)^2$ . Саме тому в характеристиках розсіяння та поглинання світла субхвильовими нитками, коли  $a \ll \lambda$ , це зміщення дуже мале та на спектрах спостерігається лише один плазмонний резонанс, що вміщує всі плазмонні моди. Також зрозуміло, що коли  $a \gg \lambda$  (наприклад,  $a = 1$  мм це більше 1000 довжин хвиль видимого світла), то розсіяння підпорядковується законам геометричної оптики й ніякі плазмонні ефекти не спостерігаються. Тож далі ми з'ясуємо, як поведуться плазмонні резонанси, коли радіус нитки є порівняним та більшим за довжину хвилі.

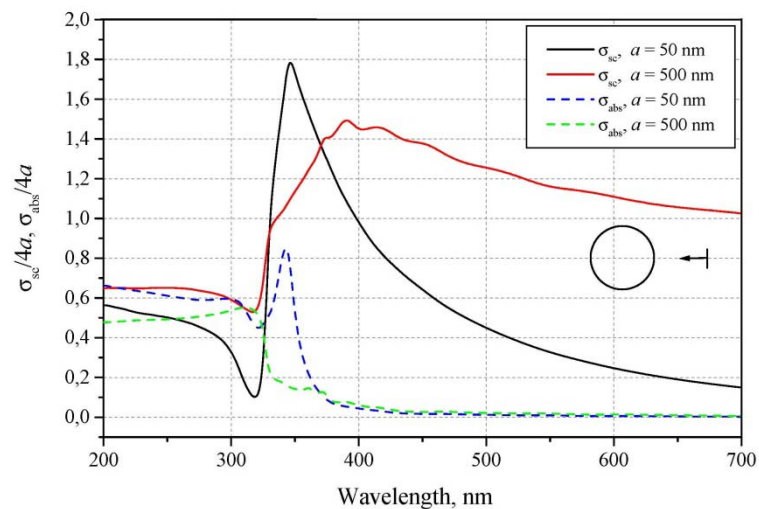


Рис. 2.3. Нормовані на  $4a$  ППР та ПП одиночної срібної нанонитки як функції довжини хвилі для двох значень радіусу  $a$ .

На Рис. 2.3 представлено графіки нормованих ППР та ПП в залежності від довжини хвилі у видимому діапазоні, для срібних ниток малого (50 нм) та великого (500 нм) радіусів. Колективний пік на плазмонних модах добре видимий в обох випадках для розсіяння, але тільки для  $a = 50$  нм для поглинання. Якщо  $a \leq 50$  нм, то піки ППР та ПП знаходяться в ультрафіолеті на довжинах хвиль, близьких до «книжкового» значення 338 нм. Однак для  $a = 500$  нм пік ППР помітно зміщується в фіолетову частину спектру та, крім того, модулюється кількома окремими малими піками. Щоб зрозуміти, що це за малі піки та чому зміщується основний пік, побудуємо рельєфи ППР та ПП як функції двох змінних: довжини хвилі та радіусу нитки.

Вони представлені на Рис. 2.4. У вставках у збільшеному масштабі показано область, в нижній частині якої виконується «субхвильове правило»  $ka < 1$ ,  $ka|\alpha_{Ag}| < 1$  (біла вертикальна пунктирна лінія відповідає значенню 338 нм). Тут ми бачимо майже регулярну структуру з чисельних резонансів ППР та ПП, що знаходяться праворуч від значення  $\lambda = 338$  нм та є добре видимими для всіх  $a \geq 20$  нм. Вони формують локально періодичні по  $a$  області на рельєфах ППР та ПП, навіть для  $a = 1000$  нм або більшого.

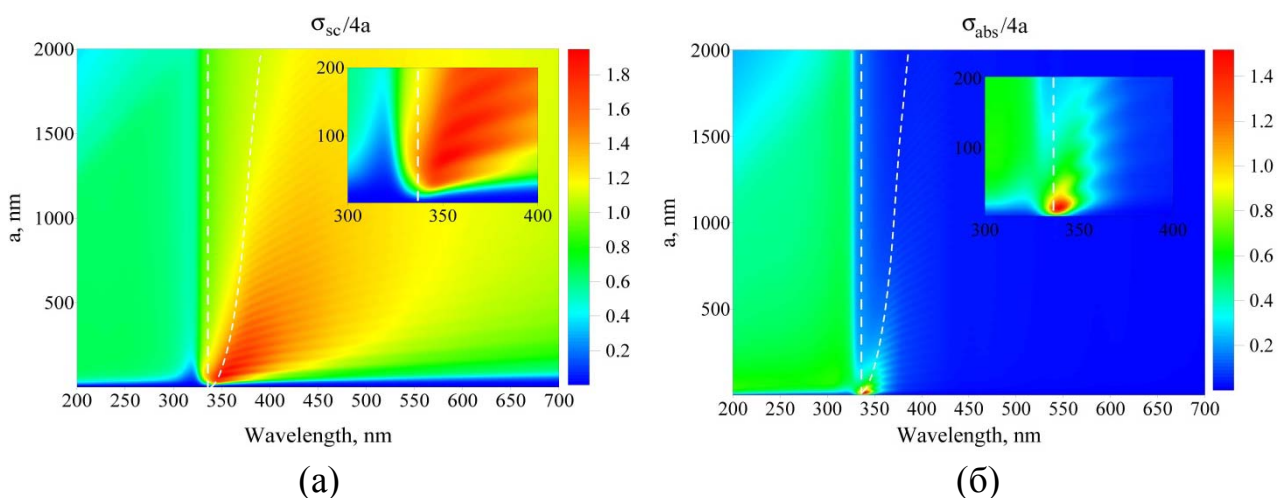


Рис. 2.4. Рельєфи нормованих на  $4a$  ППР (а) та ПП (б) як функції довжини хвилі та радіусу срібної нитки.

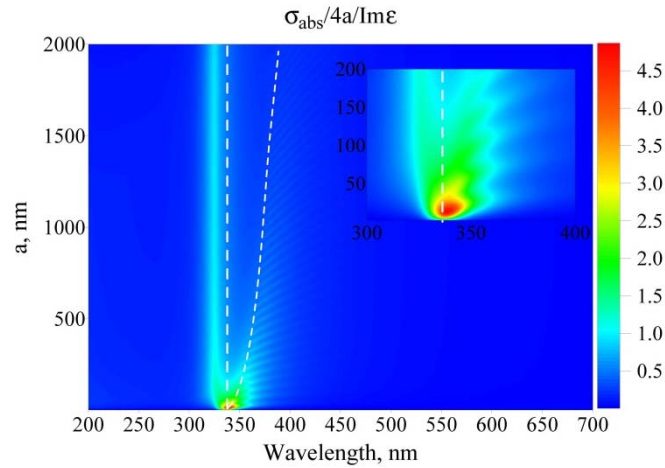


Рис. 2.5. Рельєф нормованого на  $4a \text{Im}\epsilon_{Ag}(\lambda)$  ПП срібної нитки як функції довжини хвилі та радіусу.

На Рис. 2.5 рельєф нормованого на  $4a$  ПП додатково нормований на фактор  $\text{Im}\epsilon_{Ag}(\lambda)$ , що залежить від довжини хвилі. Це зроблене для того, щоб усунути ефект від об'ємних втрат у сріблі, які зростають в ультрафіолеті (це виглядає як зелена область на Рис. 2.4(б) ліворуч від лінії 338 нм). Потрібно відмітити, що вертикальний гребінь на  $\lambda = 325$  нм при цьому зберігає свою форму для будь-якого радіусу більше за 50 нм. Відповідно до даних з [75], на цій довжині хвилі  $\text{Re}\epsilon_{Ag} = 0$ , а  $\text{Im}\epsilon_{Ag} = 0.4$ . Після додаткового нормування,

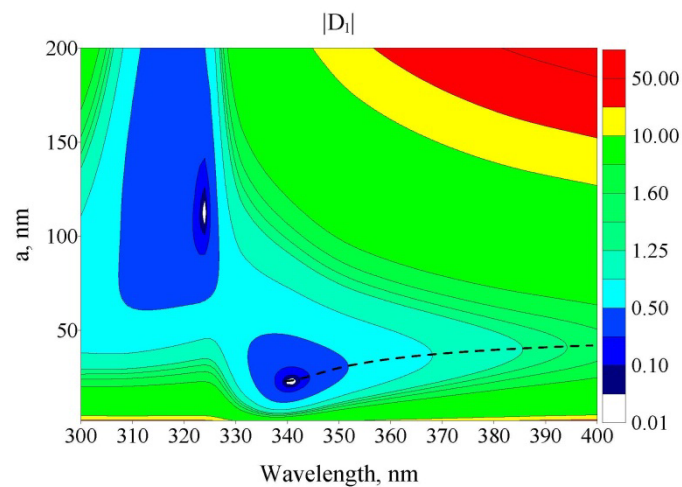


Рис. 2.6. Рельєф  $|D_1|$  як функції довжини хвилі та радіусу срібної нитки (для  $m = 1$ ), чорна пунктирна лінія демонструє мінімум на фіксованій  $\lambda$ .

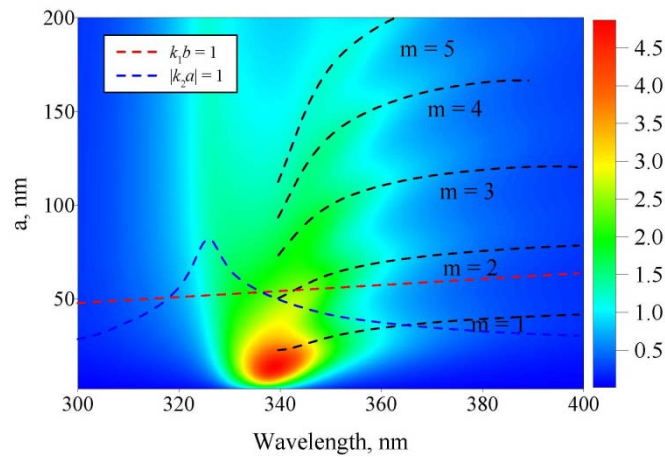


Рис. 2.7. Рельєф нормованого на  $4a \text{Im} \varepsilon_{Ag}(\lambda)$  ПП срібної нанонитки як функції довжини хвилі та радіусу, з нанесеними на нього кривими  $ka = 1$  (червоний пунктир) та  $ka |v_{Ag}| = 1$  (синій пунктир); чорні пунктирні лінії відповідають мінімумам  $|D_m|$  для різних індексів  $m$ .

окремі резонанси помітні ще краще. Далі ми покажемо, що вони пов'язані з мінімумами функцій  $|D_m|$  ( $m = 1, 2, \dots$ ), тобто мультипольними ЛПП модами.

З цією метою на Рис. 2.6 представлено рельєф  $|D_1|$  як функцію довжини хвилі та радіусу нитки. Як видно, він має два глибоких мінімуми  $|D_1|$  поблизу  $\lambda = 340$  нм та 325 нм. Мінімум, що знаходиться біля  $\lambda = 325$  нм відповідає вторинній плазмонній моді, яка може бути виявлена при використанні модифікованої формули Друде для опису діелектричної

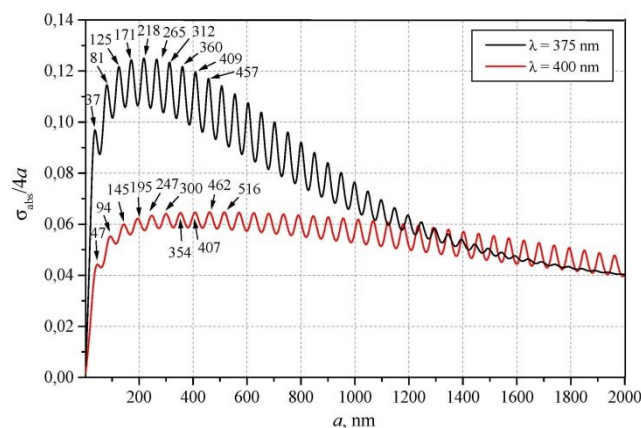


Рис. 2.8. Нормований ПП срібної нитки як функція її радіусу.

проникності срібла (див. [78-80]). Ця мода не відображається в якості резонансу на Рис. 2.3, тому що у срібла великі втрати в ультрафіолеті. Однак мінімум на 340 нм відповідає звичайній плазмонній моді дипольного типу. Рельєфи  $|D_m|$  для  $m > 1$  виглядають подібним чином.

На Рис. 2.7 наведено рельєф ПП з нанесеними на нього лініями мінімумів  $|D_m|$  для індексів  $m = 1, 2, 3, 4$  та 5. Як можна побачити, максимуми ПП співпадають з мінімумами  $|D_m|$ .

Для того щоб виявити фізику, що лежить в основі резонансної поведінки нитки з радіусом, більшим за довжину хвилі, на Рис. 2.8 приведено графіки ПП як функції радіусу, пораховані на фіксованих довжинах хвиль. Як видно, для великих  $a$  відстані, по вісі  $a$ , між сусідніми піками дорівнюють 49.5 нм на  $\lambda = 375$  нм. Це відповідає значенню довжини дуги у 311 нм.

Це значення можна порівняти з довжиною поверхневої плазмонної хвилі на плоскій нескінченній границі між сріблом та вільним простором. Аналітичний вираз для постійної поширення цієї хвилі наведено у [117].

$$\gamma'_{sp} = k \operatorname{Re} \left[ \frac{\varepsilon_M(\lambda)}{\varepsilon_M(\lambda) + 1} \right]^{1/2} = k \left[ \frac{\varepsilon'_M(\lambda)}{\varepsilon'_M(\lambda) + 1} \right]^{1/2} + k O(\varepsilon_M''^2) > k \quad (2.33)$$

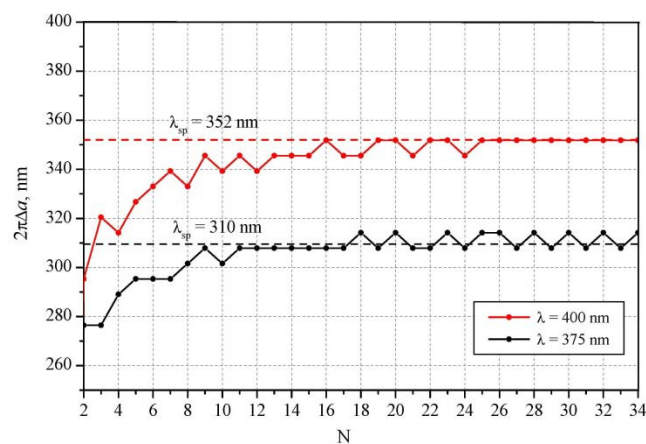


Рис. 2.9. Відстані між сусідніми довжинами окружностей ниток, яким відповідають максимуми ПП на Рис. 2.7, в залежності від номеру максимуму.

На Рис. 2.9 зображено залежності відстаней між піками в одиницях довжини дуги від кількості піків, пораховані від малого радіусу. Пунктирними лініями нанесено значення  $\lambda_{SP}(\lambda) = 2\pi / \gamma'_{SP}$ , пораховані за допомогою (2.33) з використанням даних з [75]. Як можна побачити, як тільки довжина окружності срібної нитки наближається до  $10\lambda_{SP}$ , то, з точністю до кількох відсотків, резонанси можуть бути інтерпретовані, як послідовні резонанси поверхневої плазмонної хвилі (2.33), що біжить навколо нитки. Але також кожен з них може бути інтерпретований, як ЛПП мода  $m$ -го порядку, яка є розв'язком рівняння  $D_m(\lambda, a) = 0$ .

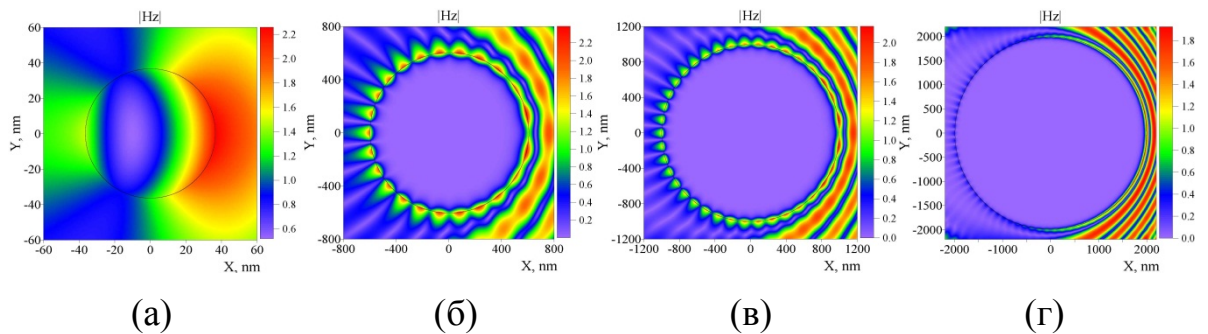


Рис. 2.10. Картини ближніх полів в максимумах ПП для срібних ниток радіусу  $a = 37$  нм (а),  $604$  нм (б),  $998$  нм (в) та  $2000$  нм (г) на  $\lambda = 375$  нм.

На Рис. 2.10 (а)-(в) зображено картини ближніх магнітних полів, обчислених в максимумах ПП для ниток різних радіусів на фіксованій довжині хвилі  $\lambda = 375$  нм (чорна крива на Рис. 2.8). На цих картинах полів чітко видно стоячі хвилі відповідних ЛПП мод: дипольної моди  $P_1$  (а) та мультипольних мод  $P_{13}$  (б) та  $P_{21}$  (в).

На відміну від вищезгаданих картин ближнього поля, на полі, що наведено на Рис. 2.10(г) не видно стоячої вздовж границі нитки радіусу  $2000$  нм хвилі. Це пов'язано з тим, що розмір тіньової частини нитки, тобто половина довжини її окружності, є значно більшим за відстань поширення поверхневої плазмонної хвилі вздовж нескінченної границі між сріблом та вільним простором. Ця відстань визначається як  $l_{SP} = \gamma_{SP}^{n-1}$ , де

$$\gamma_{SP}'' = k \operatorname{Im} \left[ \frac{\varepsilon_M(\lambda)}{\varepsilon_M(\lambda) + 1} \right]^{1/2} = k \frac{\varepsilon_M''(\lambda)}{2\varepsilon_M'^{1/2}(\lambda)[\varepsilon_M'(\lambda) + 1]^{3/2}} + kO(\varepsilon_M''^2) < k \quad (2.34)$$

Пораховані значення  $a_{\text{lim}} = l_{SP} / \pi$  нанесені на рельєфи на Рис. 2.4 та 2.5 (білі пунктирні криві) утворюють параболу  $a_{\text{lim}} = \text{const} \cdot \lambda^2$ , вище за яку мультипольні ЛПП моди не спостерігаються. Це відповідає елементарним спостереженням, що на великих металевих розсіювачах у видимому діапазоні присутні лише ефекти геометричної оптики.

### 2.3 Лінійна решітка зі скінченного числа діелектричних нанониток

Поперечний переріз лінійної решітки з  $M$  однакових ниток радіусу  $a$ , які розташовані з періодом  $p$  площиною  $XOY$  наведено на Рис. 2.11. У цьому підрозділі роботи будуть розглянуті діелектричні нанонитки з дійсними діелектричними проникностями (тобто без втрат), що опромінюються плоскою хвилею в світловому діапазоні. Перш за все необхідно відмітити, що раніше в роботах [46,47] досліджувалися характеристики розсіяння в залежності від параметрів  $ka$  і  $kp$  – у цьому випадку на графіках ППР спостерігаються резонанси великого періоду (пов'язані з ГО, тобто з обгинанням хвилею перешкоди) і малого періоду на модах типу шепочучої галереї.

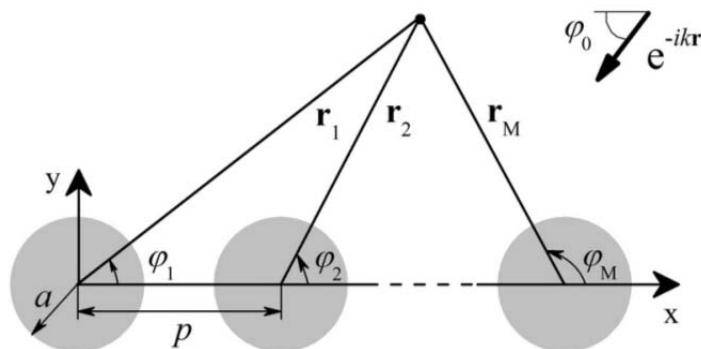


Рис. 2.11. Поперечний переріз скінченної решітки з кругових ниток, що опромінюється плоскою хвилею.



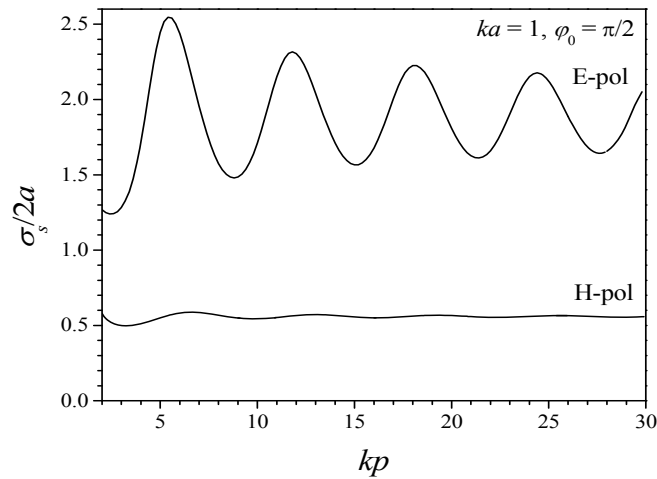


Рис. 2.12. Залежність ППР від хвильової відстані між двома циліндрами,  $ka = 1$ ;  $\varphi_0 = \pi/2$ ;  $\varepsilon = 2.25$ .

Рис. 2.12-2.13 демонструють ці резонанси для двох циліндричних розсіювачів. На Рис. 2.12 представлено залежність нормованого ППР від відстані  $kp$  між субхвильовими циліндрами ( $ka = 1$ ,  $\varepsilon = 2.25$ ) при нормальному падінні, яка демонструє резонанси великого періоду ( $2\pi$ ) для двох поляризацій. На Рис. 2.13 представлено частотну залежність нормованого ППР для нормального та поздовжнього падіння Е-поляризованої плоскої хвилі на два циліндри ( $p = 4a$ ,  $\varepsilon = 4$ ), яка демонструє резонанси на модах типу шепочучої галереї.

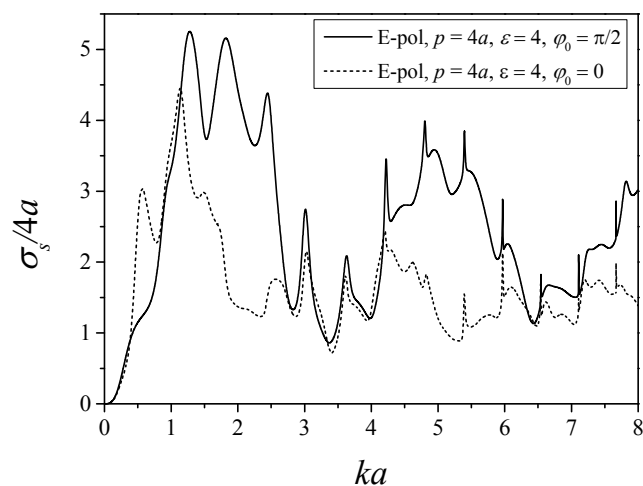
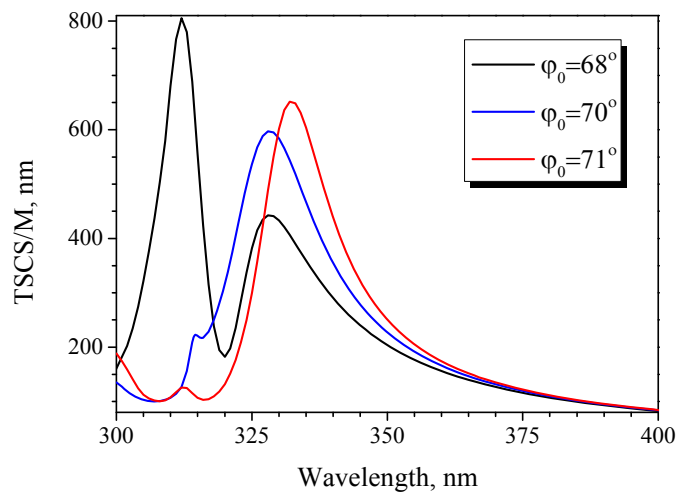


Рис. 2.13. Залежність нормованого ППР двох циліндрів від нормованої частоти,  $\varepsilon = 4$ ,  $p = 4a$ .

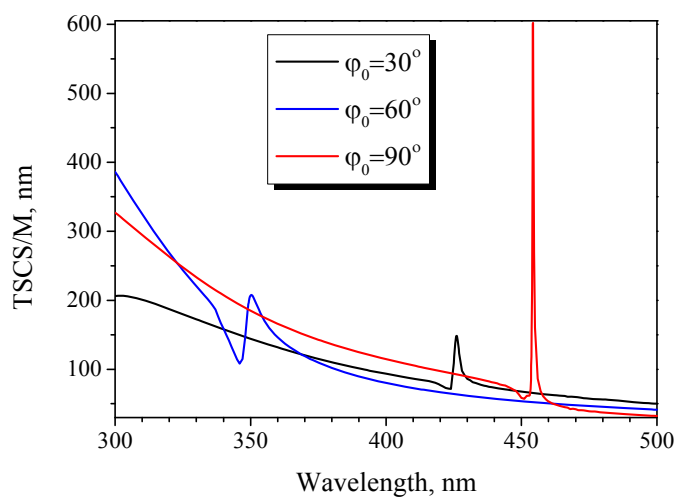


Далі будуть розглядатися решітки з діелектричних нанониток у світловому діапазоні, а саме 200-600 нм. Основною метою дослідження лінійних решіток з діелектричних нанониток було виявити та продемонструвати резонанси на ґраткових модах.

На Рис. 2.14 представлено графіки залежності нормованого ППР від довжини хвилі для декількох кутів падіння для решітки зі 100 нанониток. На Рис. 2.14(а) це кути  $68^\circ$ ,  $70^\circ$  і  $71^\circ$ , тобто біля перетину -1-ї та +2-ї аномалій Релея для нескінченної решітки такого ж періоду.



(a)



(б)

Рис. 2.14. Залежності нормованого ППР (в нм) від довжини хвилі для декількох кутів падіння плоскої хвилі для решітки зі 100 нанониток (Н-поляризація,  $a = 60$  нм,  $p = 450$  нм,  $\alpha = 2$ ).

Як видно, при  $\varphi_0 = 68^\circ$  виникають два розташованих близько один від одного достатньо інтенсивних резонанси. Для кутів падіння  $70^\circ$  и  $71^\circ$  перший резонанс практично зникає, а другий, який відповідає -1-й гратковій моді (та -1-й гармоніці Флоке, що розповсюджується, для випадку нескінченної решітки) навпаки, зростає. Через те, що ми розглядаємо випадок, коли втрати у нитках відсутні ( $\text{Im}\varepsilon = 0$ ), то решітка навіть зі 100 ниток демонструє інтенсивні резонанси на граткових модах. Для порівняння, на Рис. 2.14(б) представлено спектри нормованого ППР для кутів падіння  $30^\circ$ ,  $60^\circ$  и  $90^\circ$ , тобто на +2-й, +2-й та  $\pm 1$ -х ГМ відповідно. Значення ППР в резонансах обчислені з високою точністю і роздільною здатністю, що дозволило

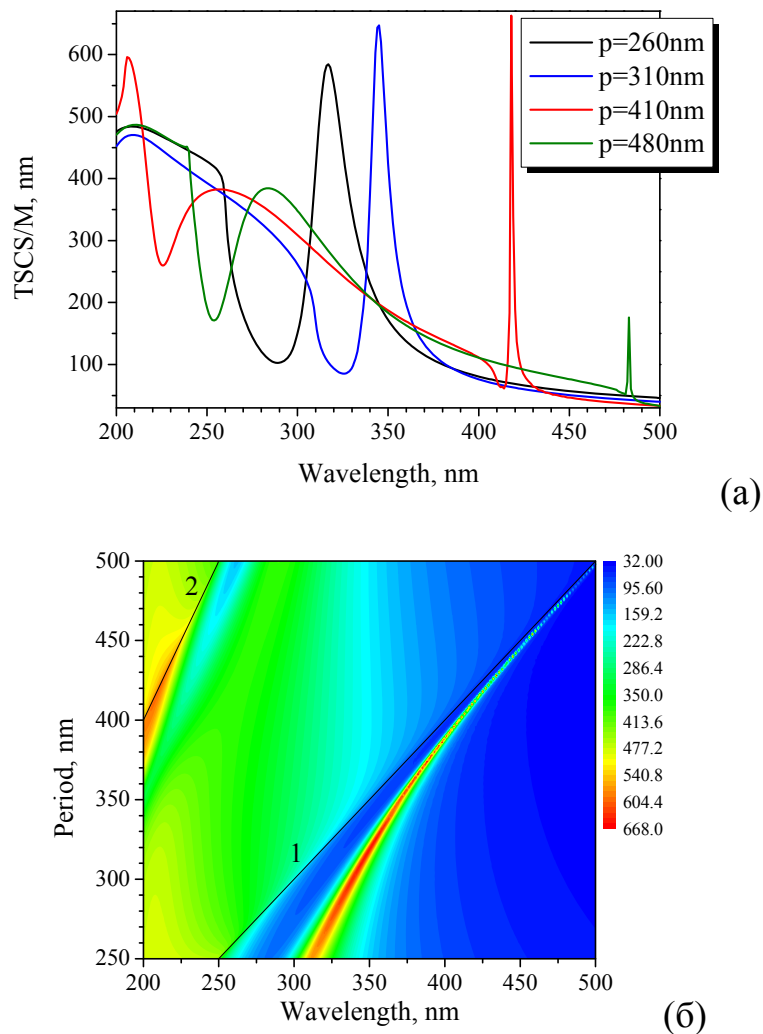


Рис. 2.15. Зрізи по лініям періоду (а) рельєфу нормованого ППР (в нм) як функції періоду та довжини хвилі (б) для решітки зі 100 нанониток (Н-поляризація,  $a = 60$  нм,  $\alpha = 2$ ) при нормальному падінні.

побачити добротність резонансу у випадку нормального падіння. Незважаючи на те, що ППР сягає максимальних значень у районах перетину  $-1$ -ї та  $+2$ -ї або  $+1$ -ї та  $-2$ -ї аномалій Релея, при нормальному падінні (тобто на  $\pm 1$  ГМ) резонанс стає набагато гострішим.

Тепер подивимося на рельєф нормованого ППР як функцію довжини хвилі в діапазоні 200-500 нм та періоду в діапазоні 250-500 нм у випадку нормального падіння. Такий рельєф, а також зрізи по лініям періоду, представлено на Рис. 2.15. На рельєфі також нанесено лінії  $\pm 1$ -х і  $\pm 2$ -х АР для випадку нескінченної решітки. Як видно, при  $p > 400$  нм в розглянутому діапазоні можна спостерігати два резонанси. Також біля лівої смуги резонансних значень ППР для  $\pm 2$  АР (Рис. 2.15(a)), трохи правіше, добре видно також смугу низьких значень ППР, таку саме, навіть більш широку, смугу низьких значень видно між лінією  $\pm 1$ -ї АР та лінією ґраткових резонансів. Це демонструє, що ґраткові резонанси мають форму резонансів Фано. Також з Рис. 2.15 видно, що чим далі розходяться лінії АР, тим більшу добротність має резонанс на  $\pm 1$  ГМ. Дуже цікавим є те, що якщо радіус ниток дорівнює 60 нм, то добротність резонансу на  $\pm 1$  ГМ зростає не монотонно з ростом періоду, а сягає максимуму для періодів у проміжку між 420-460 нм. Ще необхідно відмітити, що незважаючи на те, що залежність добротності ґраткових резонансів від оптичної щільності матеріалу нанониток не досліджувалася, результати, які отримано в роботі [9] говорять про те, що для оптично щільніших ниток в оптичному діапазоні необхідна більша кількість елементів решітки, аби ґратковий резонанс був добротним.

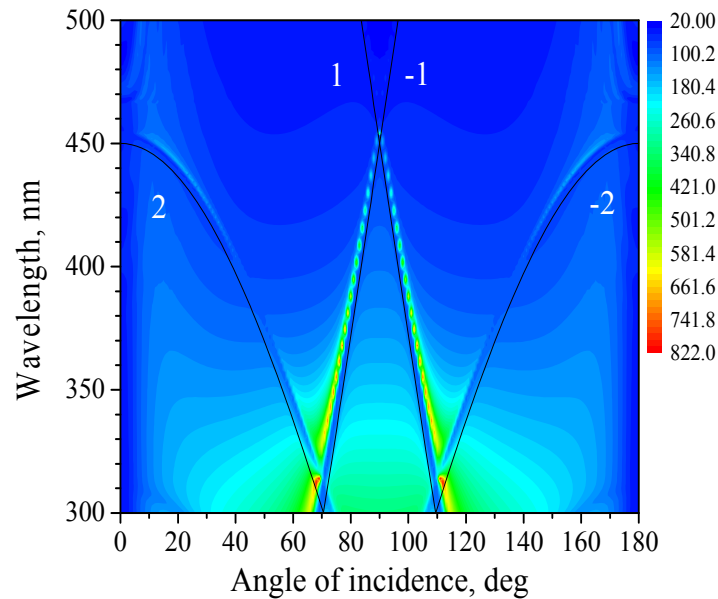


Рис. 2.16. Рельєф нормованого ППР як функції довжини хвилі та кута падіння плоскої хвилі для решітки зі 100 нанониток з такими ж параметрами, як і на Рис. 2.14.

На Рис. 2.16 представлено рельєф нормованого на кількість ниток ППР в залежності від довжини хвилі та кута падаючої хвилі у верхньому напівпросторі від 0 до 180°. На рельєфі досить добре видно W-образну зону резонансних значень ППР – ми назвали її «підписом періодичності». Як було сказано вище, ґраткові резонанси виникають на довжинах хвиль, які близькі до аномалій Релея для випадку нескінченної решітки, які, в свою чергу, можуть бути обчислені за формулою  $\lambda_{\pm m}^{RA} = (p/|m|)(1 \pm \cos \varphi_0)$ . Ці лінії  $\pm 1$ -х і  $\pm 2$ -х аномалій Релея також нанесено на рисунок для наочності. Цей рельєф побудовано з фіксованим кроком у 1° і 1 нм по вісям X і Y, відповідно. Але через неймовірно високу добротність резонансів на ГМ лінії великих значень ППР, навіть з таким малим кроком, на рельєфі не виглядають гладкими та неперервними, якими насправді вони є. Як видно, для досліджених решіток довжини хвиль резонансів на ГМ трохи не збігаються з довжинами хвиль аномалій Релея, а найкращий збіг спостерігається у випадку нормального падіння, тобто  $\varphi_0 = 90^\circ$ .

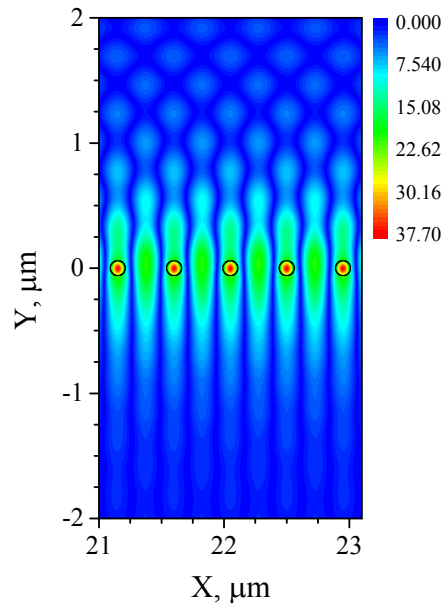


Рис. 2.17. Картина ближнього поля ( $H_z$ ) для чотирьох центральних періодів у резонансі на ГМ на довжині хвилі  $\lambda = 454.25$  нм для решітки зі 100 нанониток з періодом 450 нм, нормальне падіння.

Також при нормальному падінні виникає найбільш добротний резонанс на ГМ.

На Рис. 2.17 представлено картину ближнього поля в резонансі червоної кривої з Рис. 2.15(a). На картині добре видно інтенсивну стоячу хвилю вздовж решітки. Ця стояча хвиля має яскраві максимуми та протилежні фази на нитках та поміж ними, які сформовані двома  $\pm 1$ -ми квазі-гармоніками Флоке, що розповсюджуються в протилежних напрямках. Відмітимо, що така картина характерна саме для резонансів на ґраткових модах.

### Випадок Е-поляризації

На Рис. 2.18 наведено рельєф нормованого ППР як функції періоду та довжини хвилі для решітки з  $M = 50$  нанониток радіусу 60 нм з  $\alpha = 2$  та зріз по лінії періоду 450 нм з цього рельєфу разом з графіками ППР для решіток з таких самих ниток з  $M = 2, 20$  та 100 для випадку Е-поляризації ( $\varphi_0 = \pi / 2$ ). Як можна побачити, біля довжин хвиль аномалій Релея функція ППР сягає

мінімумів, але резонанси на РМ також присутні, хоча мають меншу добротність та є більш віддаленими від довжин хвиль аномалій Релея ніж у випадку Н-поляризації.

Картини ближніх полів в мінімумі поблизу  $\pm 1$ -ї аномалії Релея ( $\lambda = 453$  нм) та резонансі ( $\lambda = 522$  нм) синьої кривої з Рис. 2.18(а) представлено на Рис. 2.19. Картина поля на Рис. 2.19(а) характерна для полів в аномаліях Релея: діелектричні нитки знаходяться в мінімумах електричного поля, а поле має майже симетричну «шахову» структуру. Резонансне поле на Рис. 2.19(б)

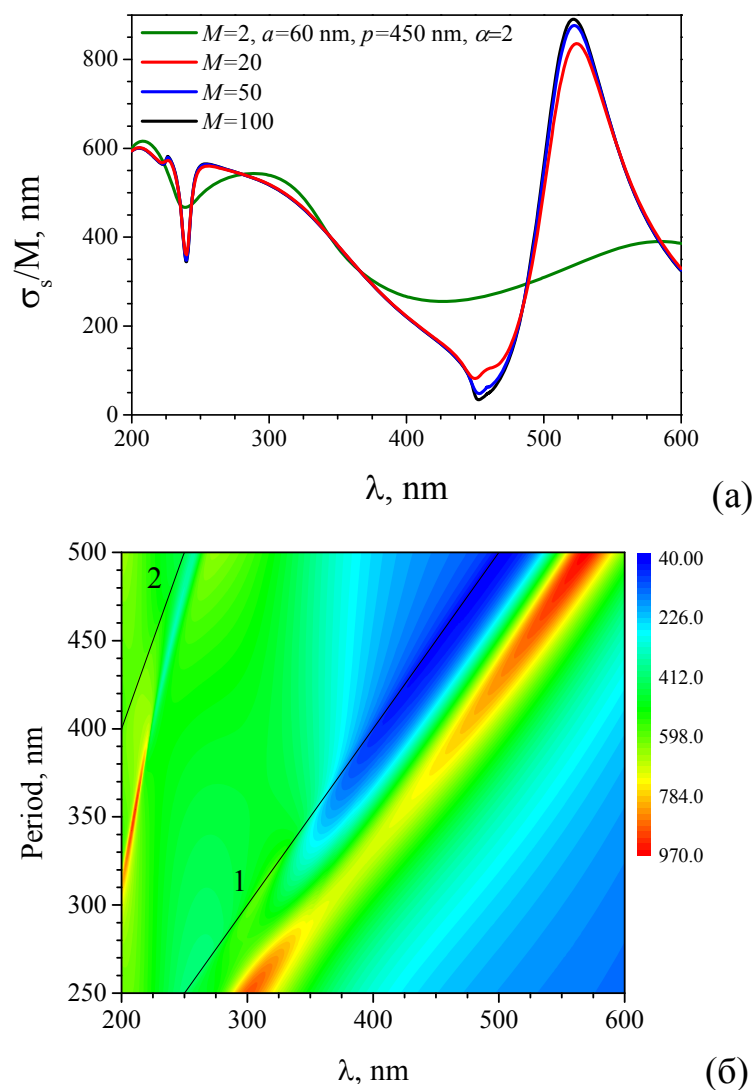


Рис. 2.18. Залежності нормованого ППР від довжини хвилі для решіток з різним  $M$  (а), а також рельєф нормованого ППР як функції періоду та довжини хвилі (б) для решітки з  $M = 50$ ,  $a = 60$  нм,  $\alpha = 2$  при нормальному падінні Е-поляризованої плоскої хвилі.

демонструє стоячу вздовж решітки хвилю з максимумами електричного поля на нитках та мінімумами між ними, що є характерним для резонансів на РМ.

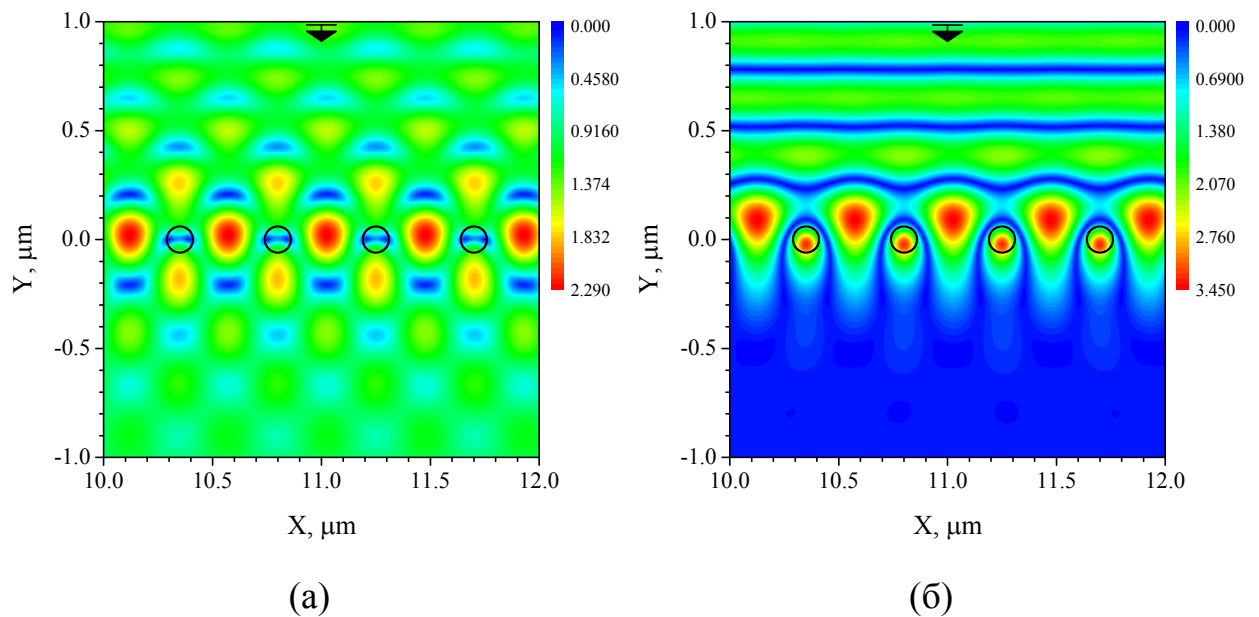


Рис. 2.19. Картини ближніх полів ( $E_z$ ) для чотирьох центральних періодів в мінімумі ППР поблизу аномалії Релея на  $\lambda = 453$  нм (а) та в резонансі на РМ на  $\lambda = 522$  нм (б) для решітки з 50 нанониток з параметрами  $a = 60$  нм,  $p = 450$  нм,  $\alpha = 2$ .

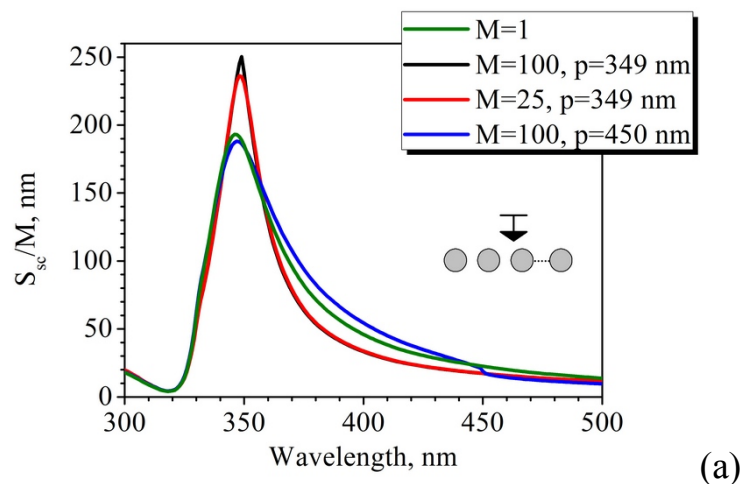
#### 2.4 Властивості лінійної решітки зі скінченного числа срібних нанониток

В цьому підрозділі будуть розглянуті лінійні решітки зі скінченного числа срібних нанониток у світловому діапазоні. Тому як срібло має комплексні діелектричну проникність та коефіцієнт заломлення, то окрім характеристик розсіяння буде розглянута характеристика поглинання – переріз поглинання  $\sigma_a$ , яку було введено в розділі 1. Світловий діапазон довжин хвиль цікавий тим, що в ньому виникають резонанси на плазмонних модах металевих розсіювачів. Таким чином, обравши відповідний період решітки, можна домогтися проявлення двох типів резонансів, а також прослідкувати їхню взаємодію. Також необхідно відмітити, що тому як

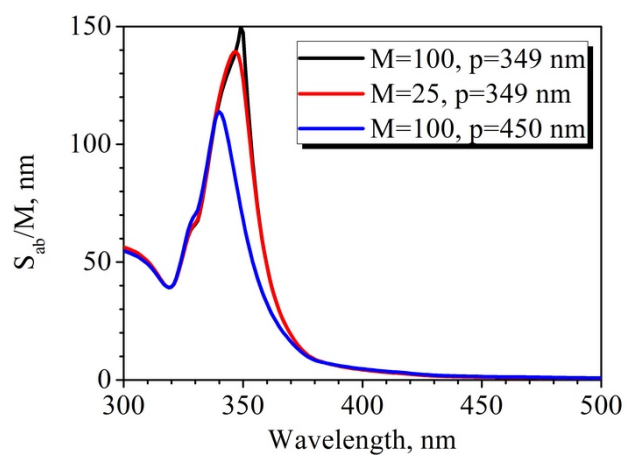
плазмонний резонанс спостерігається лише у випадку Н-поляризації, то й більшість результатів буде присвячено саме їй.

В даній роботі розглядаються срібні нанонитки, і як видно з попереднього розділу, їхні розміри підбираються таким чином, щоб це були субхвильові нанонитки (радіусу від 10 нм до 100 нм, тому що при менших розмірах стають суттєвими нелокальні ефекти), для світла ультрафіолетового та видимого діапазонів, тобто для довжин хвиль від 190 нм. Це обумовлено також тим, що експериментальні дані з [75] для показника заломлення срібла починаються від цього значення довжини хвилі.

Найбільш цікаве питання – це питання, що стається з піковими значеннями характеристик решітки, що досліджуються, коли довжини хвиль плазмонного та граткового резонансів збігаються.



(a)



(б)

Рис. 2.20. Залежності нормованих ППР (а) і ПП (б) від довжини хвилі для решіток зі срібних нанониток з  $a = 30 \text{ нм}$ ,  $\varphi_0 = \pi / 2$ .



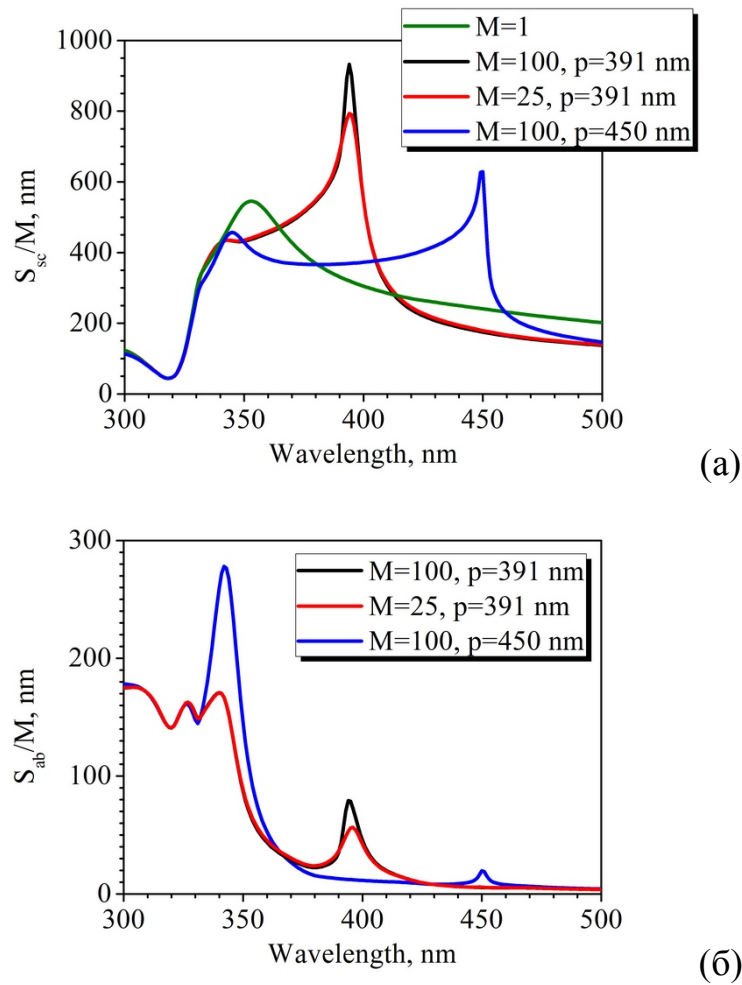


Рис. 2.21. Те ж саме, що й на Рис. 2.20 для решіток з нанониток з  $a = 70$  нм.

Як основний інструмент для їхнього збігу використовувалося змінювання періоду решітки, тому що плазмонний резонанс має фіксовану довжину хвилі, біля його значення для однієї нитки,  $\lambda^p$ . Наприклад, спектри ППР і ПП для одиночних срібних нанониток з радіусами 30 і 70 нм мають широкі максимуми на 348 нм та 349 нм, відповідно. На Рис. 2.20-2.21 представлено графіки нормованих на кількість ниток ППР та ПП для декількох розріджених решіток з  $M = 100$  ниток одного радіусу. На цих графіках видно, що ґратковий резонанс для решіток зі значенням періоду, далеким від значення довжини хвилі плазмонного резонансу, за великим рахунком не впливає на ППР: його видно лише як маленький виступ на широкому плечі плазмонного резонансу.

Така поведінка значно змінюється, якщо ґратковий резонанс зсунений близько до  $\lambda^P$ : у цьому випадку виникає набагато більш інтенсивний резонанс. Для решітки зі  $M = 100$  ниток з радіусом  $a = 70$  нм, значення максимуму нормованого ППР у 1.7 разів вище, ніж для одиночної нитки такого ж радіусу, та зсунуте в червону частину спектру на 42 нм до  $\lambda = 391$  нм. Під час дослідження було встановлено, що оптимальні значення радіусу ниток для того, щоб спостерігалось найбільш інтенсивне посилення ППР, лежать в діапазоні від 25 нм до 70 нм.

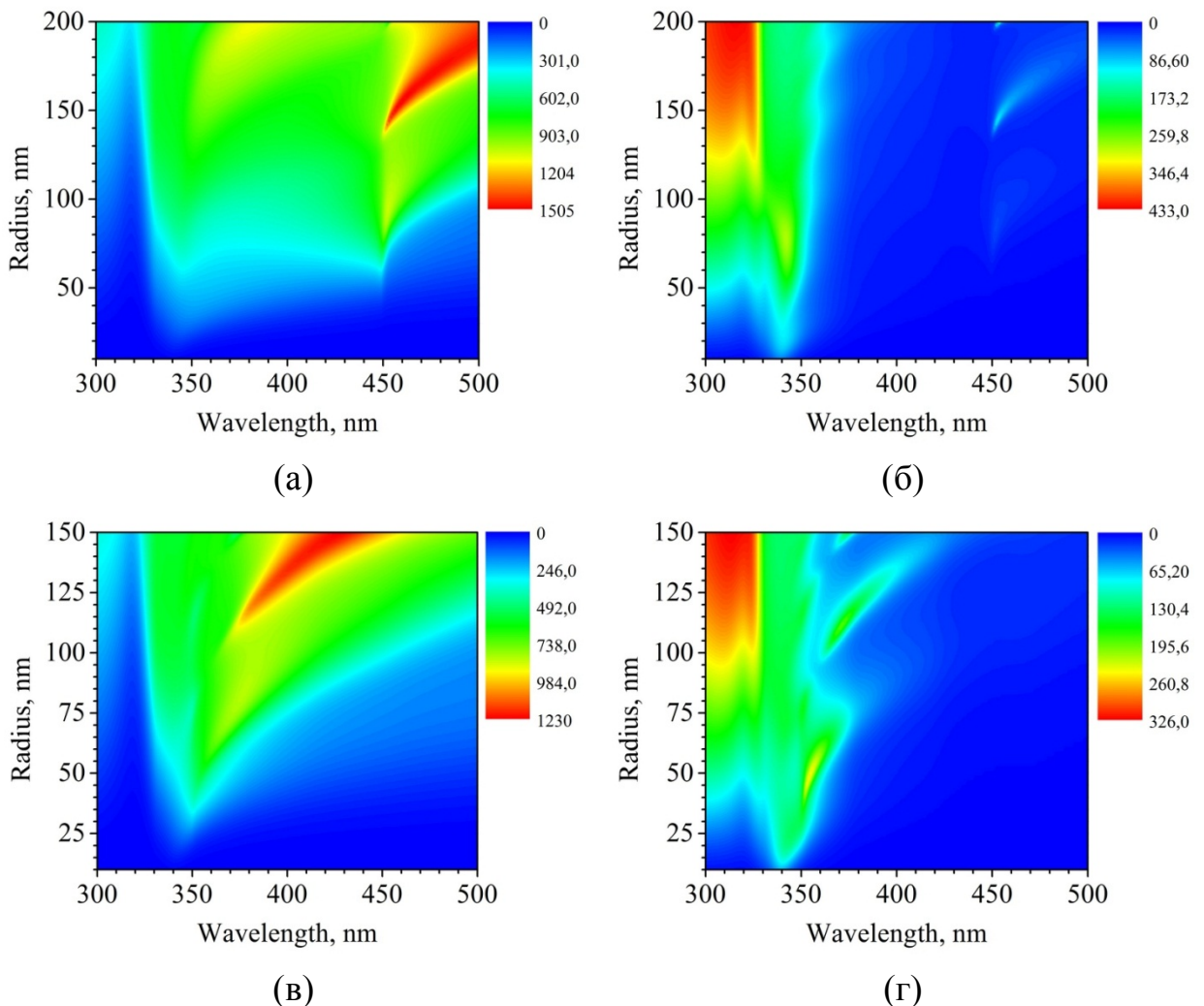


Рис. 2.22. Рельєфи нормованих ППР (а), (в) і ПП (б), (г) в залежності від довжини хвилі та радіусу для решіток з  $M = 100$  нанониток з періодами 450 нм (а-б) та 350 нм (в-г).

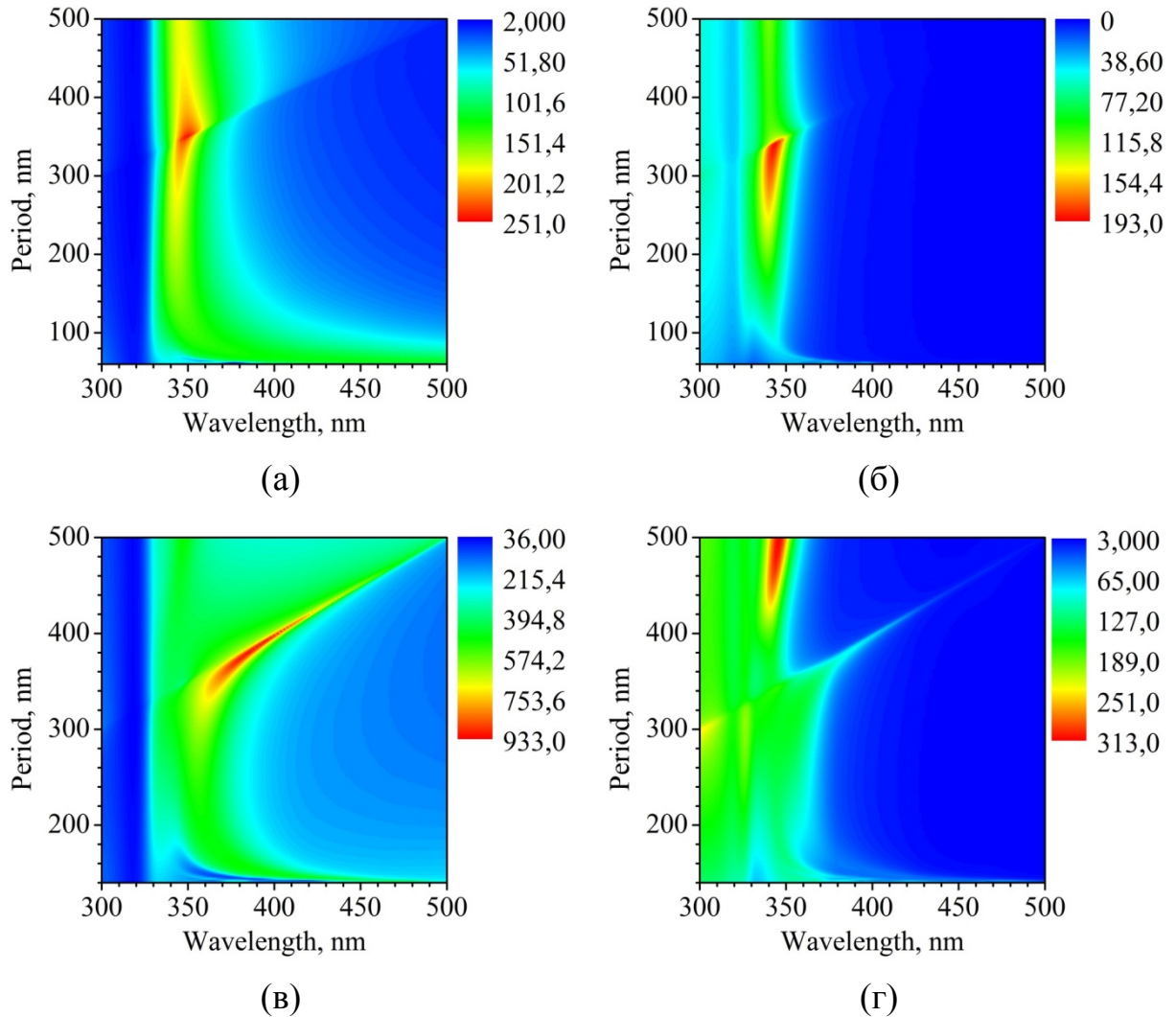


Рис. 2.23. Рельєфи нормованих ППР (а), (в) і ПП (б), (г) в залежності від довжини хвилі та періоду для решіток з  $M = 100$  нанониток радіусу 30 нм (а-б) та 70 нм (в-г).

Більш повну інформацію про поведінку нормованих на  $M$  ППР і ПП представлено на Рис. 2.22 і 2.23. На них представлено рельєфи згаданих характеристик як функцій довжини хвилі, радіусу та періоду, відповідно, для решіток з  $M = 100$  срібних ниток. На Рис. 2.22 (а-б) плазмонні та ґраткові резонанси добре розділені та знаходяться біля  $\lambda^p$  і  $p$ , відповідно, а резонанс на ГМ демонструє субрезонанси вищих порядків, які зсунуті в червону частину спектру для більш товстих ниток. На відміну від цього, на нижніх рельєфах (Рис. 2.22 (в-г)) ці два резонанси взаємно перекриваються.

На Рис. 2.23 добре видно яскраві плями посиленого розсіяння та поглинання, які тягнуться вздовж лінії  $\lambda = p$ . Для скінченних решіток ці області обумовлені тільки полюсами ґраткових мод, у даному випадку точки розгалуження функції поля відсутні. На протилежність ґратковим, плазмонні резонанси видно як вертикальні, менш яскраві плями біля довжини хвилі 345 нм. Це справедливо для розріджених решіток, тобто якщо  $p > 4a$ . Максимум розсіяння потрапляє на перетин цих двох плям. Для більш щільних решіток ( $p < 4a$ ), плазмонний резонанс зсувається в червону сторону через більш сильну оптичну взаємодію.

На Рис. 2.24 представлено діаграми амплітуди та фази для ближнього поля розрідженої решітки з 25 ниток з  $a = 30$  нм і  $p = 349$  нм у ґратковому резонансі, який спостерігається на довжині хвилі 348 нм. Для порівняння, на Рис. 2.25 представлено такі ж діаграми амплітуди та фази ближнього поля в ґратковому резонансі для решітки з 25 ниток з  $a = 70$  нм і  $p = 391$  нм, на

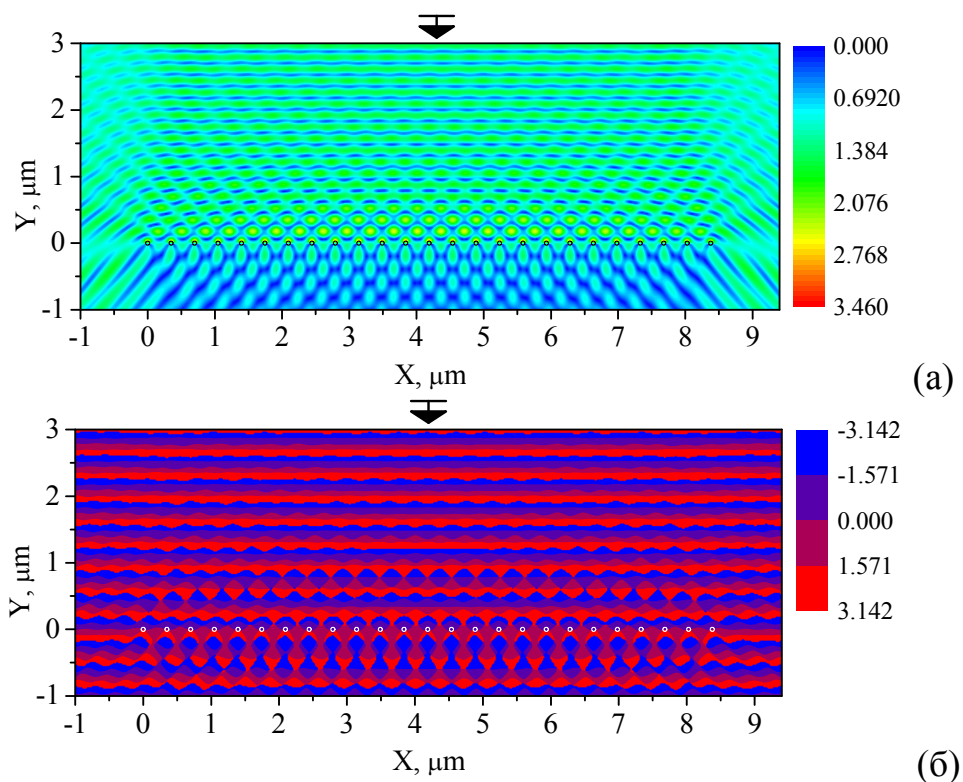


Рис. 2.24. Картини амплітуди (а) і фази (б) ближнього поля ( $H_z$ ) в резонансі ППР на довжині хвилі  $\lambda = 348$  нм для решітки з 25 нанониток з параметрами  $a = 30$  нм,  $p = 349$  нм.

довжині хвилі 394 нм. Контури ниток позначено чорними або білими кругами.

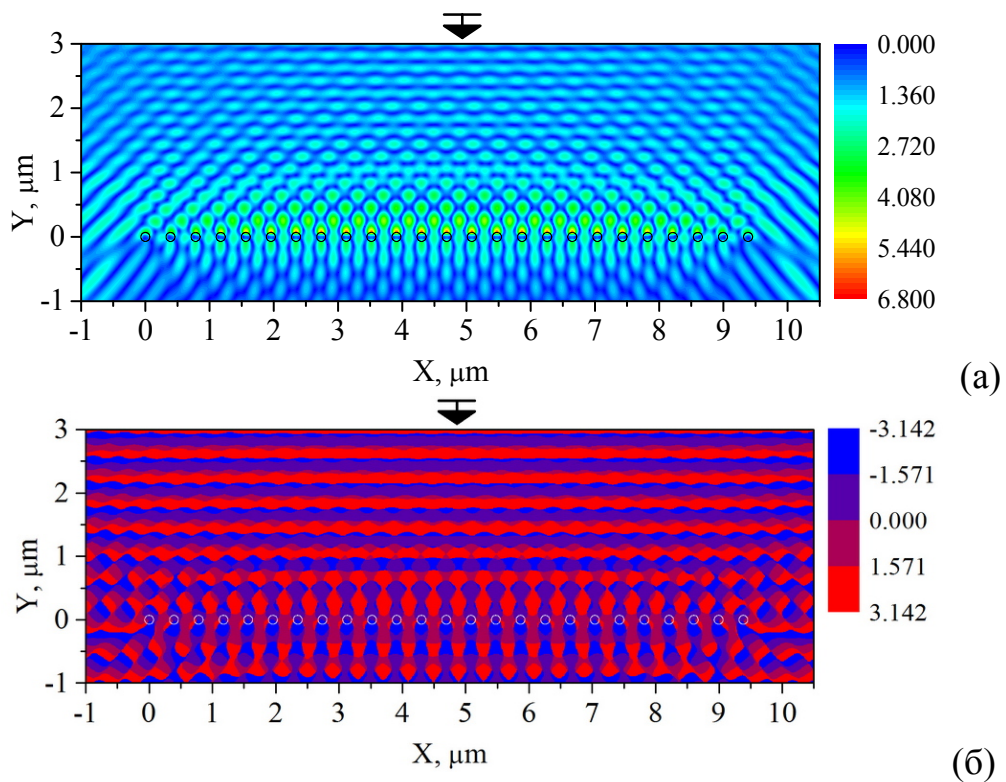


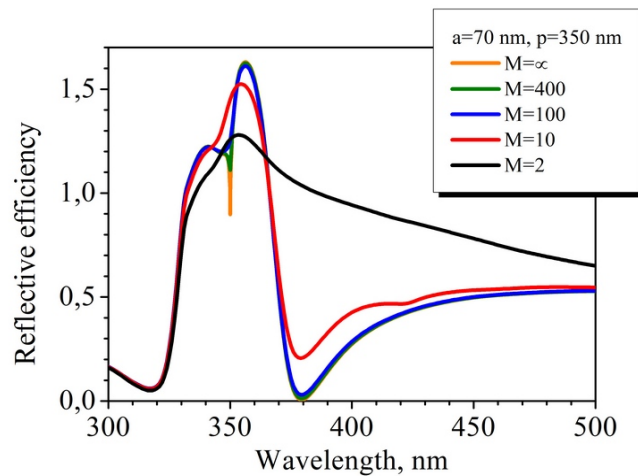
Рис. 2.25. Те ж саме, що й на Рис. 2.24 для решітки з параметрами  $M = 25$ ,  $a = 70$  нм,  $p = 391$  нм,  $\lambda = 394$  нм.

В обох випадках яскраві плями максимумів поля видно біля освітлених сторін ниток подібно випадку одиночної нитки [70, 72]. Додатково до цих плям добре видно дві інтенсивні стоячі хвилі: одну над решіткою, яка сформована падаючою плоскою хвилею та віддзеркаленим полем. Другу стоячу хвилю найбільш чітко видно на нижніх рисунках. Це хвиля, що стоїть уздовж решітки й розтягнута на довжину 2-3 періодів уздовж нормалі до неї. Ця стояча хвиля має два яскравих максимуми протилежної фази на кожній з ниток та поміж ними, тому як вона сформована двома  $\pm 1$  квазі-гармоніками Флоке, які розповсюджуються у протилежних напрямках. Така картина ближнього поля, як вже говорилося, і є ознакою ґраткового резонансу.

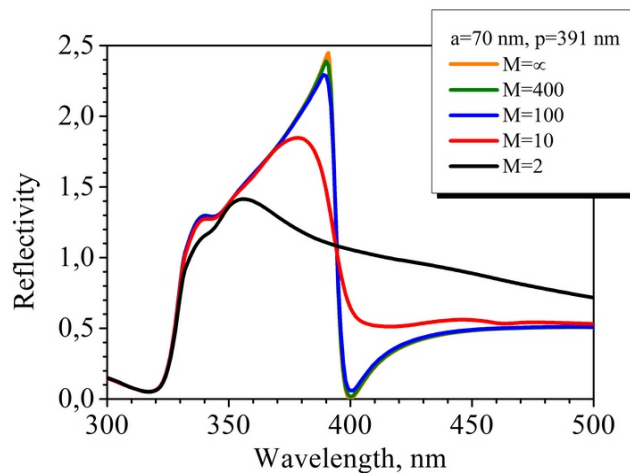


### Порівняння скінченної та нескінченної решіток з нанониток

Підчас розгляду скінченних решіток з великої кількості розсіювачів, виникає природне питання, «наскільки велика нескінченність»? Тобто яку кількість елементів потрібно взяти, щоб вважати решітку нескінченною. Тому цікаво порівняти розсіяння на нескінченних і скінченних решітках. Однак при цьому далеко не очевидно, як вибрати правильну величину для такого порівняння. Нами встановлено, що в якості такої величини слід брати переріз відбиття плоскої хвилі на скінченній решітці з ниток. Він вводиться як частина ППР, що відноситься до потужності, яка розсіяна у верхній напівпростір, нормована на діаметр нитки  $2a$  та число ниток  $M$ ,



(a)



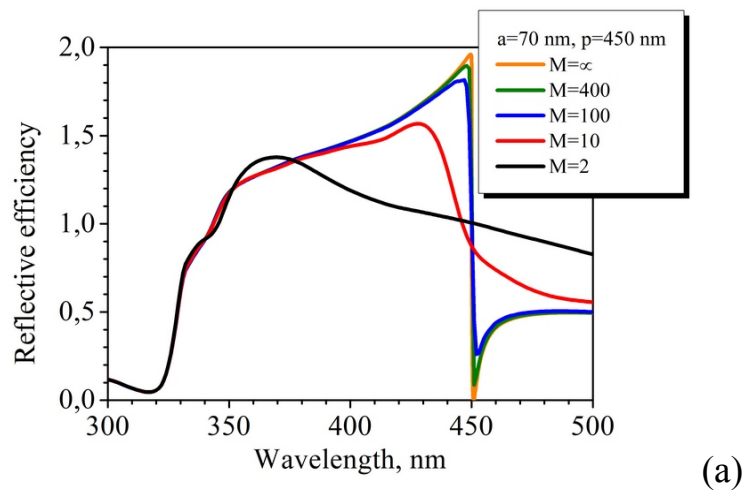
(б)

Рис. 2.26. Порівняння нормованого коефіцієнту відбиття  $\tilde{R}$  як функції довжини хвилі для скінченних і нескінченних решіток зі срібних нанониток радіусу 70 нм з періодами 350 нм (а) і 391 нм (б), які опромінюються нормально падаючою на них Н-поляризованою плоскою хвилею.

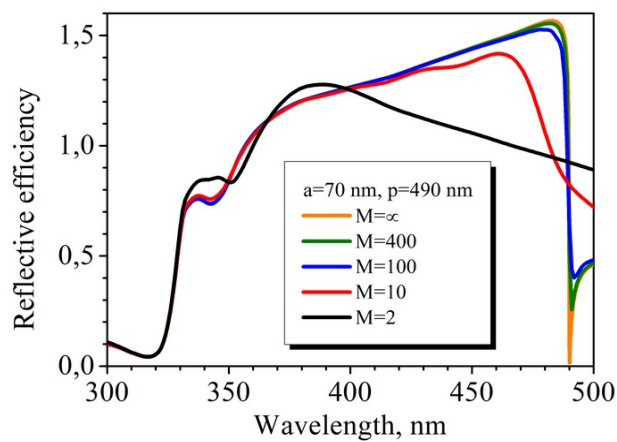
$$\tilde{R}_{fin} = \frac{1}{\pi Mka} \int_0^{\pi} |\Phi(\varphi)|^2 d\varphi. \quad (2.37)$$

Цю величину зручно порівнювати з коефіцієнтом відбиття нескінченної решітки (формула (10) з [1]) нормованим на відносний переріз одиночної нитки, тобто  $\tilde{R}_{inf} = pR_{inf} / 2a$ .

Рисунки 2.26-2.27 показують таке порівняння для решіток з кругових срібних нанониток з радіусом 70 нм та різноманітними періодами від 350 нм до 490 нм.



(a)



(б)

Рис. 2.27. Те ж саме, що й на Рис. 2.25 для решіток з періодами 450 нм (а) і 490 нм (б).

Як видно, 10 ниток такого радіусу достатньо для того, щоб забезпечити переріз відбиття в межах  $\pm 10\%$  від його значення для нескінченної решітки у всьому діапазоні довжин хвиль від 300 до 500 нм, за винятком околу біля резонансу на ГМ, коли необхідно приблизно від 100 до 500 ниток, щоб досягти такого ж ефекту. При цьому навіть короткі решітки з 10 субхвильових ниток демонструють плавні Фано резонанси на ГМ біля довжин хвиль аномалій Релея. Вибір періоду решітки з ниток радіусу 70 нм  $p = 391$  нм дає максимальний переріз відбиття, значення якого сягає 2.5.

### Випадок E-поляризації

Розглянемо також розсіювання та поглинання плоскої хвилі у видимому діапазоні решітками з кругових срібних нанониток у випадку E-поляризації (тобто з  $E$ -полем уздовж ниток). Нормовані залежності ППР та ПП від довжини хвилі представлено на Рис. 2.28 для нормального падіння. Число ниток варіюється від 10 до 100, а період зафіксовано на 800 нм. Значення радіусу ниток наведені на графіках. Також для порівняння додано дві криві для випадку похилого падіння.

Графіки на Рис. 2.28 демонструють добре відомий факт: у випадку E-поляризованого опромінення однорідна металева нитка є суворо нерезонансним розсіювачем (немає плазмонних резонансів). Що є менш передбачуваним, це те, що також відсутні будь-які піки, пов'язані з ґратковими резонансами. Пояснення цього можна побачити в тому, що добротності ґраткових резонансів E-типу нижче на множник  $|\varepsilon|^2$ , ніж добротності таких самих ґраткових резонансів H-типу [110]. Для срібла в видимому діапазоні, як видно з графіків на Рис. 1.1, цей множник може бути більше 400 на довжині хвилі 800 нм, що й придушує резонанси на ГМ.



Тому у випадку Е-поляризації видимі особливості в спектральних залежностях нормованого розсіяння та поглинання – це гострі мінімуми на довжинах хвиль поблизу аномалій Релея. Це все добре узгоджується з результатами роботи [156], де за допомогою імпедансного методу було досліджено нескінченну решітку з прямокутних золотих брусів.

Цей ефект можна також зрозуміти, якщо візуалізувати ближнє поле (компонента  $|E_z|$ ) на довжинах хвиль, відповідних до мінімумів розсіяння та поглинання. Рисунки 2.29 (а) і (в) відповідають довжинам хвиль  $\pm 2$ -ї та  $\pm 1$ -ї аномаліям Релея, відповідно.

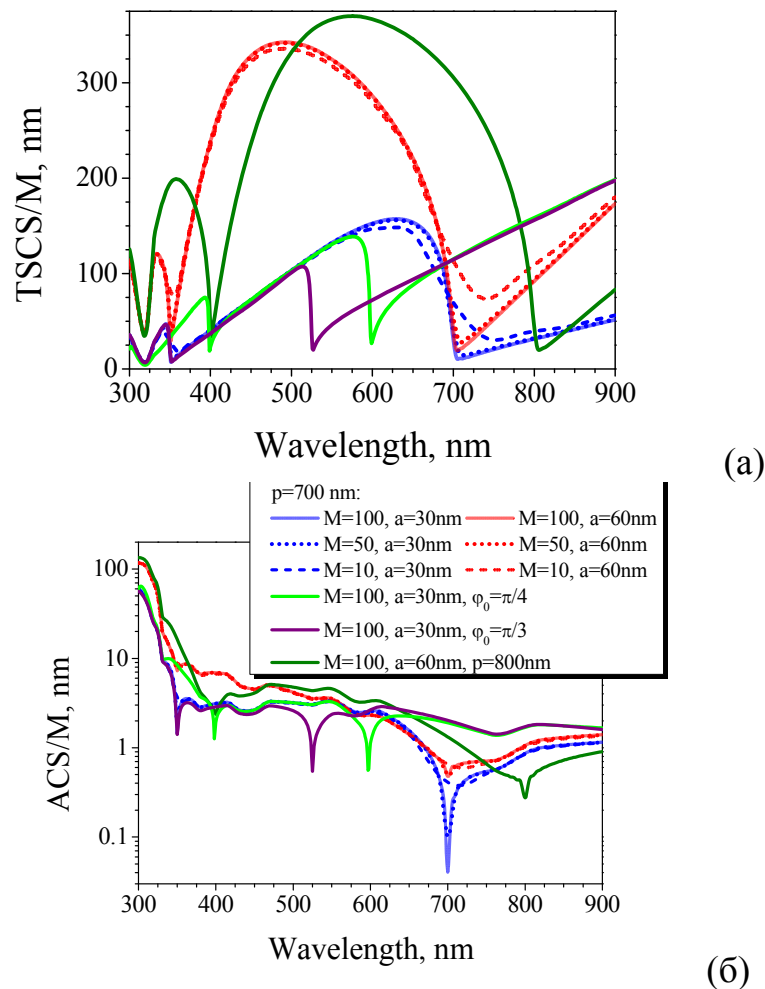


Рис. 2.28. Нормовані ППР (а) і ПП (б) як функції довжини хвилі для різних лінійних решіток зі срібних нанониток у випадку нормального падіння Е-поляризованої плоскої хвилі.

Як можна побачити, в обох випадках срібні нитки, тому що вони мають втрати, знаходяться в глибокому мінімумі електричного поля, що й викликає послаблене розсіяння та поглинання.

Нормовані діаграми розсіяння в дальній зоні, які наведено на Рис. 2.29 (б) і (г), демонструють два інтенсивних гострих пелюстка: тіньовий і віддзеркалений (який відповідає 0-й гармоніці Флоке), плюс два більш широкі бокових пелюстка в площині решітки, що викликані випромінюванням ковзних гармонік Флоке. На Рис. 2.28(б) додатково присутні чотири гострі бокові пелюстки, що відповідають  $\pm 1$ -м гармонікам Флоке розсіяного поля. Необхідно відмітити, що амплітуди всіх пелюсток у Е-поляризації набагато менші, ніж в ґраткових резонансах для таких самих решіток у Н-поляризації.

Більше інформації про цей ефект можна здобути з рельєфів нормованих

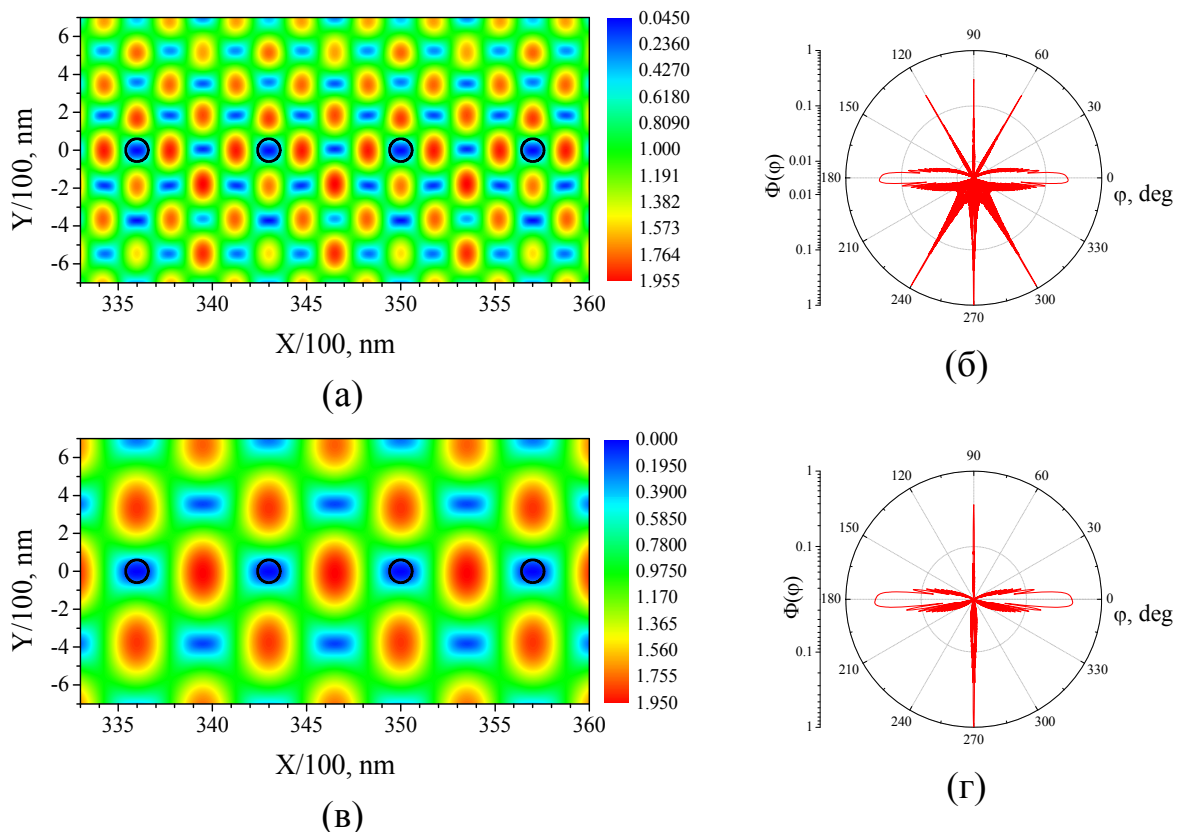


Рис. 2.29. Діаграми поля в ближній та дальній зонах для чотирьох центральних ниток решітки зі 100 ниток радіусу 60 нм з періодом 700 нм на довжинах хвиль 350.1 нм (а, б) і 700.4 нм (в, г).

ППР і ПП як функції двох параметрів: довжини хвилі й періоду, які представлено на Рис. 2.30. Верхні та нижні рисунки відповідають решіткам з ниток з радіусами 30 нм і 60 нм, відповідно. Як видно, на довжинах хвиль поблизу аномалій Релея і розсіяння, і поглинання істотно падають.

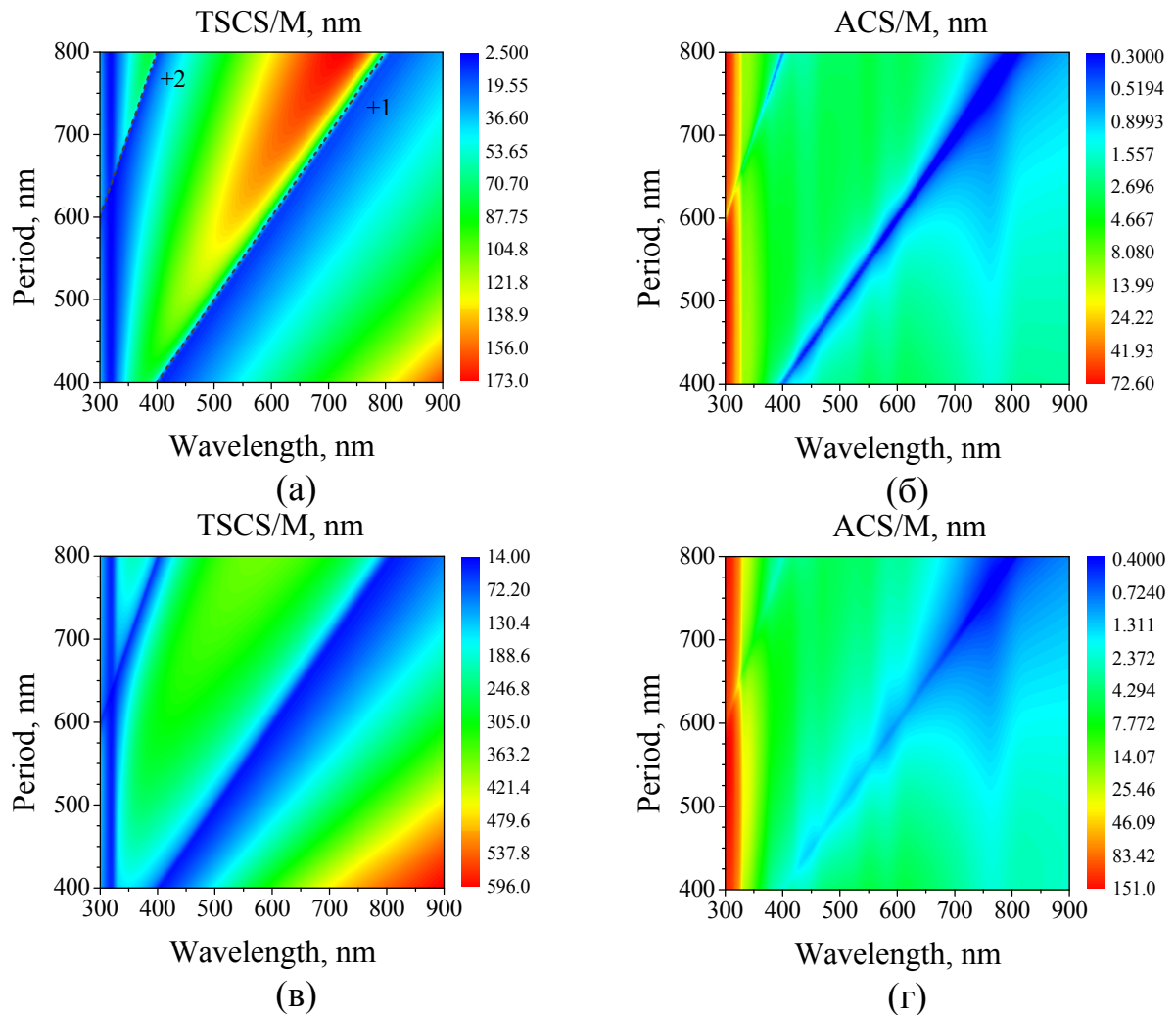


Рис. 2.30. Рельєфи нормованих ППР (а), (в) і ПП (б), (г) для решіток з 50 ниток радіусу 30 нм (а-б) і 60 нм (в-г) у випадку Е-поляризації.

## Висновки до розділу 2

В даному розділі було розглянуто розсіяння та поглинання Н- і Е-поляризованих плоских хвиль на лінійних решітках з діелектричних і срібних нанониток. Для решітки з нанониток, так само як і для довільного ансамблю з  $M$  паралельних ниток, було розроблено й використано чисельно-аналітичний метод з гарантованою збіжністю результатів. Використовуючи цей точний обчислювальний інструмент, було досліджено резонанси в характеристиках розсіяння та поглинання на плазмонних та ґраткових модах, а також ближні поля в цих резонансах. За результатами проведених досліджень можна зробити наступні висновки:

1. Плазмонний резонанс виникає, на кожній з металевих ниток, тільки у випадку Н-поляризації й проявляється як широкий пік в ППР, ПП і перерізі відбиття, трохи зсунутий в червоний бік спектру від довжини хвилі, на якій дійсна частина діелектричної проникності срібла дорівнює протилежній за знаком дійсній частині діелектричної проникності вміщуючого простору. Він має низьку добротність, що зумовлено втратами у сріблі.

2. На відміну від розповсюдженої думки про те, що плазмонні резонанси при розсіянні та поглинанні світлових хвиль металевими розсіювачами пов'язані з нанорозмірними частинками та нитками, вони також спостерігаються на значно більших металевих об'єктах. Тільки коли тіньова частина зовнішньої границі нитки значно перевищує довжину розповсюдження поверхневої плазмонної хвилі (яка росте з довжиною хвилі у вільному просторі, однак, скінченна в десятках і кількох сотнях  $\lambda$ ), то плазмонні резонанси перестають спостерігатися.

3. Для решітки з діелектричних ниток існують високодобротні резонанси на ґраткових модах. Такі резонанси на графіках перерізів відбиття мають форму Фано, їхня добротність росте зі збільшенням кількості ниток в решітці, а довжини хвиль близькі, але не збігаються, до довжин хвиль аномалій Релея відповідних нескінченних решіток. Дослідження ближніх

полів на частотах резонансів на ґраткових модах показало, що характерною ознакою таких резонансів є стояча хвиля вздовж решітки, близька до функції  $\cos(2\pi x / p)$ .

4. При розсіянні світла на решітках зі срібних ниток добротність резонансів на ґраткових модах поступається таким самим величинам для решіток з діелектричних ниток, але зостається більшою, ніж у плазмонних резонансів. Для того, щоб отримати добротні резонанси на ґраткових модах у таких решітках, потрібно вибирати радіус нитки від 30 до 70 нм.

5. При розсіянні Н-поляризованої плоскої хвилі на решітці зі срібних ниток виникають обидва типи резонансів. Показано, що змінюючи період решітки, можна отримати збільшення резонансних значень ППР у ґратковому резонансі поблизу плазмонного, але при збігові дійсних частин їхніх власних частот спостерігається явище електромагнітної індукованої прозорості.

6. Порівняння коефіцієнтів відбиття для скінченних та нескінченних решіток показало, що решітки з 10 ниток достатньо, щоб ці величини збігалися з точністю  $\pm 10\%$  у всьому досліджуваному діапазоні довжин хвиль, окрім околу резонансу на ґратковій моді, коли необхідно від 100 до 500 ниток, щоб досягти такого ж ефекту.

7. У випадку Е-поляризації, одиночні металеві нитки не підтримують поверхневих плазмонних мод й плазмонні резонанси в ППР і ПП не виникають, а поблизу аномалій Релея спостерігається придушення розсіяння та поглинання, тому виникають гострі мінімуми ППР і ПП.

## РОЗДІЛ 3

### РОЗСІЯННЯ ТА ПОГЛИНАННЯ СВІТЛОВИХ ХВИЛЬ СКЛАДНИМИ СКІНЧЕННИМИ ПЕРІОДИЧНИМИ СТРУКТУРАМИ ЗІ СРІБНИХ НАНОНИТОК

У цьому розділі чисельно досліджуються характеристики розсіяння та поглинання Н-поляризованих хвиль світлового діапазону різноманітними скінченними решітками з кругових срібних нанониток. В якості таких структур розглядаються дискретні кути та хрести, двошарові та тришарові решітки з одним й тим самим періодом, одношарові решітки з двома періодами. Крім того, моделюється дискретний параболічний рефлектор з нанониток. Вивчається можливість виявлення періодичної структури в безладі, шляхом моделювання розсіяння хвиль решіткою з нанониток, яка знаходиться у хмарі з таких самих, але псевдо-випадковим чином розташованих нанониток. У решітках, що розглядаються, досліджуються плазмонні та ґраткові резонанси в характеристиках розсіяння та поглинання, а також резонансні картини розподілення поля та діаграми розсіяння. Всі решітки, що нами вивчаються, можна вважати розрідженими ( $p - 2a > a$ ), тому наведені результати було пораховано з порядком усічення блоків у матричному рівнянні  $N = 3-6$ , що дає як мінімум три вірних десяткових знаки в характеристиках дальнього поля. Матеріали розділу 3 опубліковано в роботах [3, 4, 6, 14-17, 19-21, 23, 25, 27, 29].

#### 3.1 Багатошарові скінченні решітки

У попередньому розділі було розглянуто оптичні резонанси на решітках з періодично розташованих в одній площині кругових срібних нанониток. Їхнє дослідження показало, що мінімальна кількість ниток, яка необхідна для спостереження добре видимих ґраткових резонансів на решітках з ниток радіусу 30-70 нм, знаходиться між 50 та 200. Зважаючи на

це, було досліджено розсіяння Н-поляризованої плоскої хвилі на скінченних решітках, які складаються з 2-х і 3-х паралельних ланцюжків ідентичних ниток, у діапазоні довжин хвиль між 300 нм та 500 нм. Поперечний переріз такої багат шарової решітки представлено на Рис. 3.1.

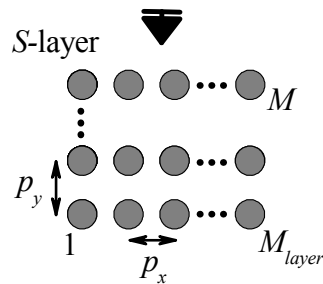


Рис. 3.1. Геометрія поперечного перерізу S-шарової скінченної решітки.

Нехай кожен шар містить  $M_{ш}$  ниток, таким чином загальна їхня кількість  $M = 2M_{ш}$  або  $3M_{ш}$ . Якщо позиції вісей ниток уздовж шару в двошаровій решітці (тобто їхні  $x$ -координати) збігаються для верхнього та нижнього шарів, то така решітка може розглядатися як така, що складається з  $M_{ш} = M/2$  даймерів (тобто пар ниток з відстанню по вісі  $y$  між їхніми центрами  $p_y$ ), які розташовані з періодом  $p_x$  вздовж вісі  $x$ . Подібним чином, трьохшарова решітка складається з  $M/3$  траймерів, тобто трьох-ниткових субмасивів, що розташовані вздовж вісі  $y$ . На Рис. 3.2(а) представлено графіки ППР таких конфігурацій, нормованих на загальну кількість ниток  $M$ , в залежності від довжини хвилі, при нормальному падінні ( $\varphi_0 = \pi/2$ ). Усі криві демонструють широкі резонансні піки на довжинах хвиль біля 340 нм – це плазмонний резонанс на кожній зі срібних нанониток.

Однак на кожному з графіків присутній ще й інший резонансний пік, трохи зсунутий у червону сторону від значення періоду  $p_x$  – це гратковий резонанс. Відмітимо, що плазмонний резонанс завжди має форму близьку до лоренціану, тоді як гратковий резонанс може приймати будь-яку з великої кількості Фано-форм, особливо для дво- та три-шарових решіток. Найбільш інтенсивне розсіяння стається, якщо гратковий резонанс відсунутий від

плазмонного резонансу приблизно на 20-30 нм у червону сторону. Також необхідно підкреслити, що поглинання є більш зручним інструментом для визначення резонансних довжин хвиль, тому що у ньому присутні тільки піки лоренціальної форми.

Необхідно відмітити, що додавання шарів у решітку зменшує максимуми нормованих ППР і ПП в плазмонному резонансі на 340 нм. Мабуть це стається через затемнення фронтальним шаром усіх інших шарів такої решітки.

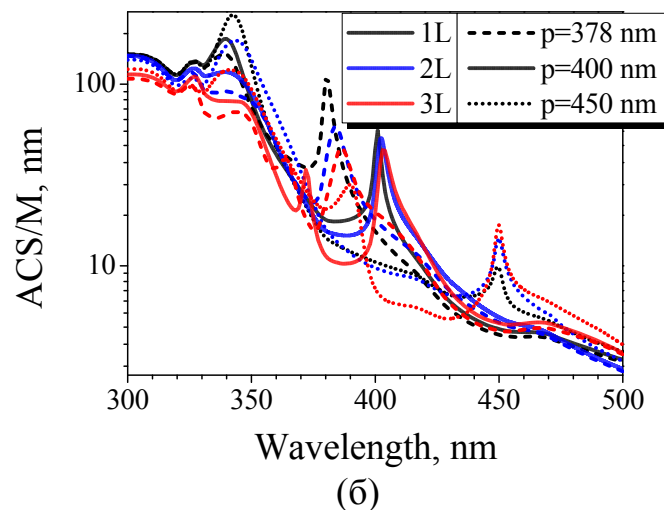
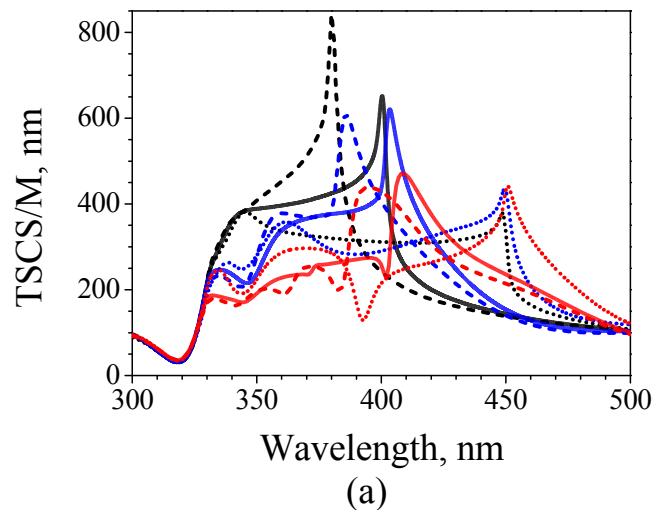


Рис. 3.2. Нормовані ППР (а) і ПП (б) як функції довжини хвилі для одно-, дво- та три-шарових решіток зі срібних нанониток радіусу 60 нм та періодів  $p_x = 378$  нм, 400 нм і 450 нм. Інші параметри:  $p_y = 5a$ ,  $M_{uu} = 100$ ,  $\varphi_0 = \pi / 2$ .



На Рис. 3.3 представлено портрети ближніх магнітних полів для двошарових та тришарових решіток з  $p_x = 400$  нм і  $p_y = 300$  нм на довжинах хвиль відповідних ґраткових резонансів, тобто 403 нм і 409 нм. На рисунках можна побачити, що найбільші максимуми поля (яскраві плями) розташовані навколо ниток на другому від сторони, що освітлюється, шарі й для двох, й для трьох-шарових решіток.

Розподіл поля має особливості, характерні для ґраткових резонансів першого порядку, з іншим максимумом поміж нитками, що відповідає стоячій хвилі, яка виникла від  $\pm 1$ -х квазі-гармонік Флоке, що розповсюджуються у протилежних напрямках.

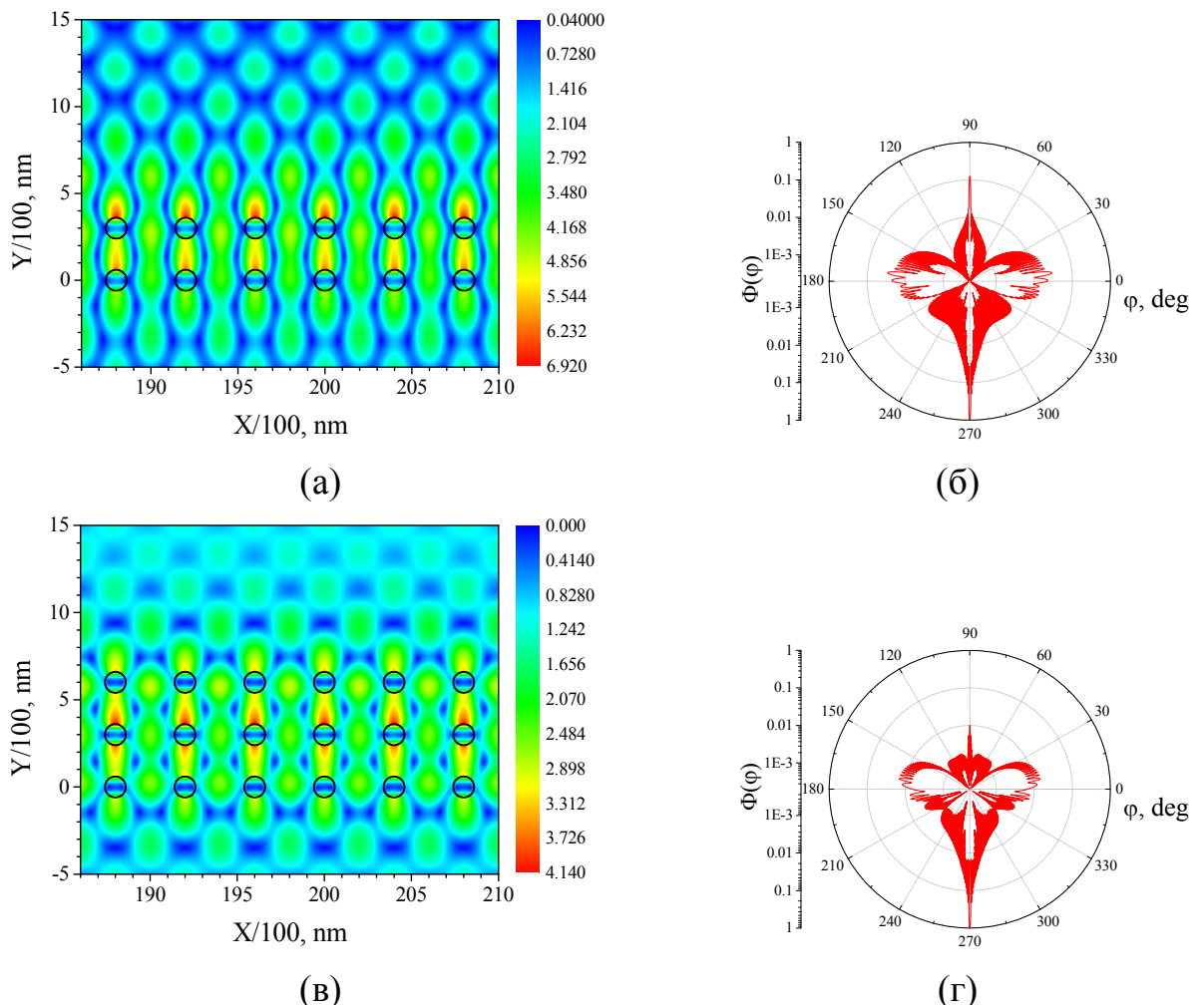


Рис. 3.3. Портрети ближнього поля для п'яти центральних періодів (а), (в) і діаграми розсіяння в дальній зоні (б), (г) для дво- та три-шарових решіток ( $M_{ii} = 100$ ) з ниток радіусу  $a = 60$  нм і  $p_x = 400$  нм,  $p_y = 5a$  на довжинах хвиль ґраткових резонансів 403 нм (а),(б) і 409 нм (в),(г).

### 3.2 Дискретний кут

Геометрію дискретного прямого кута з нанониток представлено на Рис. 3.4. Будемо вважати, що нитки, з яких складається кут, розташовані симетрично відносно вісі  $y$ , й одна з них знаходиться у вершині кута (на вісі  $y$ ). Падаюча плоска хвиля може, в залежності від кута падіння, світити всередину кута ( $\pi/4 < \varphi_0 < 3\pi/4$ ) або освітлювати його ззовні ( $3\pi/4 < \varphi_0 < 5\pi/4$ ).

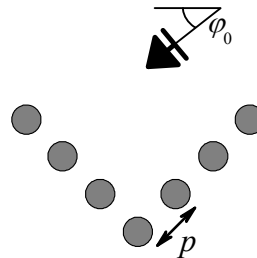


Рис. 3.4. Дискретний кут.

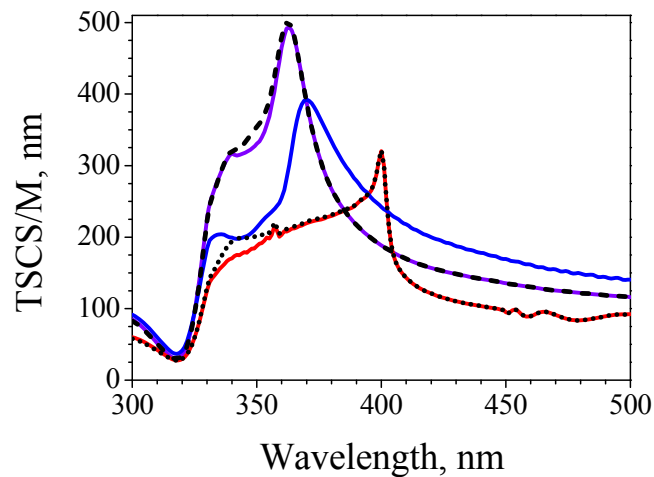
Рисунки 3.5-3.8 показують результати розрахунків для декількох конфігурацій дискретних прямих кутів, які складаються з паралельних срібних ниток радіусу 30 нм і 60 нм та освітлюються Н-поляризованою плоскою хвилею.

На Рис. 3.5 представлено графіки нормованих на  $M$  ППР (а) і ПП (б) як функції довжини хвилі для дискретних кутів зі 101 нитки з періодом 400 нм для різних кутів падіння. Тут  $\varphi_0 = \pi/4$  відповідає випадку, коли падаюча хвиля розповсюджується вздовж однієї зі сторін кута. Як і в попередніх розділах, на графіках видно два типи резонансів у ППР.

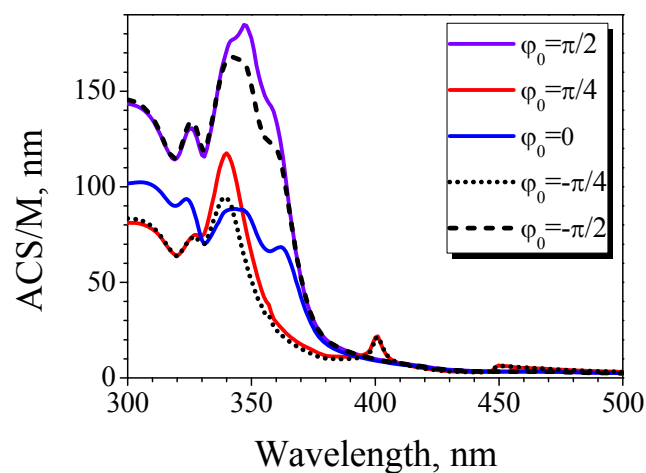
Перший, широкий, резонанс на довжині хвилі близько 348 нм – це плазмонний резонанс, котрий спостерігається на тій самій довжині хвилі, що й для одиночної нитки. Другий, більш гострий, резонанс видно на 403 нм для  $\varphi_0 = \pi/4$ , тобто на довжині хвилі, яка приблизно дорівнює значенню періоду, тому що для однієї зі сторін кута – це випадок нормального падіння.

Якщо кут  $\varphi_0$  довільний, то тоді довжина хвилі граткового резонансу зсунута від значення періоду. Наприклад, якщо  $\varphi_0 = 0$  або  $\pm\pi/2$ , то він спостерігається на довжині хвилі, трішки більшій значення, яке відповідає довжині хвилі +2-ї аномалії Релея (для подібної нескінченної решітки) та куту падіння  $45^\circ$ :  $\lambda_{RA}^{+2} = (p/2)[1 + \cos(\pi/4)]$ .

Ці два типи резонансів також добре видно на графіках нормованого ПП (Рис. 3.5(б)), хоча тут резонансам на модах з більш короткими довжинами хвиль заважають проявлятися більші втрати у сріблі.



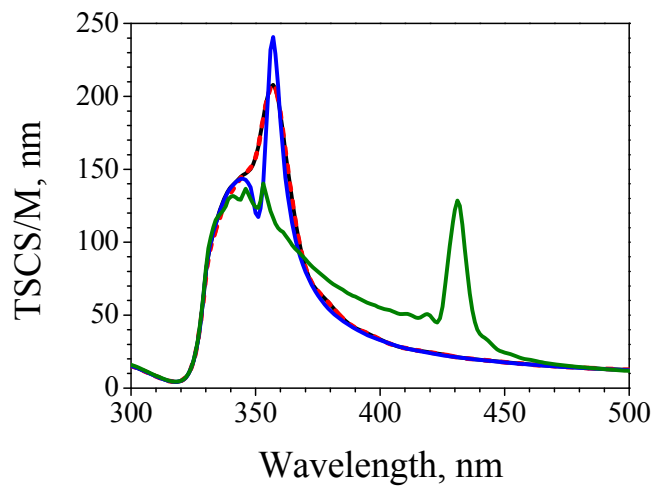
(a)



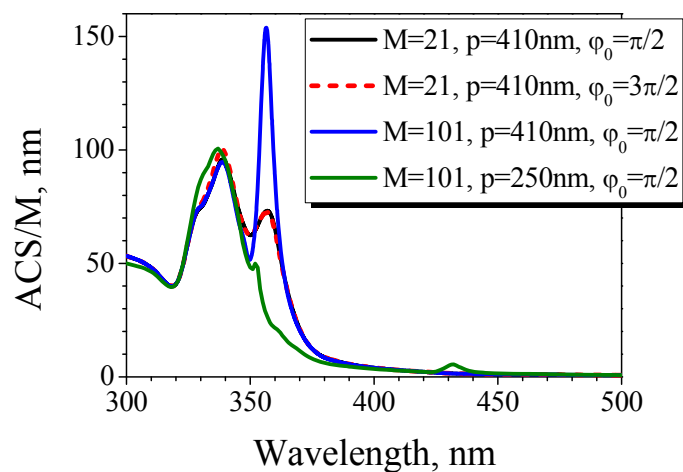
(б)

Рис. 3.5. Залежності нормованих ППР (а) і ПП (б) від довжини хвилі для дискретного кута зі 101 срібної нанонитки,  $a = 60$  нм і  $p = 400$  нм, для різних кутів падіння.

Необхідно зауважити, що пікові значення ППР і ПП у плазмонному резонансі при  $\varphi_0 = \pm\pi/2$  приблизно в два рази більші, ніж при  $\varphi_0 = 0$  або  $\pm\pi/4$ , оскільки в першому випадку при нормальному падінні однаково освітлюються всі елементи решітки, а при інших кутах – тільки одна зі сторін кута.



(a)



(б)

Рис. 3.6. Нормовані ППР (а) і ПП (б) як функції довжини хвилі для різних дискретних кутів з нанониток радіусу 30 нм.

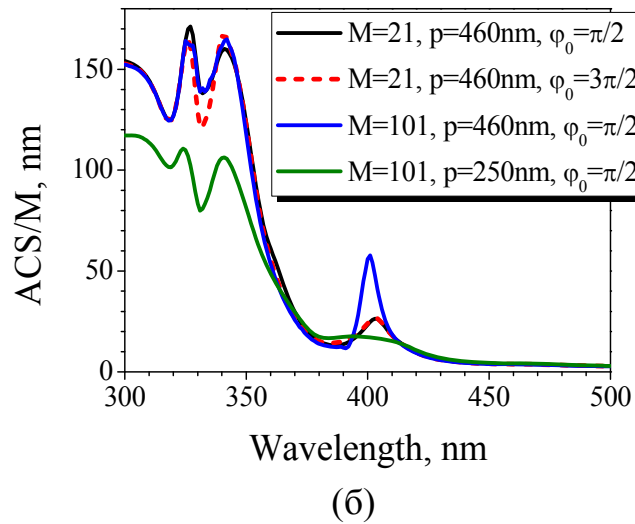
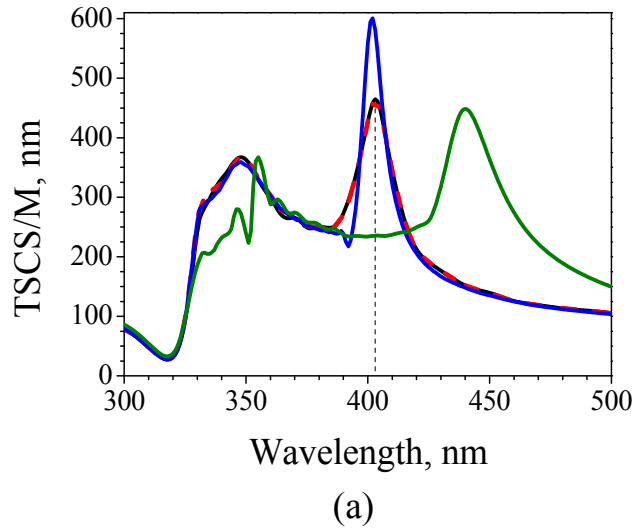


Рис. 3.7. Те ж саме, що й на Рис. 3.6 для дискретних кутів з нанониток радіусу 60 нм.

На Рис. 3.6 и 3.7, подібні залежності представлені для двох дискретних кутів з 21 та 101 нитки, які освітлюються плоскою хвилею симетричним чином, завдяки падінню в кут або ж на вершину. Плазмонний резонанс знаходиться на його звичайному місці, тоді як резонанси на ГМ +1-го та +2-го порядків спостерігаються на 440 нм і 357 нм або 403 нм, відповідно. Їхнє положення зумовлене, головним чином, рівняннями для +1-ї та +2-ї аномалій Релея з кутом падіння  $45^\circ$  й значеннями періоду 250 нм, 410 нм і 460 нм. Висота й гострота цих піків стають більшими для більших  $M$ . Необхідно відмітити, що суцільні та пунктирні криві на Рис. 3.5 і 3.6, які відповідають

двом протилежним напрямкам падаючої хвилі, не збігаються. Відмінність обумовлена ненульовим поглинанням у сріблі (для розсіювачів без втрат такі дві залежності ППР від довжини хвилі повинні збігатися внаслідок теореми взаємності).

Для візуалізації резонансних ефектів на полі двох параметрів – довжини хвилі та періоду, на Рис. 3.8 (а) і (в) представлено рельєфи ППР як функції цих аргументів для дискретних прямих кутів з 51 срібної нитки радіусів 30 нм і 60 нм, відповідно. Рельєфи на Рис. 3.7 (б) і (г) дають подібну інформацію о ПП. Вартує повторити, що для рельєфів, які наведено вище,

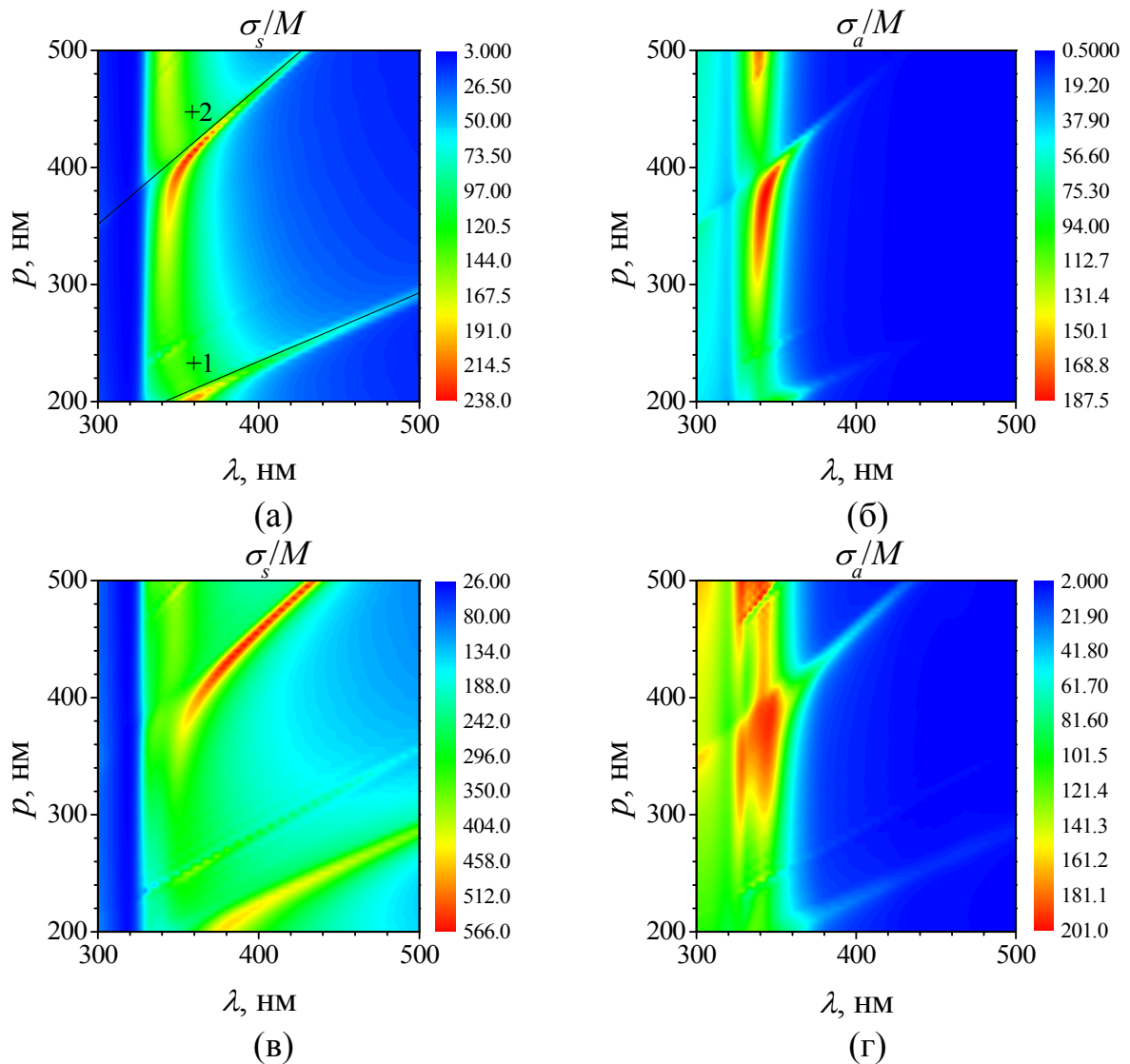


Рис. 3.8. Нормовані ППР (а, в) і ПП (б, г) як функції періоду та довжини хвилі для дискретних кутів з 51 срібної нанонитки радіусу 30 нм (а, б) і 60 нм (в, г).

плоска хвиля падає всередину кута симетричним чином освітлюючи обидві його сторони ( $\varphi_0 = \pi / 2$ ). На цих рельєфах видно дві області інтенсивного розсіяння. Вони розтягнені вдовж прямих ліній, що відповідають +2-й і +1-й аномаліям Релея, на яких гармоніки Флоке відповідної нескінченної решітки переходять зі згасаючих у ті, що розповсюджуються.

На Рис. 3.9 представлено портрети повного поля у ближній зоні та діаграми розсіяння в дальній зоні для дискретних кутів з 21 срібної нитки, які розраховані на довжинах хвиль, що відповідають піку резонансу на ґраткові

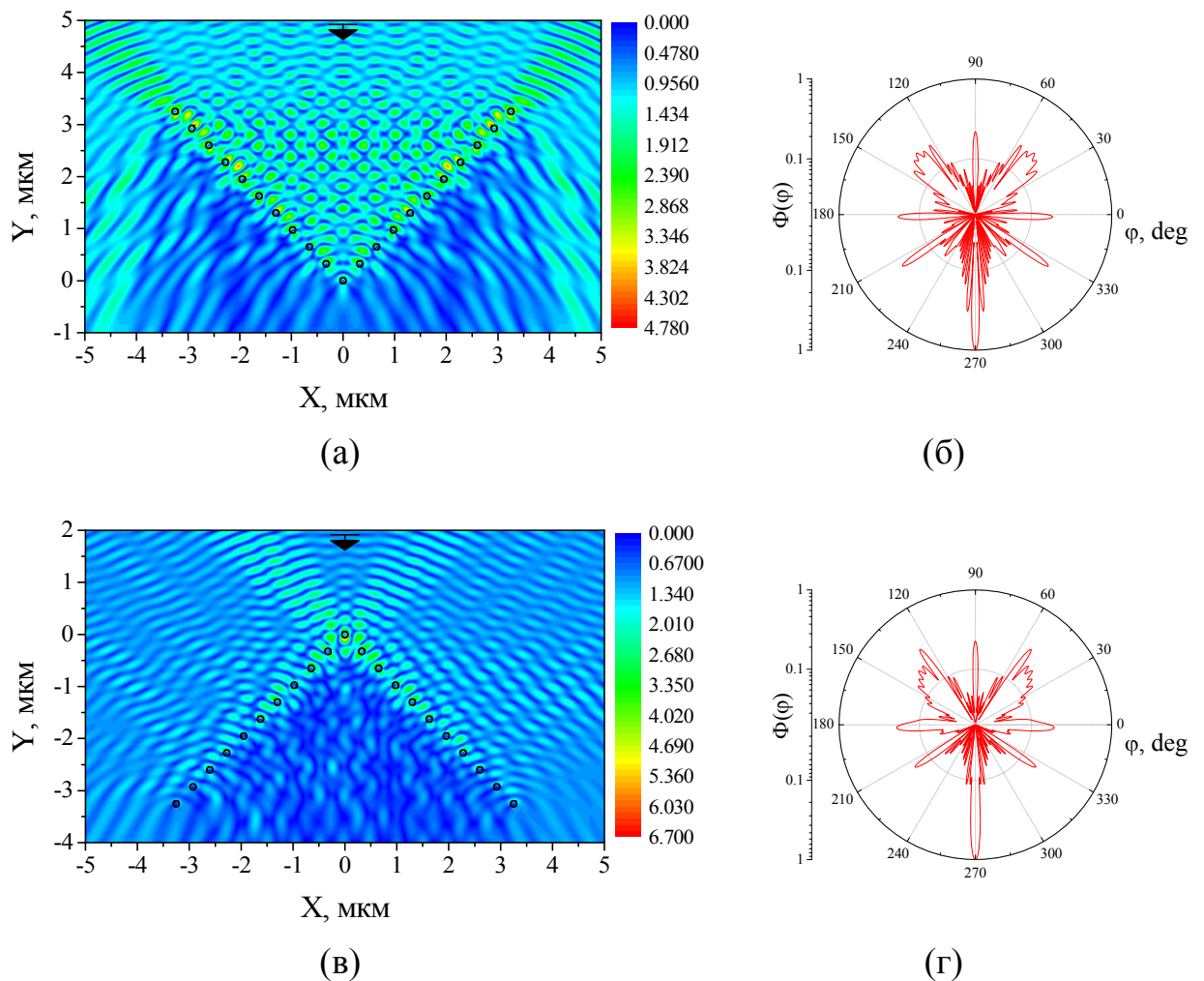


Рис. 3.9. Ближні поля (а), (в) і діаграми розсіяння в дальній зоні (б), (г) для прямих дискретних кутів з 21 нитки радіусу  $a = 60$  нм та періодом  $p = 460$  нм на довжині хвилі ґраткового резонансу 403 нм, для випадків симетричного падіння плоскої хвилі всередину кута ( $\varphi_0 = \pi / 2$ ) (а-б) та зовнішньої сторони ( $\varphi_0 = -\pi / 2$ ) (в-г).

моді в ППР, див. Рис. 3.7(а). На портретах полів видно яскраві плями біля ниток зі сторони кута, що освітлюється, та характерні стоячі хвилі вздовж його сторін, сформовані +2-ми гармоніками Флоке. Більш складну комбінацію чотирьох стоячих хвиль видно всередині кута, вона формується дзеркальними відбиттями (тобто перевідбиттям 0-ї гармоніки Флоке). В конфігурації, яку представлено на Рис. 3.9(в), плоска хвиля падає на вершину кута з зовнішньої сторони (на Рис. 3.7(а) цьому відповідає  $\varphi_0 = -\pi/2$ ). У цьому випадку в гратковому резонансі спостерігається глибока тінь усередині дискретного кута.

Відмітимо також інтенсивні пелюстки розсіяного поля, що виходять від верхніх кінцівок кута в напрямках  $\varphi = \pi/4$  та  $3\pi/4$ . Вони з'являються завдяки +2-м квазі-гармонікам Флоке, що розповсюджуються вздовж сторін кута, так що відповідні бокові пелюстки в діаграмах спрямованості  $\Phi(\varphi)$  якраз є відмітною особливістю граткових резонансів.

### 3.3 Дискретний хрест

Геометрію поперечного перерізу періодичної структури у вигляді дискретного хреста представлено на Рис. 3.10. Хрест розташований у просторі таким чином, що його сторони паралельні вісям  $x$  та  $y$ . Можна виділити два випадки симетричного освітлення хреста падаючою плоскою хвилею: коли хвиля світить всередину одного з кутів з яких складається хрест ( $\varphi_0 = \pi/4 \pm m\pi/2$ ,  $m = 0, 1, 2, \dots$ ) та коли хвиля падає вздовж однієї з його сторін ( $\varphi_0 = \pm m\pi/2$ ,  $m = 0, 1, 2, \dots$ ).

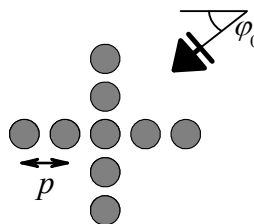


Рис. 3.10. Поперечний переріз дискретного хреста з нанониток.



Розсіювач у вигляді дискретного хреста – це ще одна конфігурація, де добре проявляються резонанси на ґраткових модах. Розглянемо оптичні властивості дискретного хреста з кількістю ниток  $M = 21$  та 101 в чотирьох плечах хреста, тобто з однією центральною ниткою й чотирма плечима з 5 та 25 ниток кожен, відповідно. Як було показано в розділі 2, навіть кілька десятків ідентичних нанониток, що розташовані періодичним чином, спроможні демонструвати помітні резонансні максимуми на ґраткових модах у розсіянні та поглинанні. Добротності цих резонансів ростуть зі збільшенням  $M$  й в кінці кінців наближаються до відповідних значень для нескінченних решіток.

На Рис. 3.11 и 3.12 представлено спектри нормованих ППР і ПП для розріджених дискретних хрестів з радіусом кожної нитки 30 нм (Рис. 3.11) і

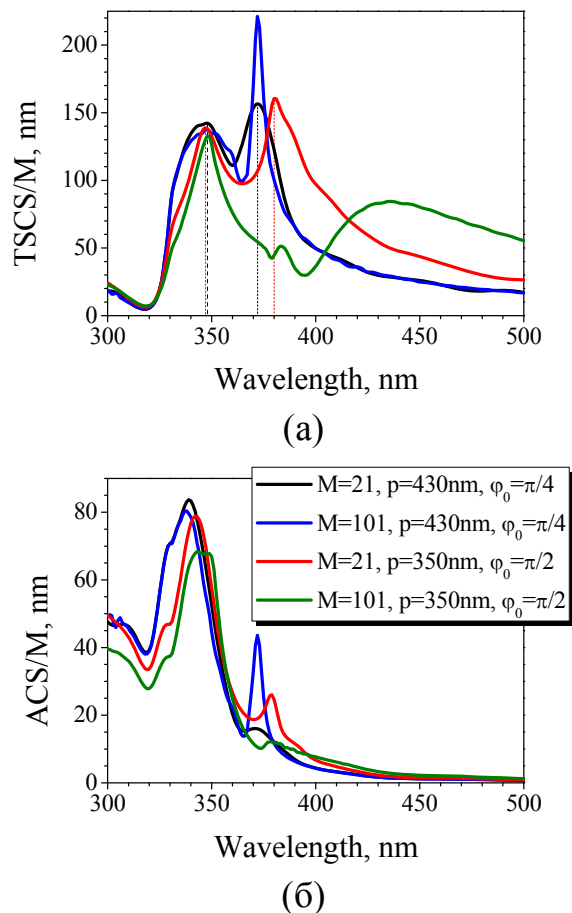
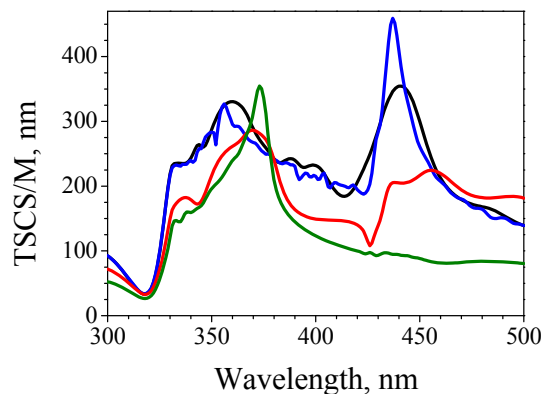


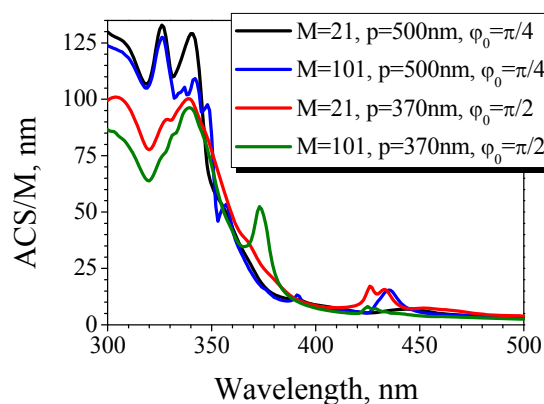
Рис. 3.11. Нормовані ППР (а) і ПП (б) як функції довжини хвилі для декількох дискретних хрестів зі срібних нанониток радіусу 30 нм.

60 нм (Рис. 3.12), у видимому діапазоні, для двох кутів падіння Н-поляризованої плоскої хвилі: вздовж однієї зі сторін хреста та вздовж його діагоналі. Необхідно відмітити, що частотна залежність ПП є більш точним інструментом для візуалізації резонансів усіх типів, ніж ППР [88].

Якщо плоска хвиля падає вздовж однієї зі сторін хреста, це значить, що інші дві сторони опромінюються по нормалі до них. З Рис. 3.11-3.12 можна також побачити, що збільшення кількості ниток у плечі хреста трохи знижує середнє значення ППР й, особливо, ПП у плазмонному резонансі. Це, як і в інших подібних випадках, пояснюється затіненням деяких ниток. При такому опроміненні основні ґраткові резонанси мають довжини хвиль довкола значення періоду, який при розрахунках дорівнював 350 нм і 370 нм для хрестів з радіусами ниток 30 нм і 60 нм, відповідно, тобто трохи правіше плазмонного резонансу. На відміну від плазмонного, резонанс на ґратковій



(a)



(б)

Рис. 3.12. Те ж саме, що й на Рис. 3.11 для дискретних хрестів з ниток радіусу 60 нм.

моді стає гострішим й інтенсивнішим при збільшенні числа ниток  $M$  незалежно від кута падіння.

Якщо плоска хвиля падає на такий самий дискретний хрест зі срібних нанониток уздовж його діагоналі, то згадані резонанси в розсіянні та поглинанні зберігаються. Плазмонний та ґраткових типи резонансів зрозумілим чином визначаються по їхній відмінній динаміці відносно збільшення кількості ниток. Ґратковий резонанс краще за все видно поблизу довжини хвилі аномалії Релея, яка відповідає дотичному відносно решітки режиму розповсюдження  $+2$ -ї квазі-гармоніки Флоке.

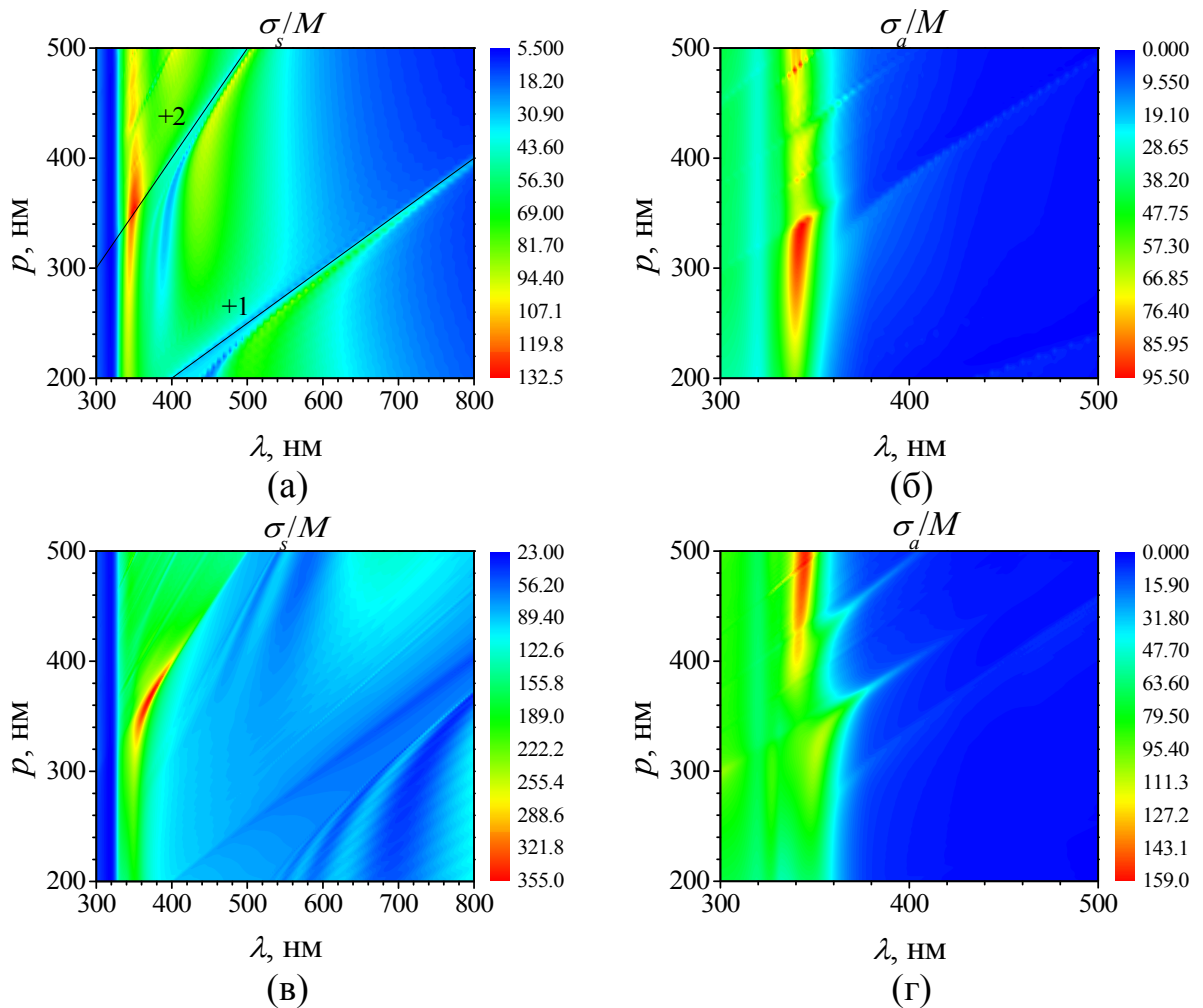


Рис. 3.13. Нормовані ППР (а), (в) і ПП (б), (г) як функції довжини хвилі та періоду для хрестів зі 101 срібної нанонитки радіусу 30 нм (а-б) і 60 нм (в-г),  $\varphi_0 = \pi/2$ .

Описані особливості розсіяння та поглинання світла дискретними хрестами зі срібних нанониток більш повним чином представлені на рельєфах Рис. 3.13 і 3.14. Їх розраховано для випадків опромінення вздовж плеча хреста ( $\varphi_0 = \pi/2$ ) та вздовж його діагоналі ( $\varphi_0 = \pi/4$ ), відповідно, й двох значень радіусу ниток – 30 нм і 60 нм. У кожному випадку області посиленого розсіяння та поглинання знаходяться близько до прямих ліній аномалій Релея відповідної нескінченної решітки, якщо період стає великим. Відмітки на рельєфах означають індекси аномалій, тобто номери гармонік Флоке, що розповсюджуються вздовж решітки.

На Рис. 3.15-3.16 представлено амплітудні портрети полів у ближній зоні для декількох дискретних хрестів з 21 срібної нитки радіусу 30 нм на довжинах хвиль плазмонних резонансів (Рис. 3.15(a), 3.16(a)) і ґраткових

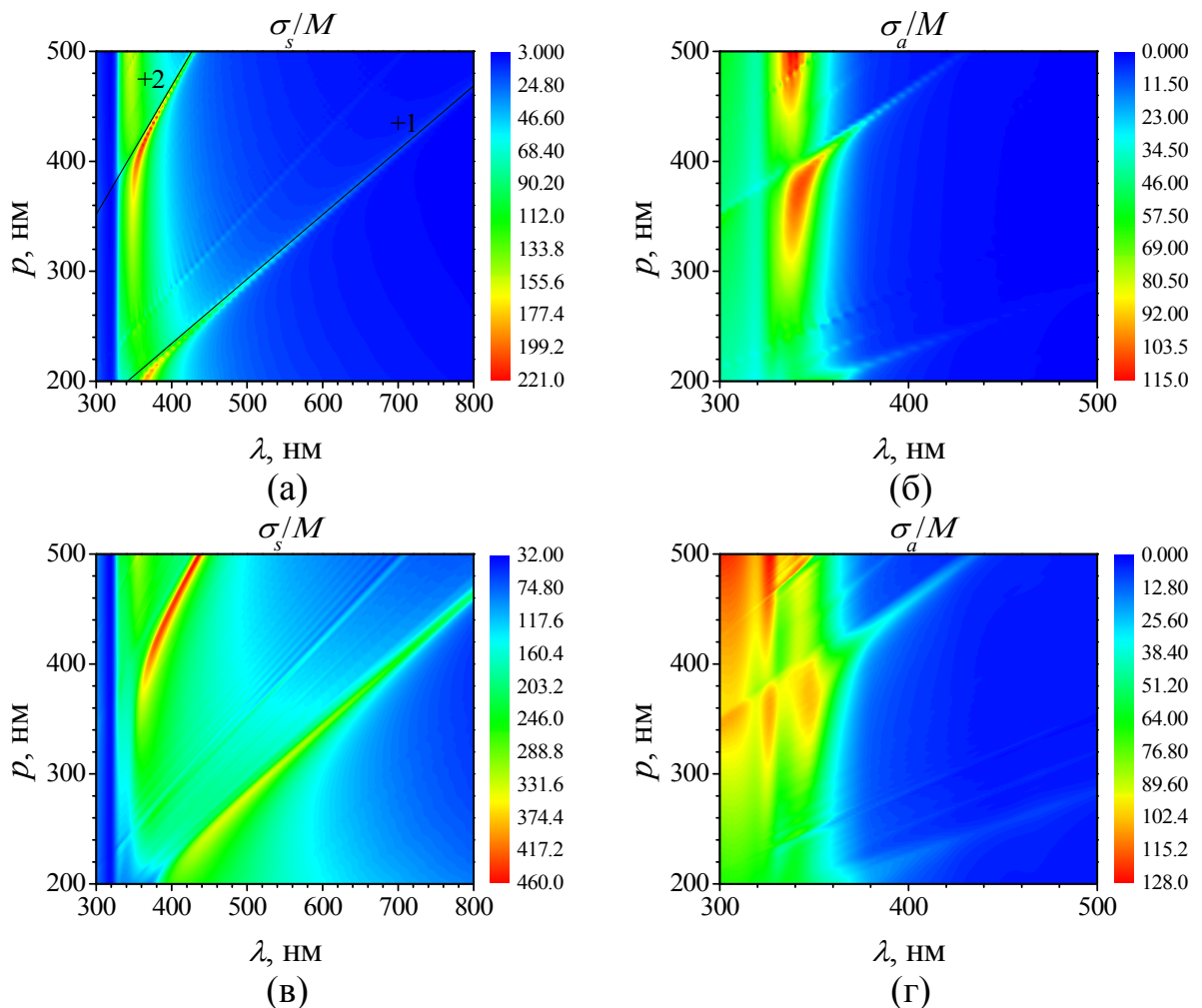


Рис. 3.14. Те ж саме, що й на Рис. 3.13 для випадку опромінення вздовж діагоналі,  $\varphi_0 = \pi/4$ .

резонансів (Рис. 3.15(в), 3.16(в)) для двох кутів падіння плоскої хвилі, які відмічено чорними стрілками.

У плазмонних резонансах (див. Рис. 3.15 (а) та 3.16 (а)), максимум ближнього поля видно тільки з тієї сторони кожної нитки, яка опромінюється, а в дальній зоні, крім тінеутворювального пелюстка, домінує дзеркально розсіяна хвиля. У ґратковому ж резонансі (див. Рис. 3.15 (в) і 3.16 (в)) на тих плечах, що опромінюються, добре видно стоячі хвилі типу Флоке, а на діаграмах розсіяння в дальній зоні проявляються характерні сильні бокові пелюстки вздовж опромінених плечей.

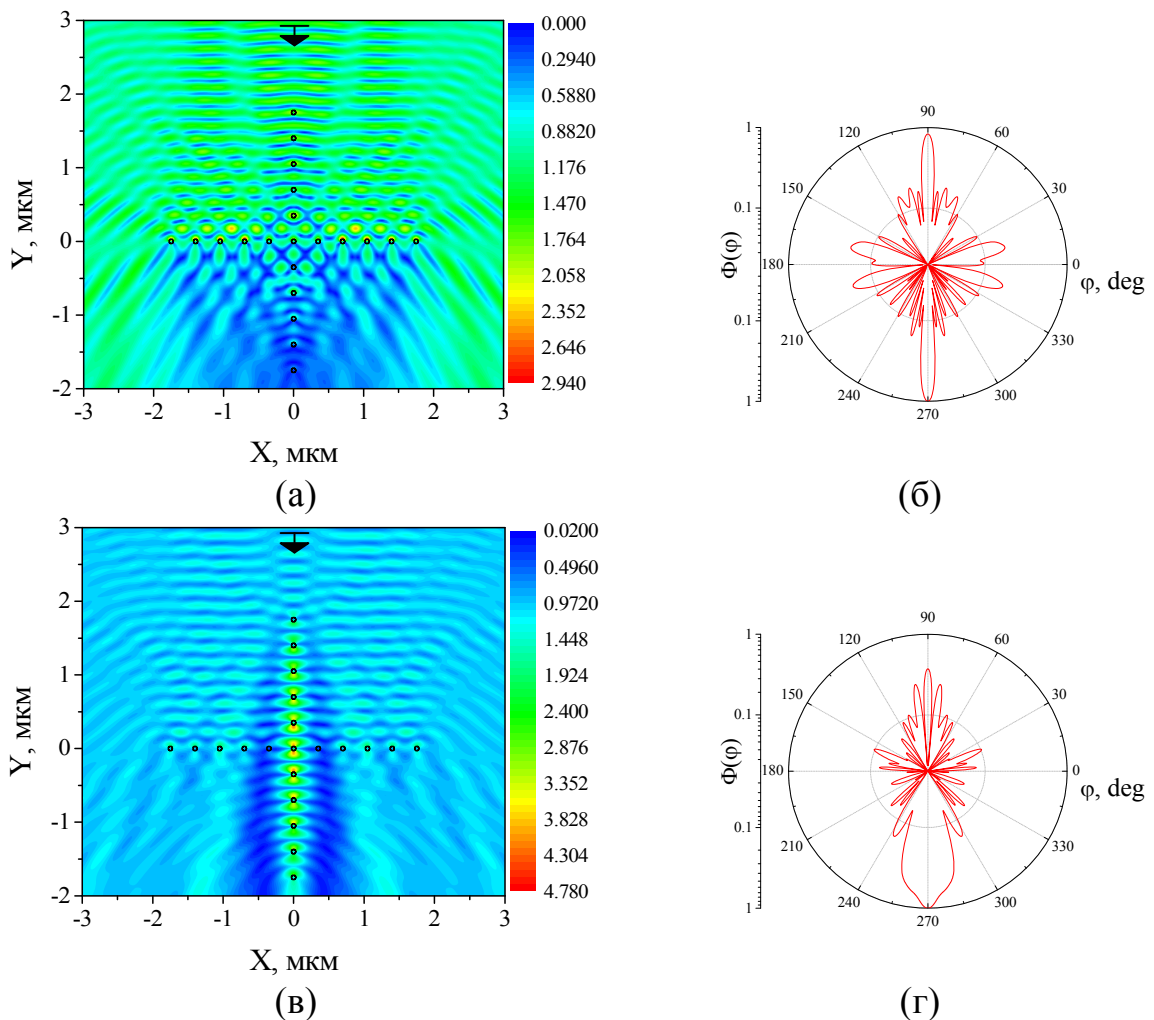


Рис. 3.15. Портрети магнітного поля в ближній зоні (а), (в) та діаграми розсіяння в дальній зоні (б), (г) для дискретних хрестів з 21 нанонитки радіусу 30 нм і періодом 350 нм на резонансних довжинах хвиль 347 нм (а-б) і 380 нм (в-г).

Необхідно відмітити, що амплітуди ближнього поля сягають найвищих максимумів не в плазмонному резонансі, а в гратковому. Це вказує на перспективність використання цього типу резонансів замість більш традиційного, локалізованого поверхневого плазмонного резонансу, при розробці різноманітних сенсорів та оптичних наноантен, де найбільш важливий ефект підсилення ближнього поля.

Крім того, проектування сенсору коефіцієнта заломлення середовища, заснованого на гратковому резонансі [96, 109], приваблює тим, що його об'ємна чутливість може бути порівняна з чутливістю традиційних сенсорів,

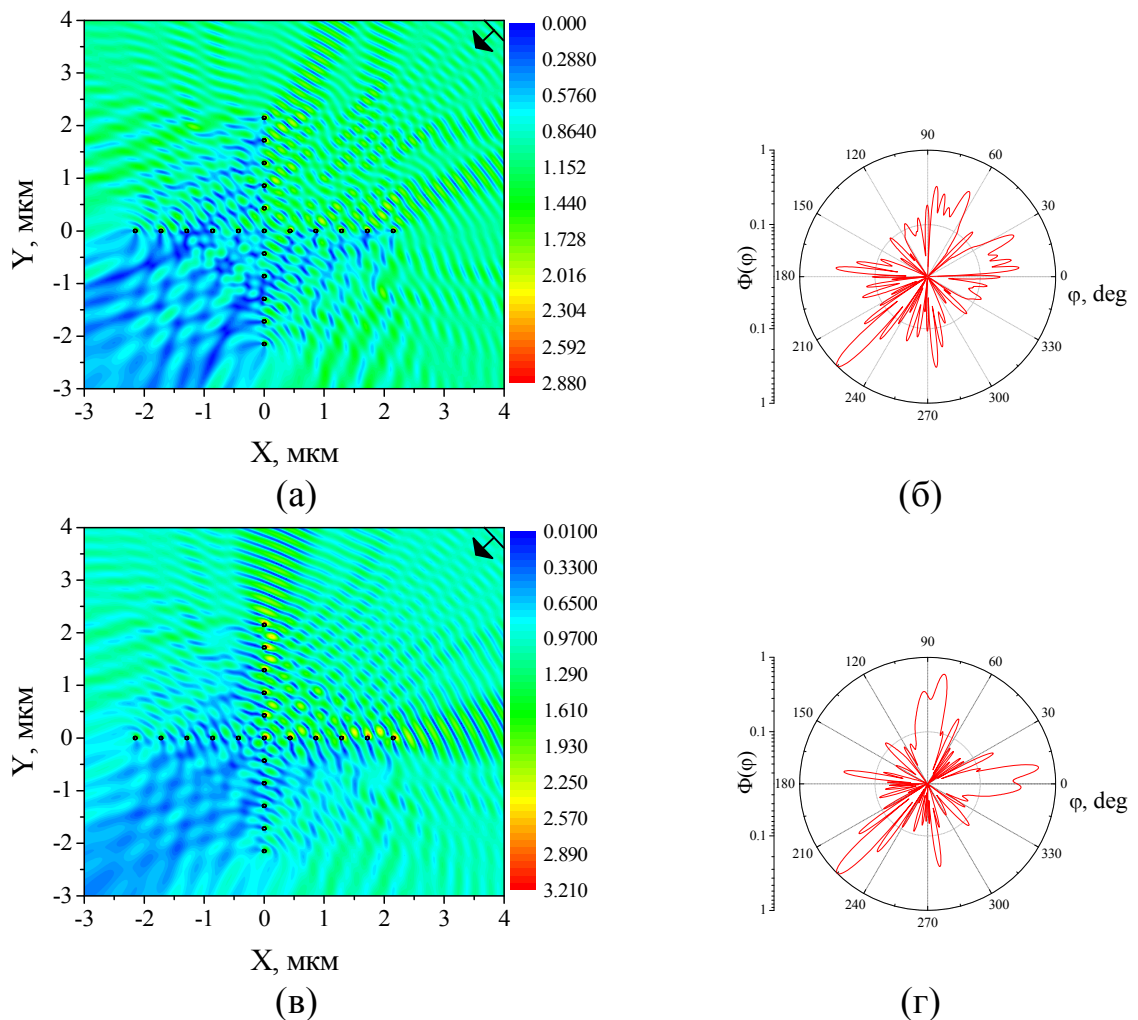


Рис. 3.16. Портрети магнітного поля в ближній зоні (а), (в) та діаграми розсіяння в дальній зоні (б), (г) для дискретних хрестів з 21 нанонитки радіусу 30 нм і періодом 430 нм на резонансних довжинах хвиль 348 нм (а-б) і 372 нм (в-г).

заснованих на плазмонному резонансі, але добротність може бути більшою, якщо число періодів  $M \gg 10$ . Це робить показник якості такого сенсору (добуток чутливості та добротності) більшим, ніж у традиційних сенсорів при умові, що речовина, яка аналізується, заповнює досить товстий шар (товстіший за довжину хвилі – див. [109]). Якщо сенсор використовує кут чи хрест з наночастинок замість лінійної решітки, то можливо просторово роз'єднати напрямки освітлення та прийому розсіяного світла.

Високодобротні резонанси на ґраткових модах також привабливі для розробки нанорозмірних тонких поглиначів для новітніх сонячних батарей. Це пов'язано з тим, що такі резонанси можна налаштовувати на певні довжини хвиль за допомогою вибору відповідного періоду. Тим самим можна створювати смуги підвищеного поглинання в тих частинах спектру, де відсутні резонанси на плазмонних модах. Додаткові можливості можуть виникнути при використанні більш складних конфігурацій, що складаються не з однієї, а кількох суб-решіток з різними періодами.

### 3.4 Двоперіодичні решітки

В даному підрозділі ми розглянемо два типи скінченних решіток зі срібних нанониток з двома різними періодами: розташованими на одній лінії (будемо називати їх Л2П) та в два шари (такі решітки назвемо С2П). Фактично це є дві лінійні решітки з різними періодами, які в першому випадку (Л2П) поставлені поряд на одній лінії, причому остання нитка решітки з періодом  $p_1$  є першою для решітки з періодом  $p_2$ , тобто якщо вважати кількість ниток в обох решітках однаковою, то  $M = 2M_1 - 1$ , а в другому (С2П) – одна над іншою так, щоб центри перерізів перших ниток кожного ряду знаходились рівно один над іншим (цю відстань позначено як  $p_y$ ). Схематично такі решітки зображено на Рис. 3.17.

На Рис. 3.18-3.19 представлено залежності нормованих ППР і ПП від довжини хвилі, порашовані для Л2П решітки з лівою частиною з  $M_1 = 50$  ниток, розташованих з періодом  $p_1 = 420$  нм, й правою частиною з такого ж числа ниток, розташованих з періодом  $p_2 = 380$  нм, для кількох кутів падіння від  $\pi/2$  (нормальне падіння) до 0 (ковзне падіння).

У випадку нормального падіння для решітки з тонких ниток (радіусу 30 нм, Рис. 3.18) видно тільки широкий пік на довжині хвилі плазмонного резонансу. Таким чином, решітка з 50 тонких срібних ниток є, мабуть, доволі короткою, або породжувати помітні граткові резонанси.

Однак якщо кут падіння зробити меншим, то виникає один або, більш того, два (для  $\varphi_0 = \pi/8$ ) додаткових гострих й інтенсивних резонансних піки.

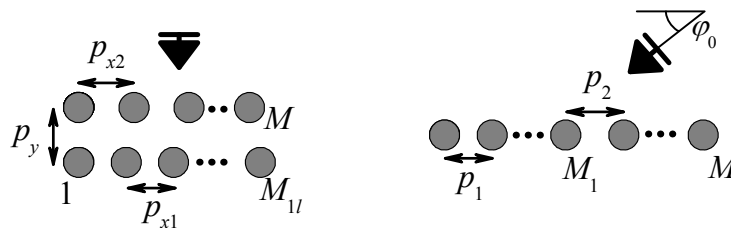


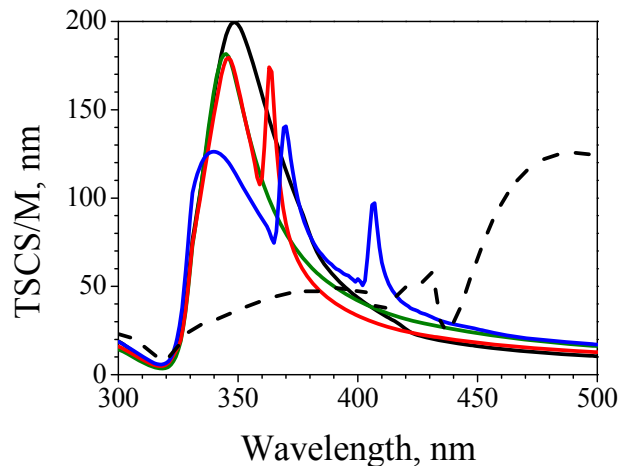
Рис. 3.17. Поперечний переріз решіток з двома періодами: двошарової (а) та лінійної (б).



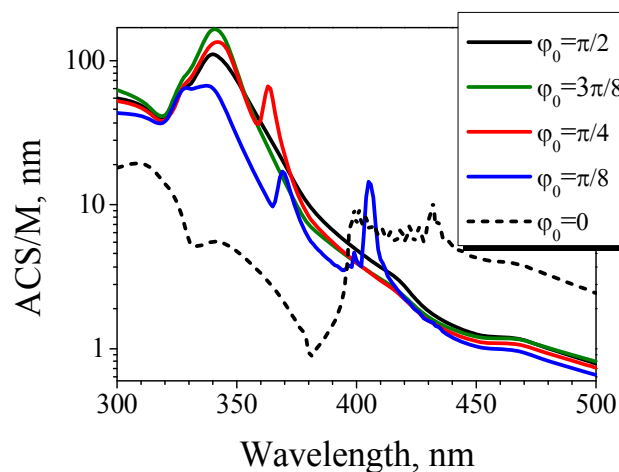
Вони є резонансами на ГМ на довжинах хвиль, трохи зсунутих у червону сторону спектру від довжин хвиль аномалій Релея, що відповідають розповсюдженню +2-ї та +1-ї гармонік Флоке.

Якщо нитки вдвічі товстіші (радіусу 60 нм, Рис. 3.19), то навіть 50 ниток достатньо для того, щоб з'явилися добре помітні ґраткові резонанси як для випадку нормального, так і для випадку похилого падіння.

Необхідно відмітити, що для Л2П решітки всі нитки освітлюються однаково, й тому немає суттєвого ефекту затінення, окрім випадку ковзного падіння при  $\varphi_0 = 0$ .

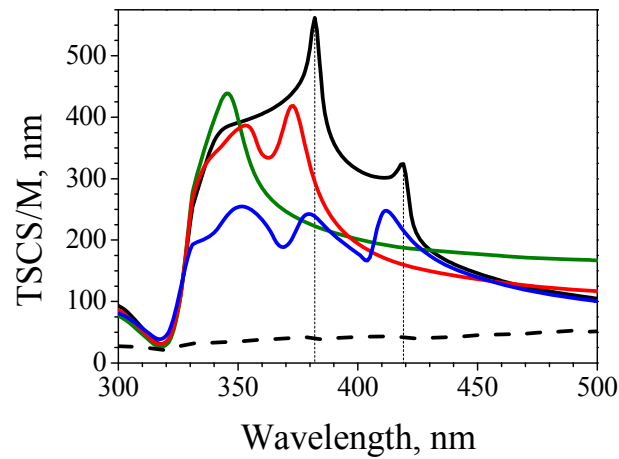


(a)

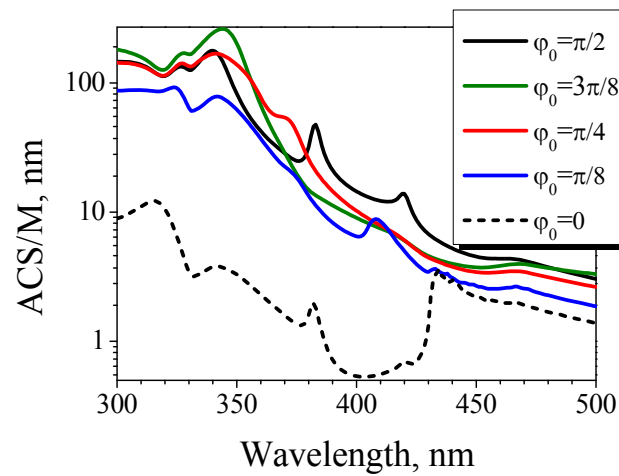


(б)

Рис. 3.18. Нормовані ППР (а) і ПП (б) як функції довжини хвилі для Л2П решіток з  $M = 99$  срібних нанониток радіусу 30 нм з періодами  $p_1 = 420$  нм і  $p_2 = 380$  нм під різними кутами падіння Н-поляризованої плоскої хвилі.



(a)



(б)

Рис. 3.19. Те ж саме, що й на Рис. 3.18 для Л2П решіток з нанониток радіусу 60 нм.

Портрети ближнього поля, представлені на Рис. 3.20, розраховані на довжинах хвиль двох ґраткових резонансів, які відповідають періодам лівої та правої частин решітки. Тому на Рис. 3.20(а) видно, що права половина решітки світиться, з характерною стоячою хвилею на  $\pm 1$ -х квазі-гармоніках Флоке вздовж площини решітки, тоді як ліва половина знаходиться не в резонансі й тому залишається темною. Подібним чином, на Рис. 3.20(в) ліва половина яскраво світиться, тому що знаходиться в резонансі, а права - темна. Необхідно відмітити, що в кожному випадку більш глибока тінь знаходиться за темною частиною решітки.

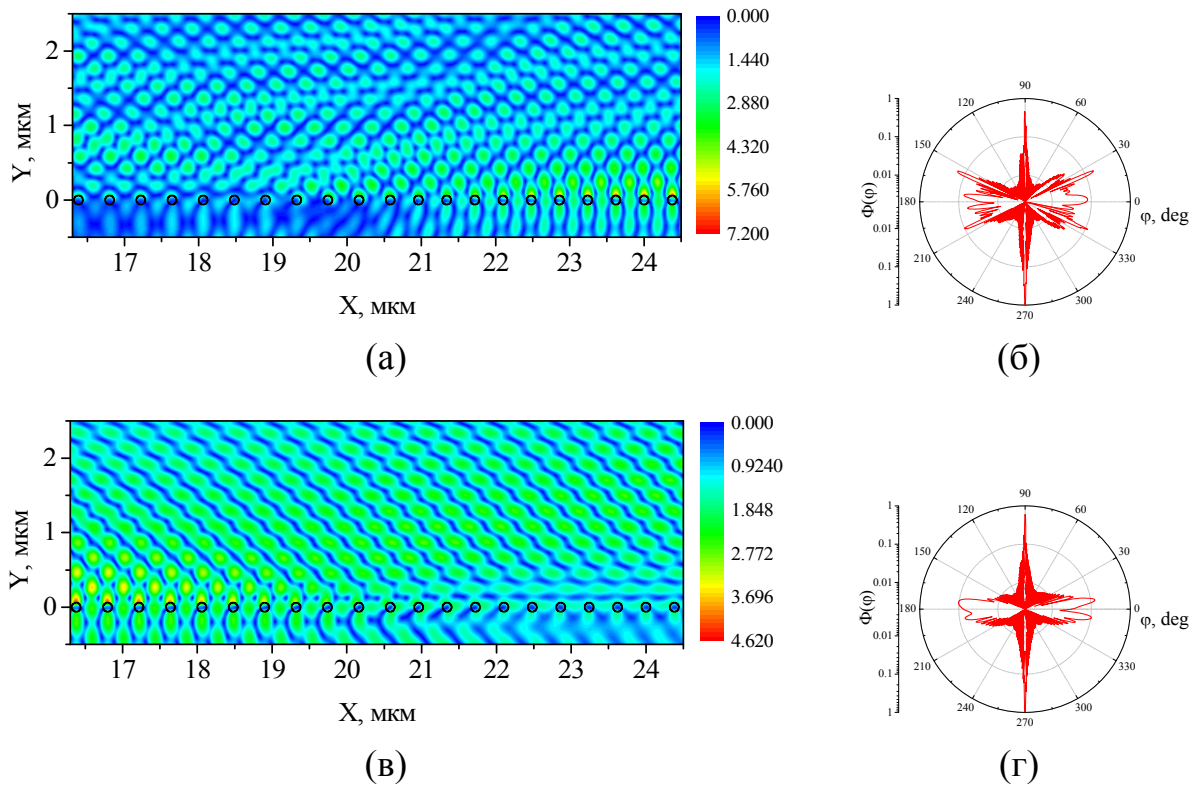
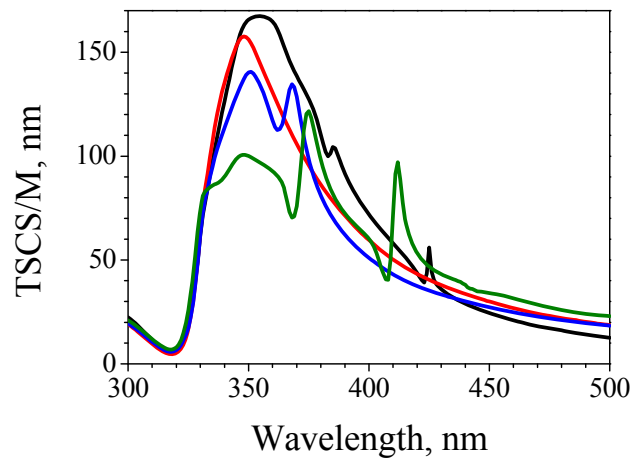


Рис. 3.20. Портрети магнітного поля в ближній зоні 20-ти центральних періодів (а), (в) і діаграми розсіяння в дальній зоні (б), (г) для Л2П решіток з 99 ниток радіусу 60 нм з періодами  $p_1 = 420$  нм,  $p_2 = 380$  нм на довжинах хвиль ґраткових резонансів 382 нм (а-б) і 419 нм (в-г),  $\varphi_0 = \pi / 2$ .

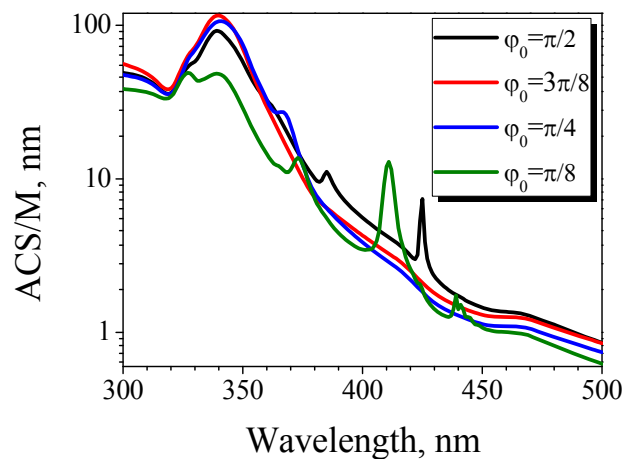
Також корисно візуалізувати нормовані на максимум діаграми розсіяння в дальній зоні  $\Phi(\varphi)$  на резонансних довжинах хвиль. Рис. 3.20 (б) і (г) розраховано на тих самих довжинах хвиль, що й ближні поля, представлені зліва від них. Вони демонструють інтенсивні та гострі тіні утворювальні пелюстки та пелюстки дзеркального відбиття (0-а гармоніка Флоке). Нагадаємо, що повний розмір композитної решітки дорівнює приблизно  $98\lambda$ , що робить її дійсно великим розсіювачем. Крім того, в обох випадках присутні інтенсивні пелюстки розсіяння вздовж площини решітки – вони виникають через випромінювання резонансно великих  $\pm 1$ -х гармонік Флоке з кінцівок скінченної решітки. Також, крім того, на Рис. 3.20(б) можна побачити додаткові інтенсивні бокові пелюстки на кутах приблизно  $28^\circ$  відносно площини решітки, котрі відсутні на Рис. 3.20(г). Ці бокові пелюстки

відповідають  $\pm 1$ -м гармонікам Флоке, які розсіяні нерезонансною частиною складеної решітки, що досліджується. Вони відсутні на Рис. 3.20(г), тому що в цьому випадку згадані гармоніки Флоке не розповсюджуються, тому що ця довжина хвилі більша за період нерезонансної частини решітки.

На відміну від плоских одношарових (лінійних) решіток, для конфігурації С2П складеної двошарової двоперіодичної решітки затінення нижнього шару решітки верхнім, що опромінюється напряму, впливає на характеристики розсіяння та поглинання. В цьому випадку тільки приблизно половина всіх ниток освітлюється безпосередньо. Це призводить до зменшення (приблизно на 20%) нерезонансних й резонансних значень



(a)

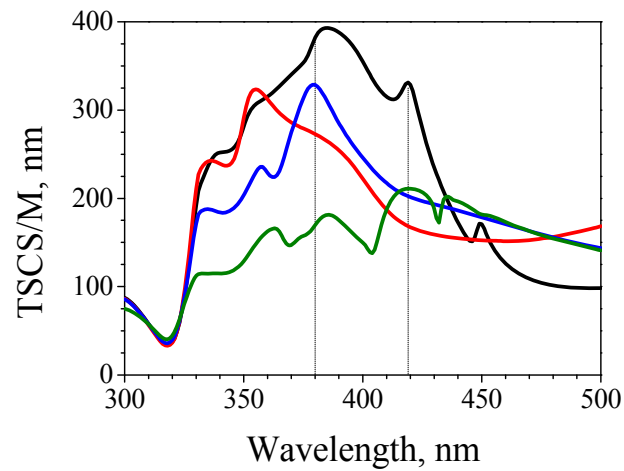


(б)

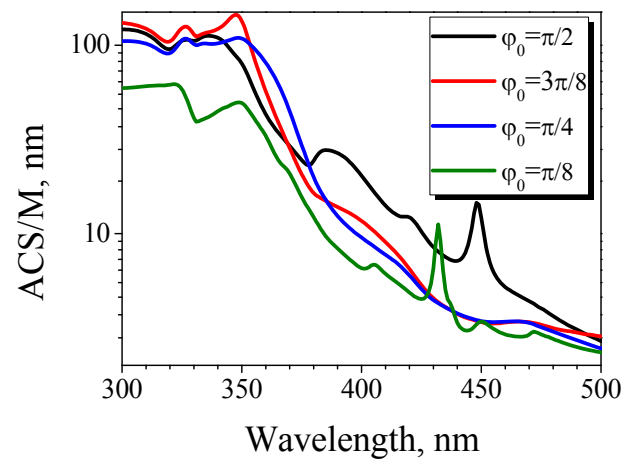
Рис. 3.21. Нормовані ППР (а) і ПП (б) в залежності від довжини хвилі для С2П решіток з  $M = 105$  ( $M_1 = 50$ ) срібних нанониток радіусу 30 нм з періодами  $p_1 = 420$  нм і  $p_2 = 380$  нм під різними кутами падіння Н-поляризованої плоскої хвилі.

нормованих ППР і ПП у порівнянні з такими значеннями для одиночної нитки. На Рис. 3.21-3.22 представлено залежності нормованих ППР і ПП для С2П решіток зі 105 нанониток ( $M_1 = 50$ ) радіусів 30 нм (Рис. 3.21) і 60 нм (Рис. 3.22) з такими ж значеннями періодів, як і для досліджених Л2П решіток ( $p_{x1} = 420$  нм,  $p_{x2} = 380$  нм), а значення  $p_y$  було вибране таким, що дорівнює  $5a$ .

На Рис. 3.21-3.22 також видно й інші – резонанси на ГМ, які з'являються при похилому падінні (для тонших ниток) або тільки при нормальному падінні (для товстіших ниток) на довжинах хвиль, близьких до +2-ї та +1-ї аномаліям Релея.



(a)



(б)

Рис. 3.22. Те ж саме, що й на Рис. 3.21 для С2П решіток з нанониток радіусу 60 нм.

Відмітимо, що якщо радіус нитки 30 нм (Рис. 3.21), то плазмонний резонанс залишається домінуючою особливістю в спектральних залежностях розсіяння та поглинання. Мабуть так стається через те, що 50 або 55 ниток в решітці з дуже тонких нанониток – це все ще мала кількість для того, щоб з’явилися інтенсивні ґраткові резонанси. Збільшення їхньої товщини у 2 рази, до радіусу 60 нм (Рис. 3.22), призводить до того, що в спектрі розсіяння всі резонанси мають порівнянні пікові значення. Однак у спектрі поглинання плазмонний резонанс все ще є найінтенсивнішим через великі втрати у

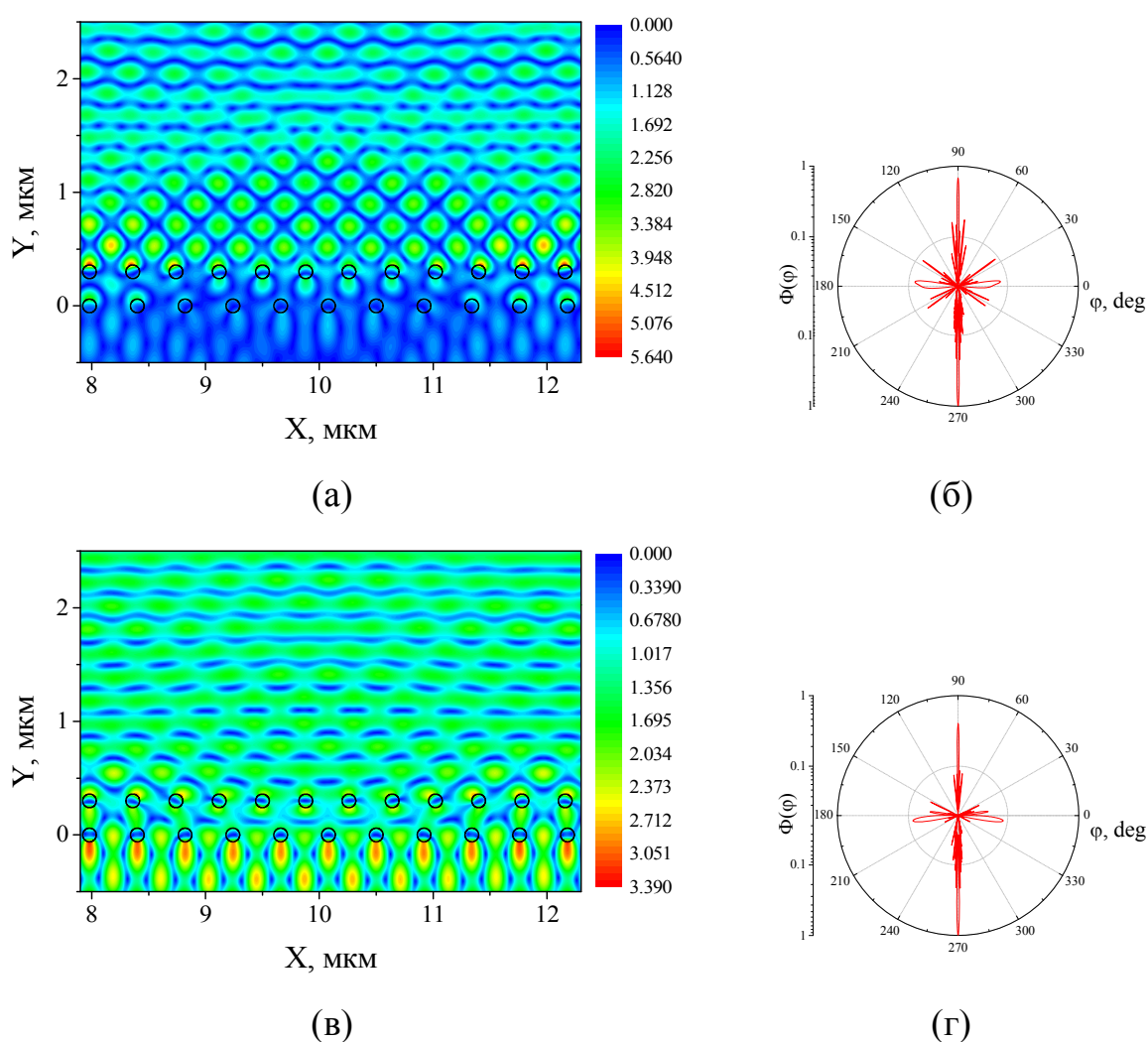


Рис. 3.23. Портрети магнітного поля в ближній зоні центральних ниток (а), (в) та діаграми розсіяння в дальній зоні (б), (г) для С2П решіток зі 105 ниток ( $M_1 = 50$ ) радіусу 60 нм і періодами  $p_{x1} = 420$  нм,  $p_{x2} = 380$  нм,  $p_y = 5a$  на довжинах хвиль ґраткових резонансів 380 нм (а-б) і 419 нм (в-г),  $\varphi_0 = \pi / 2$ .

сріблі, які збільшуються в фіолетовій області (див. Рис. 1.1(б)), де й знаходиться цей резонанс.

Портрети ближніх полів, які наведено на Рис. 3.23 (а), (в), розраховані на довжинах хвиль двох ґраткових резонансів, що відповідають періодам верхнього (того, що опромінюється) й нижнього (того, що затінений) шарів С2П решітки. Тому на Рис. 3.23 (а) видно, що верхній шар світиться, тоді як нижній затінений та лишається темним, тому як знаходиться поза резонансом. Протилежним чином, на Рис. 3.23 (в) нижній слой решітки, період якого близький до довжини хвилі, яскраво світиться, а ефект затінення верхнім шаром не спостерігається.

Нормовані діаграми розсіяння в дальній зоні на тих самих довжинах хвиль наведені на Рис. 3.23 (б) і (г). Їхні основні особливості – це гострі тіньові пелюстки й пелюстки дзеркального відбиття, які є найінтенсивнішими через великий розмір композитного розсіювача (приблизно  $50\lambda$ ). Ширші, але також інтенсивні пелюстки розсіяного випромінювання присутні в площині решітки. Вони народжуються резонансними квазі-гармоніками Флоке, які розповсюджуються вздовж решітки, якщо довжина хвилі наближена до однієї з аномалій Релея.

### **3.5 Дискретний параболічний рефлектор з нанониток**

Фокусування хвиль з використанням суцільних металевих рефлекторів широко використовується в оптиці та квазіоптиці, а параболічні рефлектори є найпоширенішими та ефективними з них. Як було показано в попередніх розділах, переріз розсіяння окремої нанонитки різко зростає в плазмонному резонансі. Тому цікаво перевірити, як ефективно фокусує світло дискретний параболічний рефлектор (ДПР) зі срібних нанониток. Геометрію поперечного перерізу ДПР представлено на Рис. 3.24.

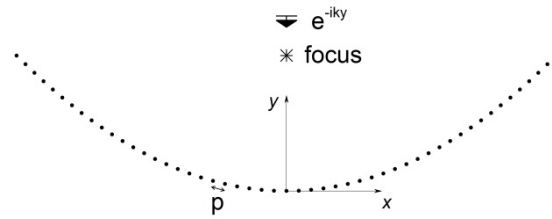


Рис. 3.24. Геометрія поперечного перерізу ДПР з нанониток.

ДПР представляє собою структуру з  $M$  паралельних ідентичних нанониток, центри перерізів яких розташовані симетричним чином на параболічній кривій та розділені відстанню  $p$  між ними. Будемо вважати, що центр центральної нитки є також вершиною параболи, який знаходиться на початку координат, тому число  $M$  – непарне. Фокус параболи знаходиться в точці  $(0; f)$ , а парабола задається рівнянням:  $\bar{y} = a\bar{x}^2 / 4f$ , де  $\bar{y} = ya$ ,  $\bar{x} = xa$ . Рефлектор освітлюється нормально падаючою (вздовж вісі  $y$ ) плоскою хвилею. Як відомо, найважливішими параметрами параболічних рефлекторів є величини  $f/D$  і  $D/\lambda$ , де  $f$  – фокусна відстань,  $D$  – апертура параболи, а  $\lambda$  – довжина хвилі.

Дослідимо властивості фокусування вказаного ДПР, а саме, вплив на них плазмонного резонансу срібних нанониток та наявності квазі-періодичності. Як відомо (див., наприклад, [159]), для звичайних суцільних рефлекторів оптимальне значення фокусної відстані складає чверть апертури, тобто  $f/D = 0.25$ . Для дослідження резонансних властивостей ДПР будемо використовувати коефіцієнт відбиття падаючої хвилі, нормований на число нанониток,

$$R = \frac{2}{\pi M k p} \int_0^\pi |\Phi(\varphi)|^2 d\varphi. \quad (3.1)$$

Наступні числові результати відносяться до ДПР з числом ниток  $M \geq 51$  і фокусним параметром  $f/D \geq 0.25$ .



На Рис. 3.25 представлено графіки коефіцієнту відбиття як функції довжини хвилі в діапазоні від 300 нм до 500 нм для кількох ДПР з ниток радіусу 70 нм та двох значень відстані між нитками: 391 нм (Рис. 3.25 (а)) та 450 нм (Рис. 3.25 (б)). При першому значенні збуджується найінтенсивніший комбінований резонанс при розсіянні на лінійній решітці з таких самих ниток (з точки зору параболі, це випадок, коли  $f \rightarrow \infty$ ), а при другому, у випадку тих же лінійних решіток плазмонний та ґраткових резонанси добре відокремлені один від одного.

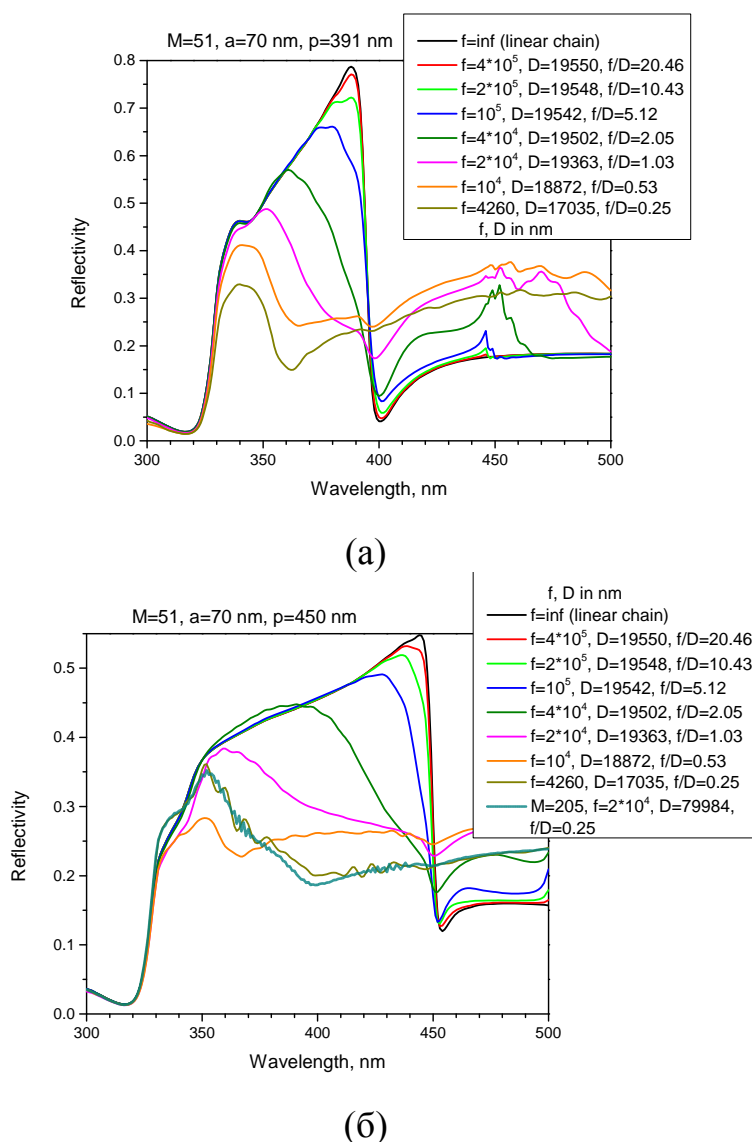


Рис. 3.25. Залежності нормованого коефіцієнту відбиття від довжини хвилі для різноманітних ДПР зі срібних нанониток радіусу 70 нм з відстанню між нитками 391 нм (а) та 450 нм (б).

Як видно, коефіцієнт відбиття ДПР з найбільшим фокусним параметром дуже близький до коефіцієнту відбиття лінійної решітки у всьому оптичному діапазоні. Гратковий резонанс стає видимим якщо  $f \geq 10^5$  нм, але в цих випадках  $f/D$  більш ніж у 10 разів більше за оптимальне значення (0.25), що призводить до значної втрати ефективності фокусування ДПР. При малих  $f$  граткові резонанси не виявляються, оскільки решітка є сильно викривленою, й на кривій коефіцієнту відбиття видно лише піки плазмонного резонансу.

На Рис. 3.26 представлено графіки амплітуди поля в геометричному фокусі в залежності від довжини хвилі для деяких ДПР з Рис. 3.23 для

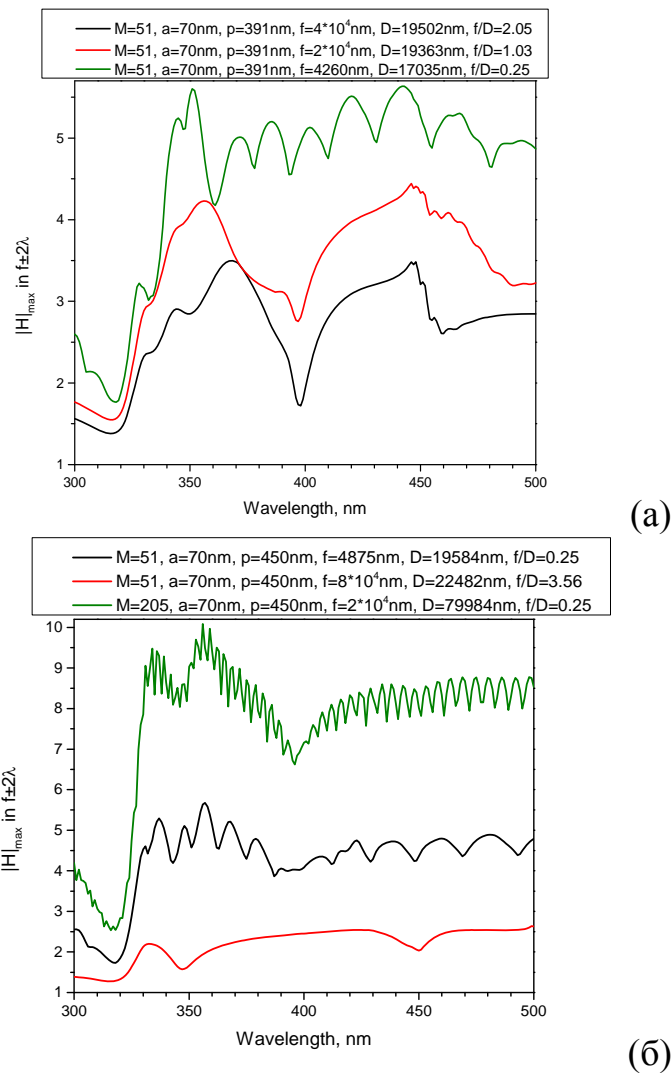


Рис. 3.26. Амплітуда поля в геометричному фокусі в залежності від довжини хвилі для різних ДПР зі срібних ниток радіусу 70 нм та періодами 391 нм (а) і 450 нм (б).

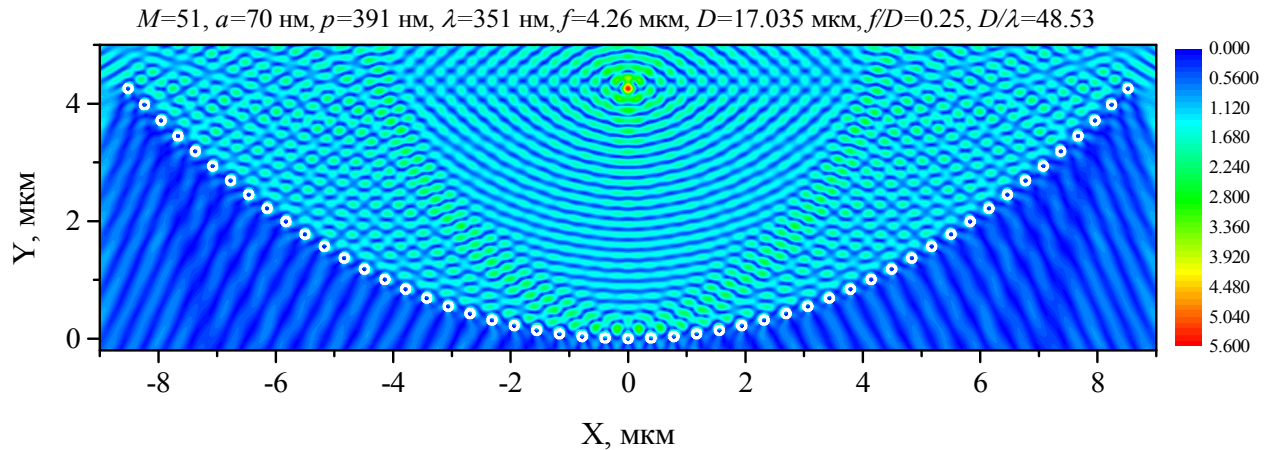


Рис. 3.27. Портрет ближнього поля в плазмонному резонансі на  $\lambda = 351 \text{ нм}$  для ДПР з 51 нитки радіусу 70 нм, з відстанню між нитками 391 нм, й фокальним параметром  $f/D = 0.25$ .

випадків, коли  $f/D = 0.25$  і коли ґраткових резонанс стає видимим на графіках коефіцієнту відбиття.

За допомогою цієї величини можна оцінити спроможність фокусування ДПР. Видно, що зі всіх досліджених ДПР з 51 нанонитки краще за всіх фокусує ДПР з  $f/D = 0.25$  в плазмонному резонансі на кожній нитці. Що до ґраткового резонансу, то можна побачити істотне зниження фокусування на довжинах хвиль, значення яких приблизно дорівнює значенню періоду. Дослідження ДПР з 205 ниток, що розташовані з інтервалом у 450 нм і  $f/D = 0.25$ , демонструє, що залежності коефіцієнту відбиття від довжини хвилі (Рис. 3.26(б)) не демонструють ґраткових резонансів, мабуть через сильну кривизну ДПР. Разом з тим, значення поля в фокусі для ДПР з 205 ниток приблизно в два рази вище, ніж для ДПР з 51 нитки, у всьому світловому діапазоні. Таким чином, мабуть, ґратковий резонанс неможливо застосувати для фокусування електромагнітних хвиль зігнутими дискретними рефлекторами.

Для наочної демонстрації спроможності фокусування ДПР корисно побудувати портрет ближнього поля ДПР. Такий портрет наведено на Рис. 3.27 для ДПР з 51 срібно нитки радіусу 70 нм з  $p = 450 \text{ нм}$  та

$f / D = 0.25$  при  $\lambda = 351$  нм, тобто в плазмонному резонансі на кожній нитці. На рисунку добре видно яскраву фокусну пляму з центром у геометричному фокусі відповідної параболи.

### 3.6 Лінійна решітка у псевдо-випадковій хмарі з плазмонних нанониток

Під час дослідження ґраткових резонансів виникає резонне питання, наскільки ці резонанси є чутливими до відхилень від періодичності. Це питання можна сформулювати й інакше: який ефект дає часткове періодичне структурування довільного ансамблю ідентичних розсіювачів?

Відповідь на це питання цікава для наноантенних і наносенсорних технологій [160], а також у дослідженнях по безструктурній нанофотоніці [161]. Ще при дослідженні лінійних решіток з нанониток було помічено, що присутність періодичності при достатньо великій кількості нанорозсіювачів має специфічну «ознаку» в залежностях ППР від довжини хвилі та кута падіння (див. Рис. 2.9). У цьому підрозділі представлений аналіз того, наскільки добре видима ця «ознака періодичності» в тому випадку, коли

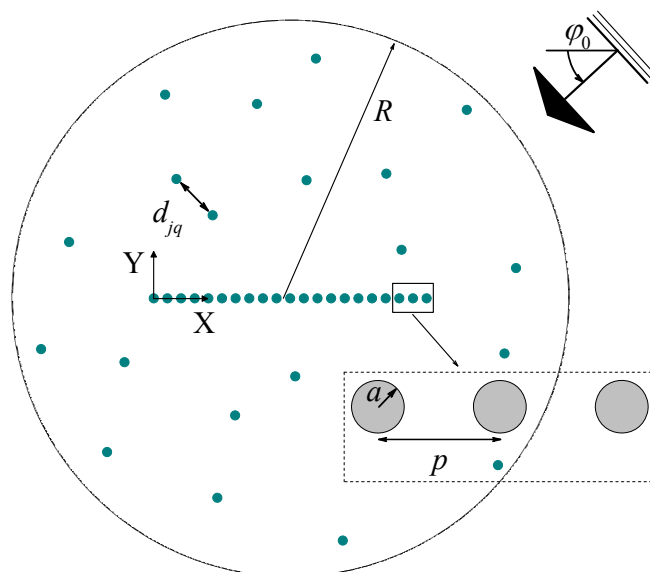


Рис. 3.28. Поперечний переріз скінченної решітки з нанониток у хмарі з розташованих випадковим чином таких самих нанониток.

скінченна решітка понурена в хмару з великої кількості довільно розташованих нанорозсіювачів.

Розглянемо розсіяння Н-поляризованої плоскої хвилі на скінченній лінійній решітці з  $M_p$  срібних нанониток, яка знаходиться у хмарі зі  $M_c$  подібних нанониток. Геометрію поперечного перерізу такої структури з уведеними позначеннями наведено на Рис. 3.28.

Чисельні результати, які представлені нижче, відносяться до решіток від 50 до 200 ниток радіусу 60 нм з періодом 450 нм. Навколо решітки, в границях кола діаметру 200 періодів, псевдо-випадковим чином розташовані ще 200 ниток. Їхні точні координати наведено в Додатку Б. У кожному випадку невпорядкована частина хмари зостається такою ж самою. Хмару,

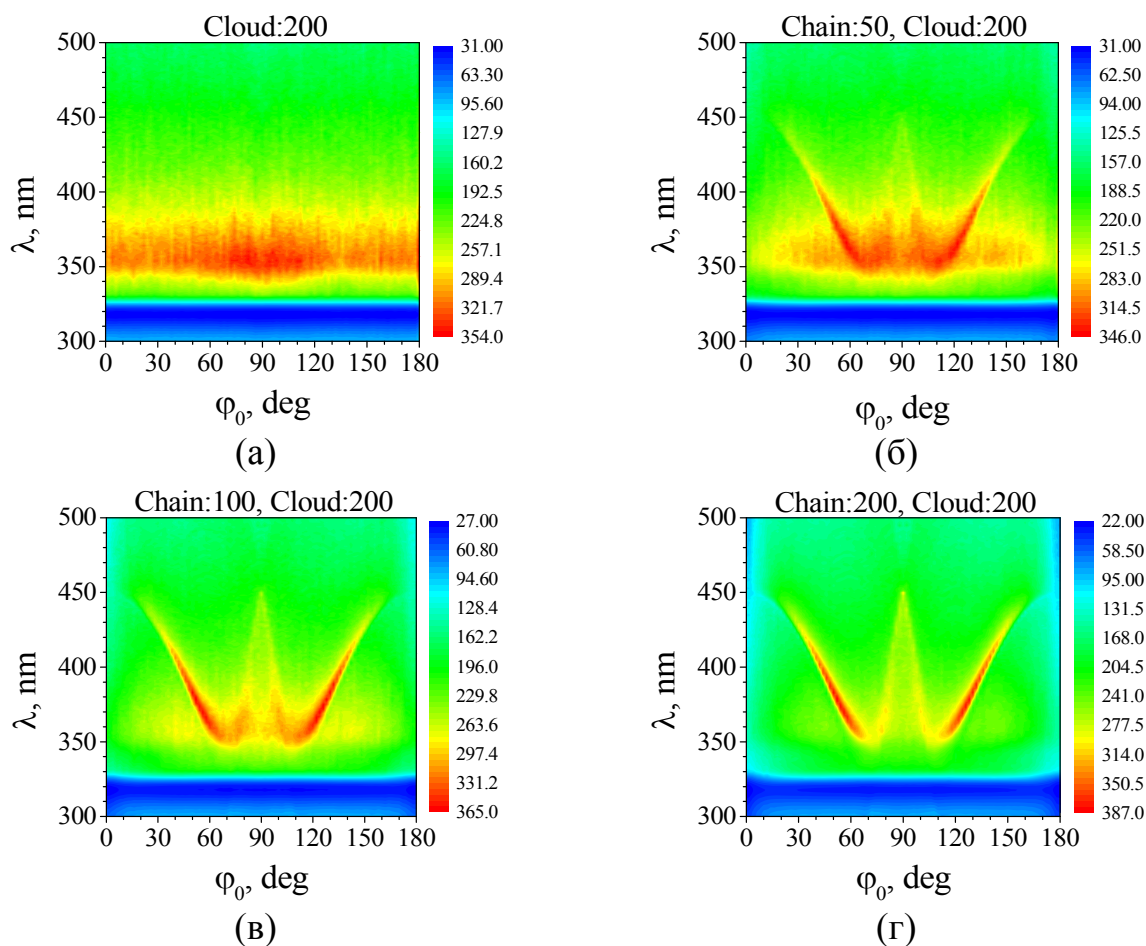


Рис. 3.29. Рельєфи нормованого ППР (у нм) на площині довжини хвилі й кута падіння плоскої хвилі для хмари з 200 довільно розташованих срібних нанониток (а) та такої ж хмари, в центрі якої розміщено лінійні решітки з різної кількості подібних нанониток (б-г).

що розглядається, можна вважати розрідженою: мінімальна відстань між центрами довільних ниток складає  $10.67a$  (відстань між центрами сусідніх ниток в решітці дорівнює  $7.5a$ ).

На Рис. 3.29 представлено рельєфи нормованого на  $M$  ППР як функції кута падіння та довжини хвилі, для хмари з 200 псевдо-випадково розташованих ниток й такої ж хмари, в яку поміщені решітки з 50, 100 і 200 ниток.

На Рис. 3.29(а) видно яскраву смугу локалізованого плазмонного резонансу на довжинах хвиль 350-370 нм для всіх кутів падіння; ніяких інших ефектів не спостерігається, що говорить про те, що нитки не взаємодіють поміж собою. Так стається тому що, як було сказано вище, хмара з ниток є досить розрідженою.

На Рис. 3.29(б) видно, що поява решітка з 50 нанониток всередині хмари змінює рельєф нормованого ППР настільки істотно, що можна побачити характерну особливу прикмету – «ознаку періодичності» – у вигляді W-образної області підвищеного розсіювання для кута падіння, який змінюється від  $0$  до  $360^\circ$ . Ця область W-образної форми дзеркально симетрична відносно  $90^\circ$  та  $270^\circ$ , незважаючи на те, що внесок розсіювання на довільно розташованих нитках дещо різний, але різниця ця дуже мала в усереднених значеннях характеристик, у кожному квадранті площини. При збільшенні кількості ниток у решітці характерна ознака періодичності стає все більш яскравою через зростаючу добротність ґраткових резонансів (див. Рис. 3.29 (в) і (г)). У випадку, коли  $M_p = M_c = 200$ , то резонансна смуга плазмонного резонансу навіть перестає бути видимою на фоні більш яскравої W-образної області резонансів на ґраткових модах.

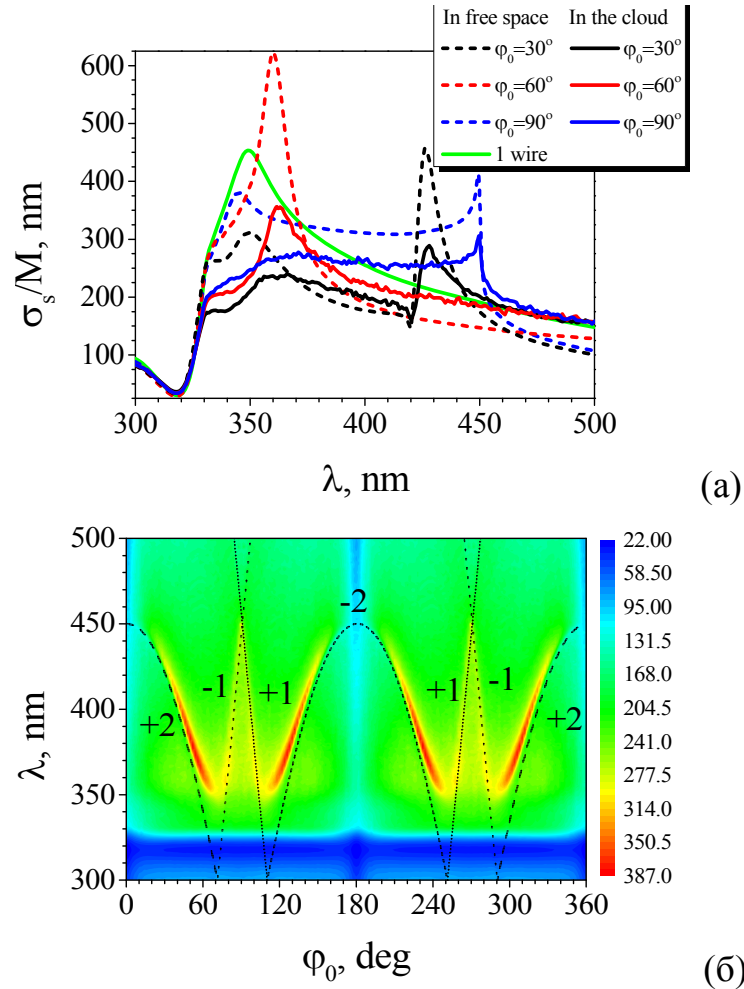


Рис. 3.30. Нормований ППР як функція довжини хвилі для різних кутів падіння для решітки у хмарі, 200+200 ниток, у порівнянні з такою ж решіткою у вільному просторі (а), й рельєф нормованого ППР в залежності від довжини хвилі та кута падіння для решітки у хмарі, 200+200 ниток (б).

Для наочності, на Рис. 3.30(а) представлено спектри нормованого ППР для кутів падіння  $30^\circ$ ,  $60^\circ$  і  $90^\circ$ . На Рис. 3.30(а) представлено порівняння результатів обчислень ППР для решітки у хмарі з  $M_p = M_c = 200$  та для «голої» решітки з 200 нанониток у вільному просторі. Для порівняння також зеленою кривою нанесено спектр ППР одиночної срібної нитки у вільному просторі.

В обох випадках помітні резонанси двох типів. Плазмонні резонанси знаходяться поблизу довжини хвилі 350 нм на всіх кривих, тобто з хмарою й без неї. Це – очікувано, оскільки плазмонні моди збуджуються на кожній

нитці. Ефект від хмари проявляється тільки в затіненні частини ниток іншими нитками, що краще освітлюються. Це зменшує нормований пік плазмонного резонансу приблизно у 2 рази. На відміну від них, положення максимумів ґраткових резонансів залежать від кута падіння (якщо період зафіксовано). Звісно, що ґраткові резонанси для решітки без хмари мають вищі значення в максимумах; однак вони видимі на тих самих довжинах хвиль. Тим цікавіше те, що додавання хмари з довільним чином розташованих 200 нанониток не перешкоджає ґратковим резонансам відігравати головну роль та демонструвати більш інтенсивні піки, ніж на плазмонних резонансах.

На Рис. 3.30(б) представлено рельєф нормованого ППР на площині довжини хвилі та кута падіння для повної конфігурації решітка у хмарі. Необхідно відмітити, що така структура – це величезний складений розсіювач з загальним діаметром десь близько 200 довжин хвиль. На цьому рельєфі області найінтенсивнішого розсіяння тягнуться вздовж (але не збігаються з ними) чорних пунктирних ліній  $\pm 1$  і  $\pm 2$ , які відповідають аномаліям Релея для нескінченної решітки з таким самим періодом.

Поява таких областей – це і є ознакою наявності періодичності у хмарі з 250-400 нанониток. Як видно, їхнє розташування практично збігається для кута падіння, що змінюється в кожному з квадрантів ( $0-90^\circ$ ) і ( $90^\circ-180^\circ$ ). Тому на Рис. 3.29 представлено рельєфи тільки для кутів падіння з верхньої півплощини.

Для того, щоб краще побачити роль хмари у ближньому полі, на Рис. 3.31 представлено портрети ближнього поля, а також діаграми розсіяння в дальній зоні. Ближнє поле візуалізовано в області в центрі решітки з 200 ниток у вільному просторі й для такої ж решітки у хмарі з 200 ниток, при нормальному падінні.



Для відокремленої решітки можна побачити характерну для ґраткових резонансів стоячу хвилю, яка утворена  $\pm 1$ -ми квазі-гармоніками Флоке в ближній зоні з яскравими плямами як біля ниток, так й поміж ними. У хмарі таку картину все ще видно, але вона стає «зашумленою» через вплив не періодично розташованих ниток навколо решітки.

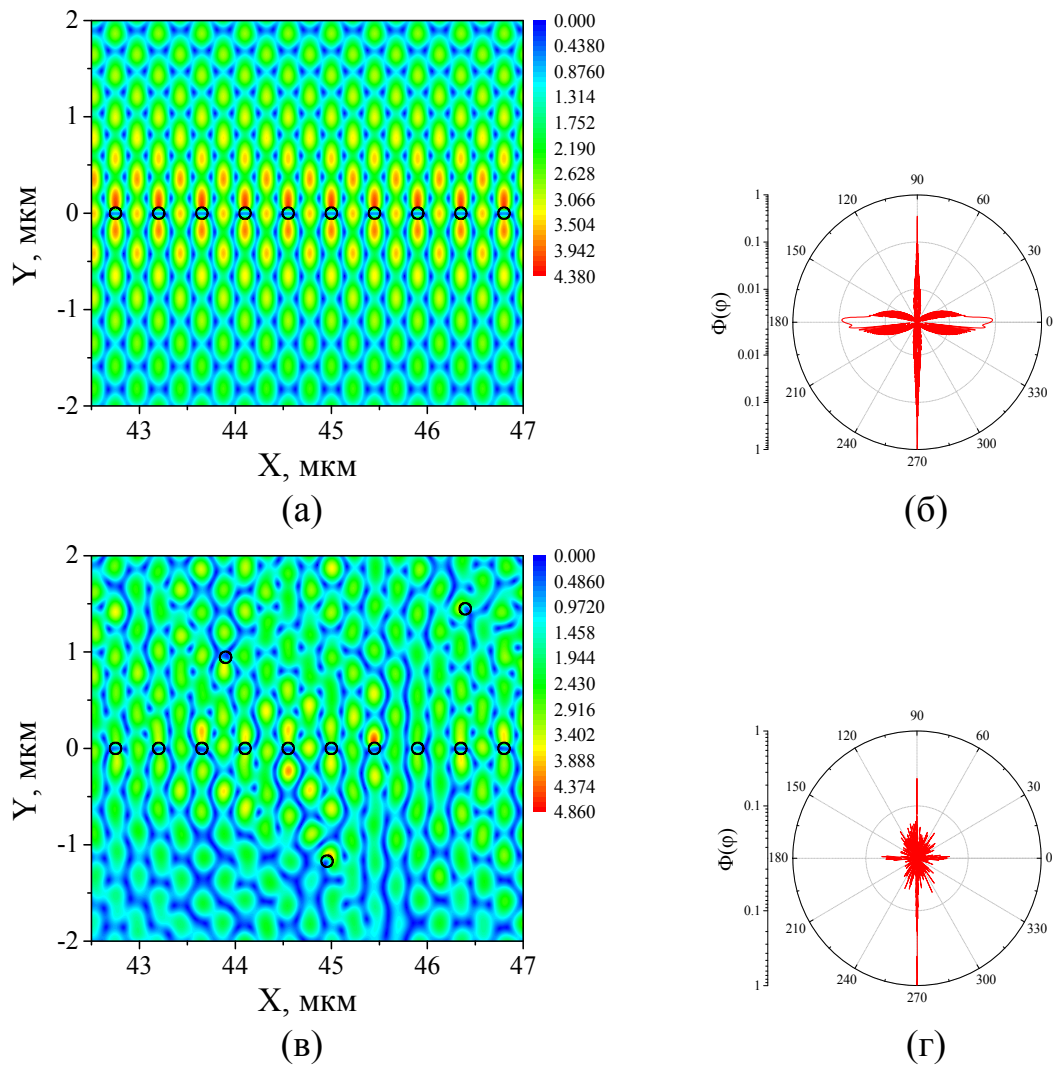


Рис. 3.31. Портрети магнітного поля в ближній зоні для 9 центральних періодів і діаграми розсіяння в дальній зоні для решітки з 200 ниток з періодом 450 нм у вільному просторі (а-б), та для такої ж решітки в хмарі з ще 200 ниток (в-г) на довжинах хвиль ґраткового резонансу 450.1 нм,  $\varphi_0 = \pi / 2$ .

На діаграмах розсіяння в дальній зоні видно інтенсивний тіньовий пелюсток і пелюсток дзеркального відбиття (вони відповідають 0-й гармоніці Флоке для відповідної нескінченної решітки) й додатково два більш широкі бокові пелюстки в площині решітки. Останні пелюстки відповідають ковзному розповсюдженню  $\pm 1$ -х дифракційних порядків Флоке. Всі ці особливості також зостаються видимими, якщо решітка з 200 ниток знаходиться у хмарі з 200 довільно розташованих ниток, незважаючи на те, що останні створюють невеликий за інтенсивністю шум по всіх напрямках.

На Рис. 3.32 представлено ближні поля та діаграми розсіяння в дальній зоні для таких самих двох конфігурацій для решітки з 200 ниток, як і на

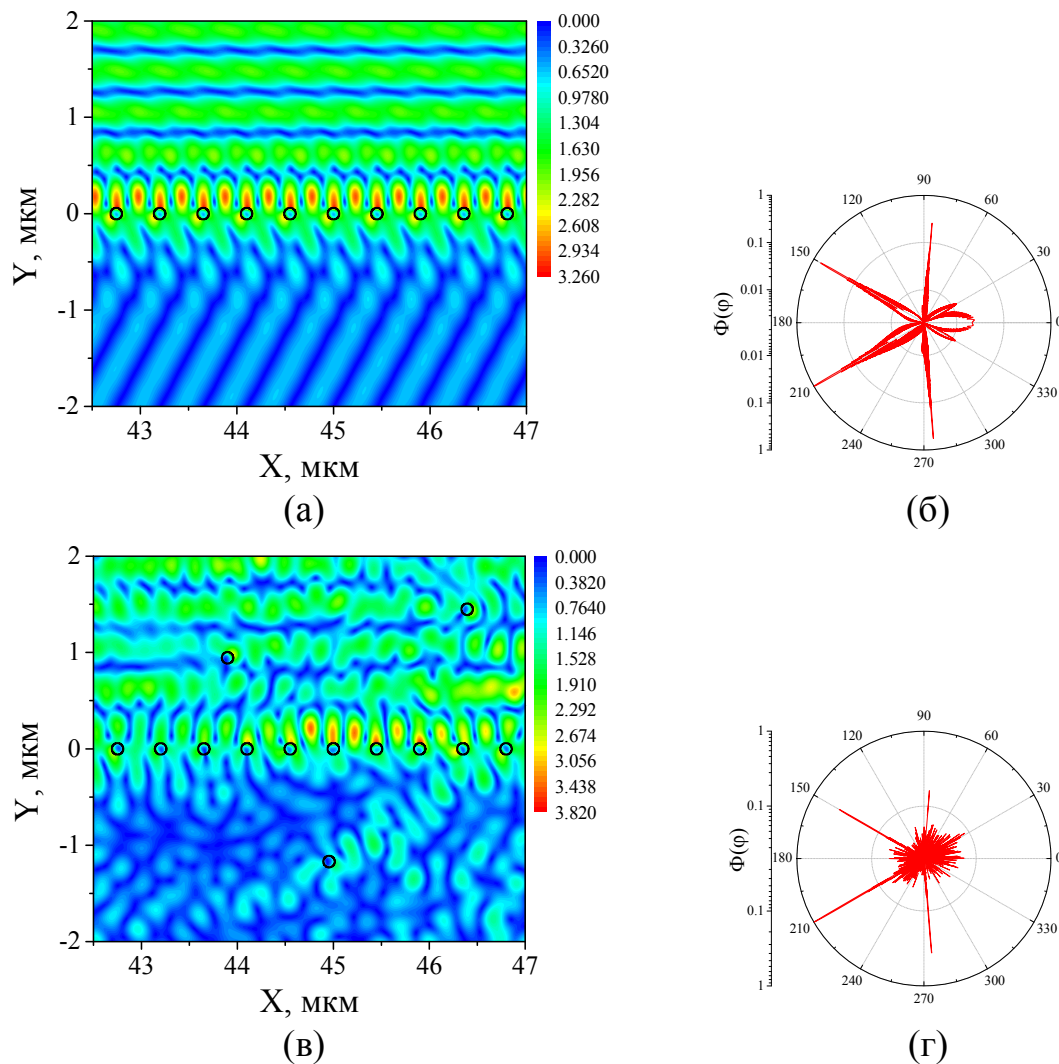


Рис. 3.32. Те ж саме, що й на Рис. 3.31 на довжинах хвиль ґраткового резонансу 426.4 нм для  $\varphi_0 = \pi / 6$ .

Рис. 3.31, однак для кута падіння  $30^\circ$ . У цьому випадку довжина хвилі +2-го граткового резонансу знаходиться трохи вище довжини хвилі аномалії Релея з номером +2 (див. Рис. 3.28). Крім того, +1-а квазі-гармоніка Флоке розповсюджується під кутом, близьким до  $\pm 80^\circ$ . В результаті у гратковому резонансі решітка, яка знаходиться у вільному просторі, демонструє стоячу хвилю в зоні відбиття. У дальньому полі видно інтенсивний та гострий тіньовий пелюсток, а також пелюсток дзеркального відбиття, 2 гострих пелюстки +1-ї гармоніки Флоке плюс широкий пелюсток у напрямі  $\varphi = 0$ , що відповідає ковзній +2-й гармоніці Флоке.

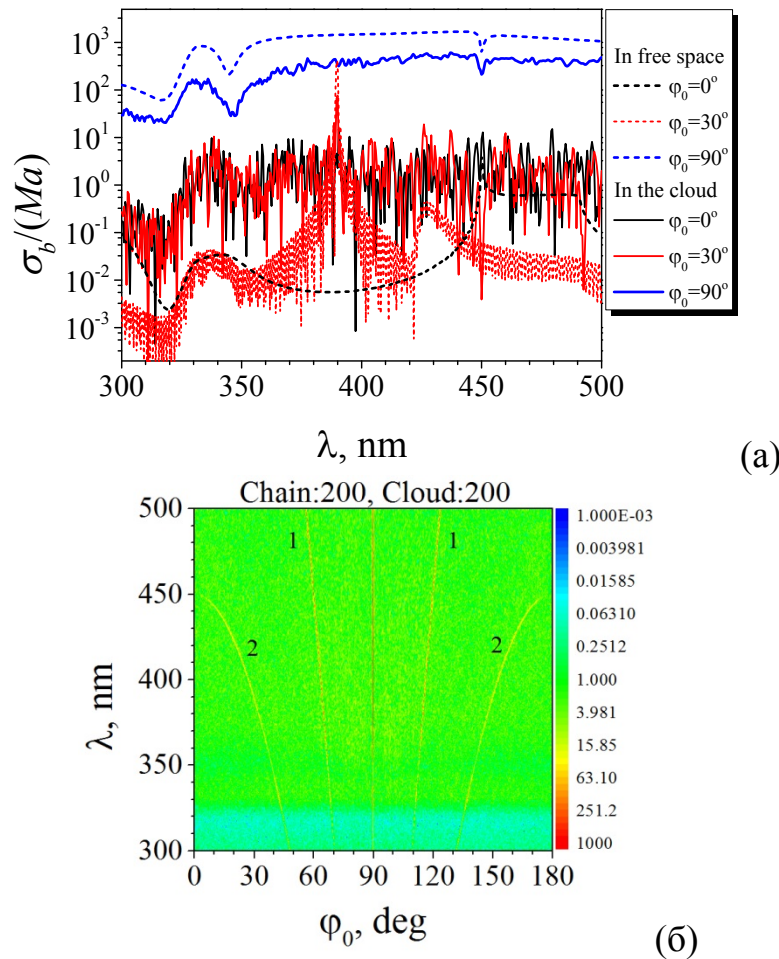


Рис. 3.33. Нормований ПЗР як функція довжини хвилі для різних кутів падіння для решітки з 200 ниток у хмарі з 200 ниток, у порівнянні з такою ж решіткою у вільному просторі (а), та рельєф нормованого ПЗР в залежності від довжини хвилі та кута падіння для решітки у хмарі, 200+200 ниток (б).

Аналіз ППР дає інформацію о фундаментальних фізичних особливостях розсіяння. Інша характеристика – переріз зворотного розсіяння (ПЗР) – є важливою для сенсорного застосування. На Рис. 3.33 представлено залежності нормованого на  $Ma$  ПЗР від довжини хвилі для декількох кутів падіння плоскої Н-поляризованої хвилі на таку ж саму, яку було розглянуто вище, лінійну решітку з 200 срібних нанониток у хмарі з таких самих 200 ниток (див. Рис. 3.33(а)) та рельєф нормованого ПЗР в залежності від кута падіння та довжини хвилі (Рис. 3.33(б)). Плазмонний резонанс є добре видимий як різкий мінімум на довжині хвилі 350 нм на кривих ПЗР, тому що майже все світло розсіюється в напрямках, відмінних від зворотного; однак це менше помітно на рельєфі, де переважає шум, який утворюється через довільно розташовані нитки у хмарі. Але все ж таки присутність періодичності також спостерігається. При нормальному падінні можна побачити мінімум біля довжини хвилі 450 нм, оскільки в резонансі на гратковій моді частина світла уходить в ковзних напрямках (див. Рис. 3.31 і 3.32).

Для випадків похилого й ковзного падіння бреггівські резонанси виробляють сильне розсіяння у зворотному напрямі, яке у 10-20 разів сильніше за шум. Їхні резонансні довжини хвиль можуть бути знайдені з закону Брегга, який у наших позначеннях запишеться наступним чином:  $\lambda_B = 2(p/|s|)\cos\varphi_0$ , де  $s = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  це бреггівські порядки. Яскраві плями з великими значеннями ПЗР на рельєфі Рис. 3.33 відповідають значенням  $s = 0$  для  $\varphi_0 = 90^\circ$  та  $\pm 1, \pm 2$  в залежності від того, чи менший або більший  $\varphi_0$ , ніж  $90^\circ$ .

### Висновки до розділу 3

У даному розділі було розглянуто розсіяння та поглинання Н-поляризованих плоских хвиль на скінченних періодичних структурах зі срібних нанониток. Такими структурами були дискретний кут і дискретний хрест, двоперіодичні решітки, багат шарові решітки, дискретний параболічний рефлектор, а також лінійна решітка у хмарі з довільним чином розташованих нанониток. За результатами проведених досліджень можна зробити наступні висновки:

1. Показано, що для всіх розсіювачів, які було розглянуто, спостерігаються резонанси й на плазмонних, й на ґраткових модах як у ППР, так і в ПП. Це обумовлено тим, що навіть в решітці з кількох десятків ниток існують ґраткові моди з помітно високою добротністю. При цьому побудова частотної залежності ПП є більш зручним інструментом для визначення резонансних частот.

2. Використання ґраткового резонансу замість плазмонного в сенсорах показника заломлення середовища, певно, спроможне збільшити його показник якості за рахунок більш високої добротності, що досягається збільшенням кількості елементів в решітці. Дискретний хрест чи кут з нанониток може виконувати функції ефективного вузько смугового відбивача.

3. Показано, що добротність резонансів на ґраткових модах зростає при зміні кута опромінення решітки. При похилому падінні у діапазоні довжин хвиль, що досліджується, резонанси на +2 ГМ мають більшу добротність, ніж резонанси на +1 ГМ. Завдяки тому, що резонанси на ґраткових модах можливо налаштовувати на певні довжини хвиль за допомогою вибору відповідного періоду решітки, а також кута падіння, вони є привабливими для використання в поглиначах сонячних батарей на основі решіток з наночастинок. Дослідження двоперіодичних решіток продемонструвало ще більші можливості для налаштування таких систем, завдяки наявності

резонансів на ґраткових модах біля довжин хвиль, що дорівнюють кожному з періодів.

4. Наявність навіть відносно невеликої періодичності у довільній структурі змінює її характеристики розсіювання. Продемонстровано, що введення решітки з 50 нанониток у довільну хмару з 200 таких самих нанониток змінює ППР таким чином, що стає добре видимим «ознака періодичності» у вигляді розтягнутих уздовж ліній аномалій Релея областей резонансів на ГМ. Крім того, на резонансних довжинах хвиль ДС в дальній зоні демонструють гострі пелюстки в напрямках гармонік Флоке, що розповсюджуються, а також інтенсивні пелюстки вздовж площини решітки. При збільшенні розміру періодичної решітки ці ефекти значно посилюються.

5. Моделювання дискретного параболічного рефлектору зі срібних нанониток показало, що за допомогою резонансів на плазмонних модах можливо досягти доволі ефективного фокусування. Однак посилити фокусування за рахунок використання резонансу на ґратковій моді не вдається. Це пояснюється тим, що форма перерізу параболічного рефлектору дуже сильно відхиляється від прямолінійного відрізка, який є необхідним для збереження періодичності.

## РОЗДІЛ 4

### ЧАСТОТИ, ПОРОГИ САМОЗБУДЖЕННЯ ТА ПОЛЯ МОД ПЛАЗМОННИХ ЛАЗЕРІВ НА ОСНОВІ СРІБНИХ НАНОНИТОК І НАНОТРУБОК

У цьому розділі представлено результати електродинамічного моделювання, за допомогою лазерної задачі на власні значення двомірних нанорозмірних лазерів на основі одиночних срібних нанониток і нанотрубок, а також періодичних решіток з діелектричних і срібних нанониток. Використовуючи таке моделювання, ми знаходимо частоти та пороги самозбудження власних мод, а також їхні поля, проводимо класифікацію мод, а також робимо висновки о факторах, що впливають на зниження порогу випромінювання. Матеріали розділу 4 опубліковано в роботах [5, 18, 26, 28, 30-31, 33, 35-37].

#### 4.1 Постановка задачі та основні рівняння для мод двовимірних нанолазерів кругового перерізу

На Рис. 4.1 представлено поперечні перерізи нанолазерів на основі срібної нанонитки та нанотрубки, що досліджувалися. Будемо вважати, що вони нескінченні вздовж вісі  $z$ ; та що електромагнітне поле не залежить від  $z$  й залежить від часу як  $e^{-i\omega t}$ . Виходячи з цього, будемо розглядати двовимірну задачу в площині поперечного перерізу  $(x, y)$ . Як було описано в розділі 1, для того, щоб резонатор мав можливість випромінювати незгасні у часі ЕМ хвилі, він повинен мати у складі активну зону, заповнену матеріалом, який здатний генерувати ЕМ випромінювання. Такими матеріалами можуть бути напівпровідники, полімери з добавками барвників, а також кристалічні речовини з присадками у вигляді іонів ербію та деяких інших рідкоземельних елементів. Всі вони здатні, при нагнітанні, демонструвати інверсну населеність електронних рівнів й стимульоване випромінювання світла.

Будемо вважати, що у нанолазерах, які моделюються, активна зона має вигляд концентричної кругової оболонки, співвісної зі срібною нанониткою або нанотрубкою. У випадку нанотрубки будемо вважати, що такою самою активною речовиною заповнено також її внутрішня область. Такий вигляд активної зони забезпечує її гарне перекриття з полями плазмонних мод, які притиснуті до границь металевого сердечника або трубки.

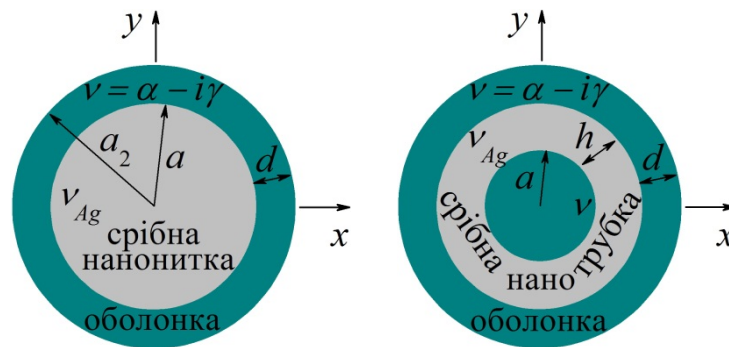


Рис. 4.1. Поперечні перерізи нанолазерів на основі срібної нанонитки та нанотрубки.

Позначимо функцією  $U$  компоненту магнітного поля  $H_z$ . Лазерна задача на власні значення (ЛЗВЗ) має на увазі, що функція  $U$  повинна задовольняти двовимірному рівнянню Гельмгольца з комплексними коефіцієнтами заломлення  $\nu_s$  ( $s = 1, 2, 3 \dots S$ ) в кожній з концентричних областей нанолазеру (в активній його частині  $\nu = \alpha - i\gamma$ , де  $\alpha$  – відомий показник заломлення, а  $\gamma$  – невідоме матеріальне підсилення). Будемо вважати всі матеріали немагнітними, таким чином діелектрична проникність кожного з них виражається через показник заломлення як  $\epsilon_s = (\nu_s)^2$ . Будемо також припускати, що матеріальне підсилення рівномірно розподілено по всій активній зоні та не залежить від довжини хвилі. На границях часткових областей має задовольнятися умова безперервності тангенційних компонент поля. Крім того, вимагатимемо задоволення умови випромінювання Зоммерфельду на нескінченності (2.3) й умови локальної обмеженості енергії (2.4).



Розглянемо загальний випадок, коли нанолазер має  $s \geq 2$  концентричних границь та, відповідно,  $S+1$  областей ( $s=1$  відповідає внутрішній області, а  $s=S+1$  – зовнішній області). Введемо полярні координати  $(r, \varphi)$  – див. Рис. 4.1. Позначивши відстань від центру до  $s$ -ї границі та показник заломлення в кожній з областей як  $a_s$  і  $\nu_s$ , відповідно, поле в кожній з областей можна записати у вигляді розкладання в ряд Фур'є по азимутальним функціям,

$$U^s(r, \varphi) = \sum_{m=0}^{\infty} \left[ A_m^s J_m(k\nu_s r) + B_m^s H_m(k\nu_s r) \right] \begin{cases} \cos m\varphi \\ \sin m\varphi \end{cases}, \quad (4.1)$$

де  $J_m$  і  $H_m$  – функції Бесселя та Ханкеля 1-го роду, відповідно, а  $A_m^s$  і  $B_m^s$  – невідомі коефіцієнти. З умови локальної обмеженості енергії та умови випромінювання, а також з властивостей циліндричних функцій витікає, що поле у самій внутрішній області повинно містити тільки функції Бесселя, а в зовнішньому просторі – функції Ханкеля, тобто  $B_m^1 = 0$  і  $A_m^{S+1} = 0$ . Лазери на основі нанонитки мають  $S = 2$  границі, а на основі нанотрубки –  $S = 3$  границі, тому застосування граничних умов веде до двох та трьох пар рівнянь, відповідно, та які мають наступний вигляд:

$$A_m^{s+1} J_m(k\nu_{s+1} a_s) + B_m^{s+1} H_m(k\nu_{s+1} a_s) - A_m^s J_m(k\nu_s a_s) - B_m^s H_m(k\nu_s a_s) = 0, \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\nu_{s+1}} \left[ A_m^{s+1} J'_m(k\nu_{s+1} a_s) + B_m^{s+1} H'_m(k\nu_{s+1} a_s) \right] - \\ & - \frac{1}{\nu_s} \left[ A_m^s J'_m(k\nu_s a_s) + B_m^s H'_m(k\nu_s a_s) \right] = 0, \end{aligned} \quad (4.3)$$

де  $s=1,2$ ,  $a_1 = a$ ,  $a_2 = a + h$ ,  $\nu_1 = \nu_{Ag}$ ,  $\nu_2 = \alpha - i\gamma$  для лазера на основі нанонитки та  $s=1,2,3$   $a_1 = a$ ,  $a_2 = a + d$ ,  $a_3 = a + d + h$ ,  $\nu_1 = \nu_3 = \alpha - i\gamma$ ,  $\nu_2 = \nu_{Ag}$  для лазера на основі нанотрубки.

Розділення змінних призводить до того, що всі моди розпадаються на незалежні ортогональні сімейства по азимутальному індексу  $m$ , а також по симетрії та антисиметрії відносно обраного напрямку  $\varphi = 0$ . При розв'язанні ЛЗВЗ розділення змінних дозволяє перейти до незалежних трансцендентних характеристичних рівнянь для мод кожного індексу  $m$  й досліджувати їх окремо,

$$\det \hat{T}(m, \lambda, \gamma) = 0, \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (4.4)$$

де  $\hat{T}$  – матричний оператор, який задається рівняннями (4.2)-(4.3) для всіх  $s$ , та який містить функції Бесселя та Ханкеля індексу  $m$  від аргументів, до складу яких входять показники заломлення всіх матеріалів нанолазеру. Для лазерів на основі нанониток та нанотрубок, відповідно, ці оператори мають наступний вигляд:

$$\hat{T}^{wire}(m, \lambda, \gamma) = \begin{pmatrix} H_m(ka_2) & -J_m(kva_2) & -H_m(kva_2) & 0 \\ H'_m(ka_2) & -J'_m(kva_2)/\nu & -H'_m(kva_2)/\nu & 0 \\ 0 & J_m(kva) & H_m(kva) & -J_m(kv_{Ag}a) \\ 0 & J'_m(kva)/\nu & H'_m(kva)/\nu & -J'_m(kv_{Ag}a)/\nu_{Ag} \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

$$\hat{T}^{tube}(m, \lambda, \gamma) = \begin{pmatrix} H_m(ka_3) & -J_m(kva_3) & -H_m(kva_3) \\ H'_m(ka_3) & -J'_m(kva_3)/\nu & -H'_m(kva_3)/\nu \\ 0 & J_m(kva_2) & H_m(kva_2) \\ 0 & J'_m(kva_2)/\nu & H'_m(kva_2)/\nu \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -J_m(kv_{Ag}a_2) & -H_m(kv_{Ag}a_2) & 0 \\ -J'_m(kv_{Ag}a_2)/\nu_{Ag} & -H'_m(kv_{Ag}a_2)/\nu_{Ag} & 0 \\ J_m(kv_{Ag}a) & H_m(kv_{Ag}a) & -J_m(kva) \\ J'_m(kv_{Ag}a)/\nu_{Ag} & H'_m(kv_{Ag}a)/\nu_{Ag} & -J'_m(kva)/\nu \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

Для нумерації коренів рівняння (4.4) в межах одного сімейства по азимутальному індексу  $m$  будемо використовувати другий індекс  $n = 1, 2, \dots$ , який відповідатиме числу варіацій поля вздовж радіусу.

Для чисельного знаходження коренів рівняння (4.4) ми використовуємо ітеративний алгоритм типу Ньютона, для якого необхідно задати початкові наближення величин, які відшуковуються. Сильна дисперсія діелектричної проникності срібла, а також невивченість мод подібних нанолазерів призводять до висновку, що початкові наближення зручніше та точніше всього брати поблизу мінімумів на рельєфах функцій  $|\det \hat{T}(m, \lambda, \gamma)|$ . При цьому було б зручно мати аналітичний опис функції діелектричної проникності срібла  $\varepsilon_{Ag}(\lambda)$ . Такі вирази існують – це формула Друде та її модифікації. Разом з тим, подібні формули є наближеннями. Тому потрібно порівняти їх з експериментальними даними (які ми використовували у попередніх розділах). Результати такого порівняння представлені в наступному підрозділі.

Під час дослідження мод нанолазерів на основі срібної нанонитки та нанотрубки й їхніх порогів самозбудження, необхідно обрати діапазони довжин хвиль й інших параметрів, в яких проводяться розрахунки. Тому як лазери на основі срібних нанониток і нанотрубок цікаві, перш за все, плазмонними модами, ми будемо вивчати субхвильові нанолазери з радіусом  $\leq 200$  нм у діапазоні довжин хвиль 190 – 700 нм.

#### 4.2 Моді нанолазера на основі срібної нанонитки: порівняння кількох моделей опису діелектричної функції срібла

Серед різноманітних коренів рівняння (4.4), в якому матрицю  $\hat{T}$  задано виразом (4.5), є власні значення плазмонних мод, довжини хвиль яких слабо залежать як від радіусу срібної нанонитки, так і від товщини активної оболонки. Як відомо, для срібної нанонитки у вільному просторі власні значення плазмонних мод трохи зсунуті в червону сторону спектру від довжини хвилі у 337 нм, для якої  $\text{Re} \varepsilon_{\text{Ag}}(\lambda) = -1$ . У цьому підрозділі вивчаються лазери з радіусами срібних ниток від 20 нм до 100 нм, вкриті активним матеріалом таким чином, що загальний радіус структури складає 200 нм.

Результати, що наведені нижче, відносяться до випадку  $m = 2$  (це так звані квадрупольні моди), однак поведінка власних значень для інших азимутальних індексів має дуже схожий характер. Така схожість пов'язана з відомим фактом, що плазмонні моди для кожного  $m$  (окрім  $m = 0$ ) мають довжини хвиль, які в першому наближенні не залежать від  $m$  й задовольняють рівнянню  $\text{Re} \varepsilon_{\text{Ag}}(\lambda) \approx -\alpha^2$  [157], де  $\alpha$  – показник заломлення зовнішнього середовища. На Рис. 4.2 представлено три рельєфи функції  $|\det \hat{T}(m=2, \lambda, \gamma)|$ , для радіусу срібного сердечника  $a = 30$  нм, товщини оболонки  $d = 170$  нм, та її діелектричної проникності 2.25 (тобто коефіцієнт заломлення  $\alpha = 1.5$ ) у смузі довжин хвиль між 190 нм і 450 нм.

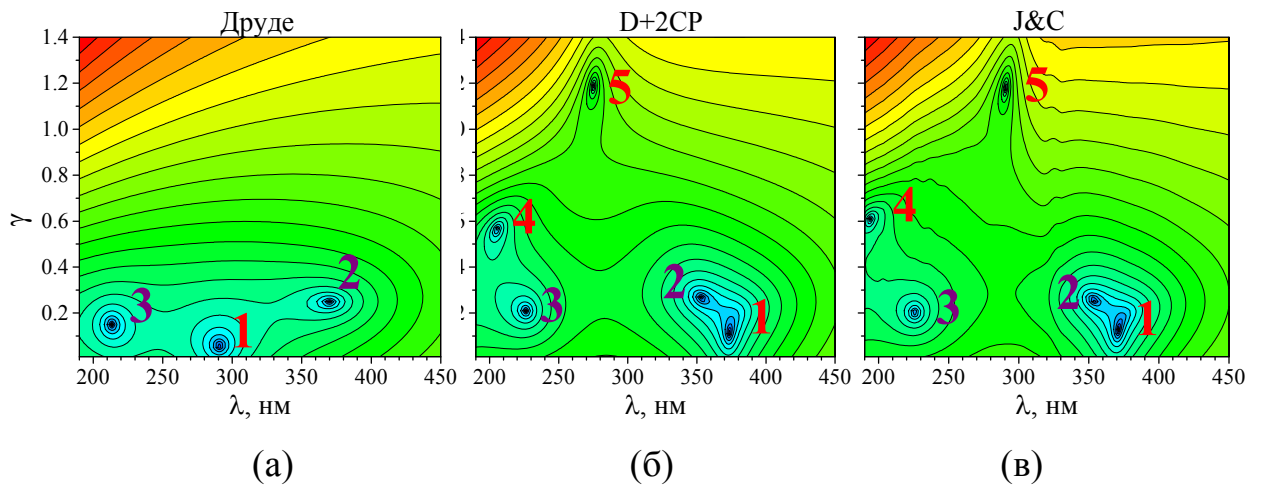


Рис. 4.2. Рельєфи модулю детермінанту  $|\det \hat{T}_{(m)}^{wire}|$  (лівої частини характеристичного рівняння (4.4) для нанолазера на основі срібної нанонитки з параметрами:  $a = 30$  нм,  $d = 170$  нм,  $\alpha = 1.5$ , азимутальний індекс  $m = 2$ . Залежність  $\varepsilon_{Ag}(\lambda)$  срібла вказано над кожним рельєфом: класична формула Друде (а), формула Друде, доповнена двома критичними точками (б), експериментальні дані Джонсона та Крісті (в).

Один з них був розрахований з використанням формули Друде з параметрами з [77] (як на відповідних кривих на Рис. 1.1) для діелектричної проникності срібла (а), інший – з використанням формули D+2CP з параметрами з робіт [78-80] (б), а третій – з використанням експериментальних даних Джонсона та Крісті з [75] (в).

Видно, що рельєф, який розраховано за допомогою моделі D+2CP, дуже близький до рельєфу, який розраховано з використанням експериментальних даних. Дійсно, в діапазоні, який розглядається, ця формула дає достатньо близьку апроксимацію експериментальних даних – див. Рис. 1.1.

Порівняння демонструє, що класична формула Друде передбачає існування квадрупольної плазмонної моди (яку позначено номером 1 на всіх трьох рисунках), проте зсунутої по довжині хвилі в фіолетову частину спектру приблизно на 80 нм від її справжньої позиції (порівняймо Рис. 4.2 (а) і (в)). Довжина хвилі випромінювання цієї моди трохи більша за довжину

хвилі плазмонного резонансу для срібної нитки у вільному просторі завдяки наявності скінченної оболонки з оптично більш щільного матеріалу. Ця мода має низьке значення порогу самозбудження (матеріального підсилення в матеріалі оболонки необхідного, аби скомпенсувати втрати). Крім того, у цьому ж діапазоні існують дві інші низькопорогові моди, які позначено номерами 2 і 3 на всіх трьох рисунках – це моди оболонки.

Неочікуваним результатом є існування ще двох мод з високими порогамі, яких немає, якщо використовується класична формула Друде. В той самий час, якщо використовувати модель D+2CP, то ці додаткові моди присутні. Їх позначено номерами 4 і 5 на Рис. 4.2 (б) і (в).

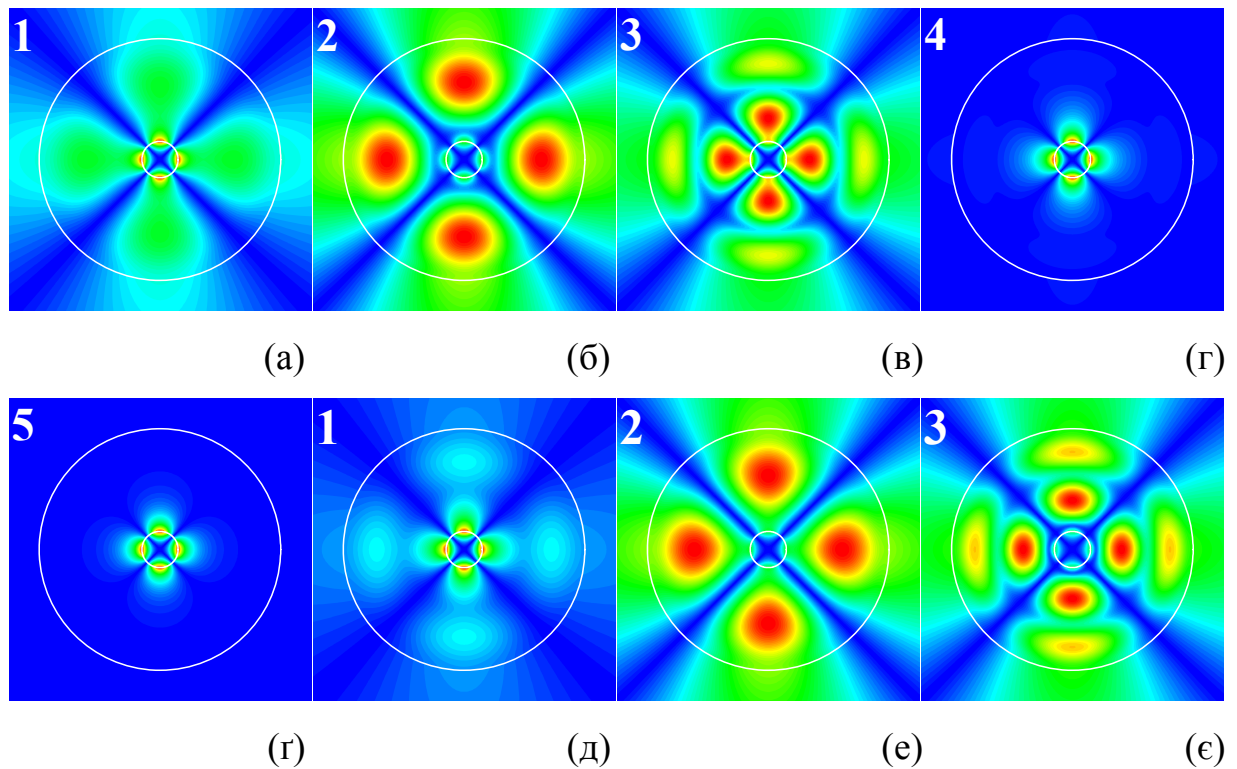


Рис. 4.3. Близні поля квадрупольних ( $m = 2$ ) власних мод нанолазера на основі срібної нанонитки з Рис. 4.2, цифри 1-5 на (а)-(г) відповідають модам на рельєфі Рис. 2(в), 1-3 на (д)-(е) відповідають модам на рельєфі Рис. 2(а): (а)  $\lambda = 371.137$  нм,  $\gamma = 0.128$ ; (б)  $\lambda = 353.44$  нм,  $\gamma = 0.257$ ; (в)  $\lambda = 225.737$  нм,  $\gamma = 0.202$ ; (г)  $\lambda = 193.922$  нм,  $\gamma = 0.608$ ; (г)  $\lambda = 290.491$  нм,  $\gamma = 1.179$ ; (д)  $\lambda = 290.713$  нм,  $\gamma = 0.058$ ; (е)  $\lambda = 370.001$  нм,  $\gamma = 0.248$ ; (е)  $\lambda = 213.394$  нм,  $\gamma = 0.15$ .

Для того, щоб класифікувати та пояснити моди лазеру на основі нанонитки, на Рис. 4.3 наведено відповідні їм портрети магнітного поля (нормованого на максимальне значення). Вони демонструють, що моди 1, 4 та 5 є плазмонними модами (з однаковим азимутальним індексом  $m = 2$ ). Їхні поля мають яскраві плями, що притиснуті до границі метала. Всі ці моди зникають, якщо сердечник виготовлено з матеріалу, який не має властивостей металу. Моду 1 можна назвати основною квадрупольною плазмонною модою, а інші дві – побічними квадрупольними плазмонними модами кругової срібної нанонитки. Плазмонну природу цих мод видно на портретах їхніх полів, див. Рис. 4.3. На відміну від них, моди 2 і 3 на Рис. 4.2 (а)-(в) є модами діелектричної оболонки, трохи збурені присутністю металевого сердечника. Портрети ближніх полів, що підтверджують цю інтерпретацію, наведено на Рис. 4.3 (б)-(в). Для них характерні яскраві плями всередині діелектричної оболонки.

Для порівняння, перші три моди, які передбачаються й моделлю Друде, також представлено – на Рис. 4.3 (д)-(є), їх розраховано з використанням класичної формули Друде для діелектричної функції срібла. Як видно, поля мод оболонки першого та другого радіального порядку візуалізуються доволі коректно, навіть якщо використовувати формулу Друде, однак поля плазмонних мод демонструють істотні відмінності.

Необхідно зауважити, що при адекватному описі діелектричної проникності срібла основна плазмонна мода 1 і мода 2 оболонки першого порядку можуть знаходитися доволі близько одна до одної на площині  $(\lambda, \gamma)$  (Рис. 4.2(в)). Завдяки цій близькості, їхні поля проявляють особливості гібридних мод, або супермод – подібно тому, як це має місце для мод кільцевих мікрорезонаторів [158]. Ближнє поле кожної з них демонструє присутність плям поля, що характерні для іншої моди: мода оболонки 2 має плазмоноподібну побудову поля біля границі з металом, тоді як яскраві плями плазмонної моди простягаються далеко в оболонку.

Підсумовуючи цей аналіз, нагадаємо, що кожна мода будь-якого азимутального індексу  $m > 0$  є двічі виродженою завдяки круговій симетрії. На практиці елементарні наночастинки типу сердечник-оболонка можуть формувати випадкові [118] або впорядковані [4] багаточасткові структури. Для двох або більше круглих нанониток, вкритих активними оболонками, ця симетрія зникає й виродженість знімається, хоча такі моди можуть формувати близькі дублети.

### **4.3 Моди нанолазера на основі срібної нанонитки: залежність частоти та порога самозбудження від параметрів**

Розглянемо числові результати, що описують властивості мод нанолазерів у залежності від радіусу срібного сердечника та товщини оболонки. При цьому, на відміну від попереднього підрозділу, будемо досліджувати та порівнювати між собою моди декількох азимутальних сімейств. Як і раніше, показник заломлення оболонки будемо вважати рівним  $\alpha = 1.5$ , що є типовим значенням для полімерних матеріалів, які активно застосовують у нанотехнології.

На Рис. 4.4-4.6 представлено траєкторії руху власних значень на площині  $(\lambda, \gamma)$  для дипольних (а), квадрупольних (б) і гексапольних (в) мод нанолазера на основі срібної нитки радіусу  $a = 50$  нм в залежності від товщини активної оболонки  $d = a_2 - a$ . Моди різних типів позначено різними символами, а відповідні значення товщини оболонки позначено різними кольорами. При цьому крайні значення нанесені на рисунки. Товщина активної оболонки збільшувалася з кроком 10 нм. Крім того ділянки площини  $(\lambda, \gamma)$  з підвищеною концентрацією мод показані на вставках у збільшеному масштабі. Як видно з рисунків, траєкторії мод мають достатньо складну форму, особливо в областях з їхньою високою концентрацією.



Для повноти аналізу на Рис. 4.7 наведено траєкторії власних значень для квадрупольних мод нанолазера з різними радіусами срібного сердечника від 20 нм до 100 нм при фіксованому загальному радіусі нанолазера  $a_2 = 200$  нм.

Серед великої кількості мод, які існують в діапазоні, що досліджується, головний інтерес представляють моди з найменшими порогами самозбудження. Видно, що такими є моди, які ми назвали основними плазмонними. На Рис. 4.4-4.7 їх нанесено квадратними символами. Позначимо їх як  $P_m^0$ . Що до інших, побічних, плазмонних мод, то ми будемо позначати також їхній умовний порядковий номер верхнім індексом починаючи від 1. Наостанок, моди оболонки ми позначаємо як  $H_{mn}$ , з індексом  $n$ , який відповідає кількості варіацій поля вздовж радіусу.

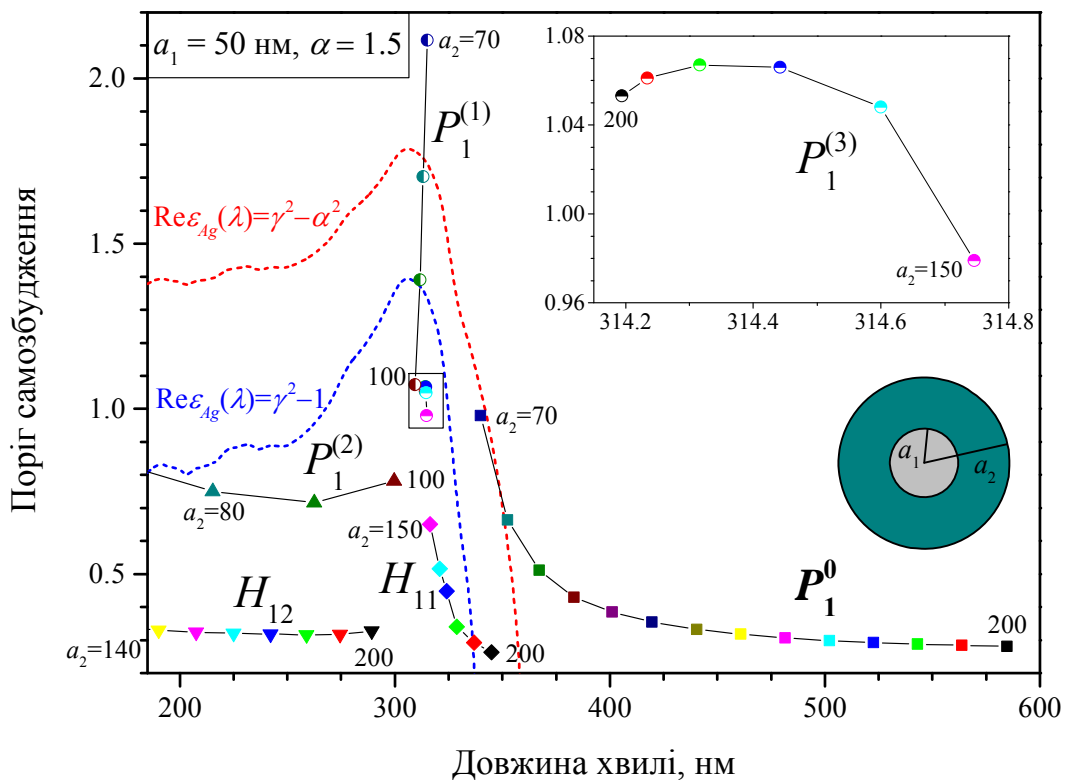


Рис. 4.4. Траєкторії власних значень дипольних ( $m = 1$ ) мод на площині  $(\lambda, \gamma)$  для плазмонного нанолазера на основі срібної нанонитки радіусу  $a = 50$  нм в залежності від товщини активної оболонки (загального радіусу  $a_2$ ), який змінюється з кроком 10 нм.

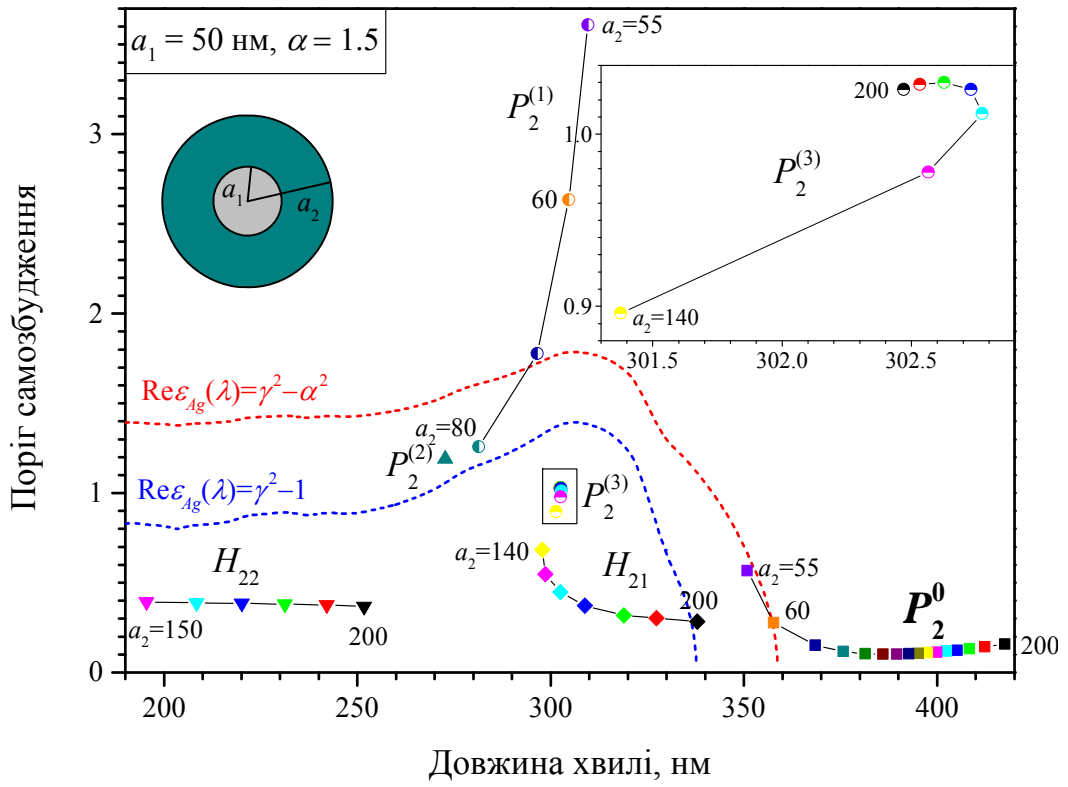


Рис. 4.5. Те ж саме, що й на Рис. 4.4 для квадрупольних ( $m = 2$ ) мод.

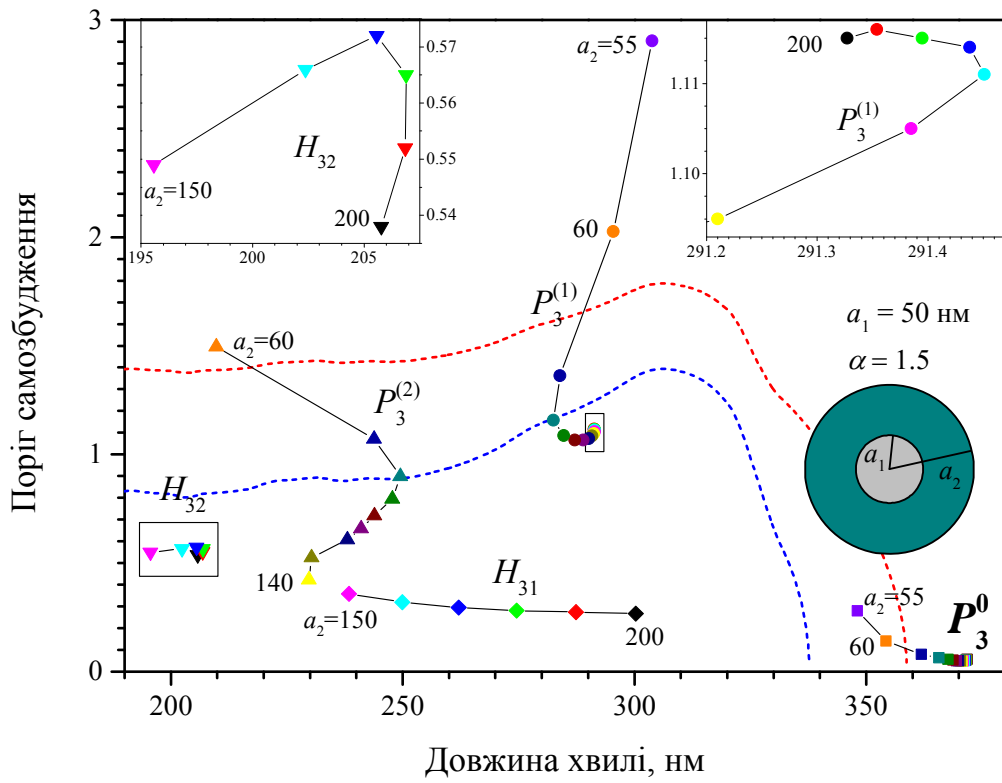


Рис. 4.6. Те ж саме, що й на Рис. 4.4 для гексапольних ( $m = 3$ ) мод.

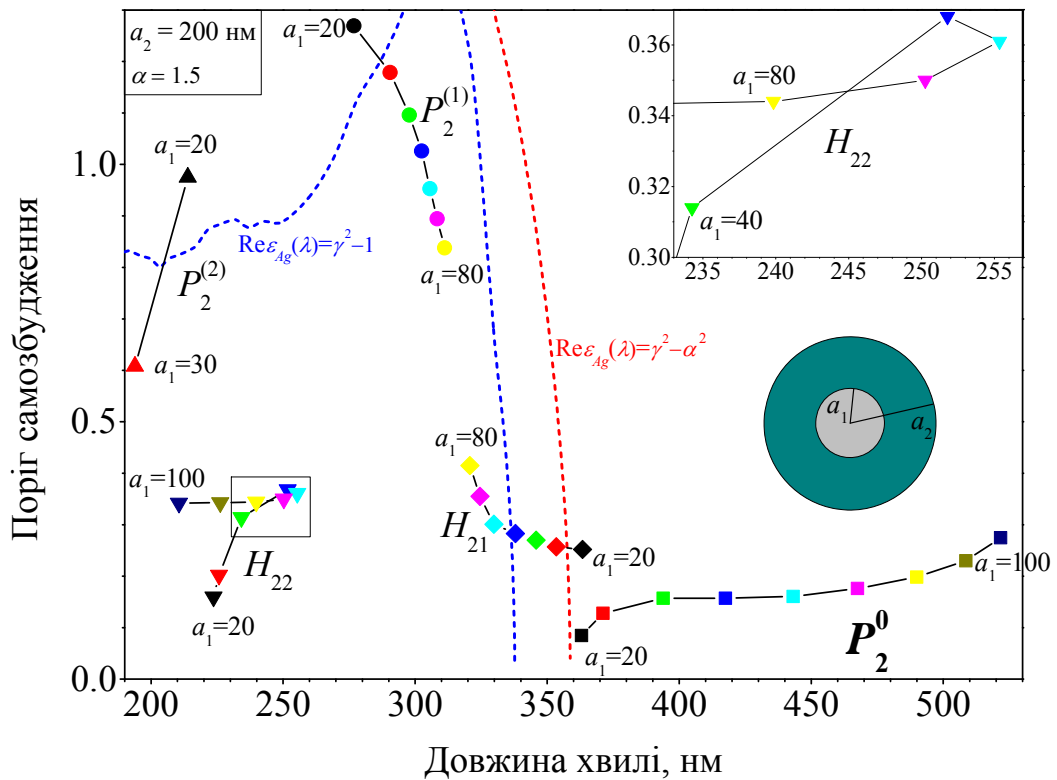


Рис. 4.7. Траєкторії власних значень на площині  $(\lambda, \gamma)$  квадрупольних ( $m = 2$ ) мод плазмонного нанолазера на основі срібної нанонитки при різних її радіусах (від 20 нм до 100 нм з кроком 10 нм), загальний радіус зафіксовано:  $a_2 = 200$  нм.

Основні властивості плазмонних мод зводяться до наступного:

- вони мають відносно низькі пороги самозбудження;
- вони випромінюють на більш довгих довжинах хвиль, ніж побічні плазмонні моди та моди оболонки, завдяки чому не гібридизуються з ними, а також знаходяться поза областю високих втрат у сріблі;
- при малій товщині оболонки вони мають більш високі пороги й знаходяться поблизу довжини хвилі плазмонного резонансу нанонитки в повітрі, а зі збільшенням товщини оболонки зсуваються в бік довших хвиль, їхній поріг зменшується, сягаючи мінімальних значень, що, можливо, також пов'язане з меншими втратами у сріблі на більш довгих хвилях;
- при збільшенні радіусу срібного сердечника їхні довжини хвиль та пороги самозбудження ростуть, хоча й незначно.

Побічні плазмонні моди (на Рис. 4.4-4.7 позначені кругами й трикутниками) мають дуже високі пороги самозбудження ( $\gamma > 0.5$ ), оскільки знаходяться в ультрафіолетовій області, де страти у сріблі високі, тому не цікаві для потенційного використання.

Моди оболонки (на Рис. 4.4-4.7 позначені перевернутими трикутниками й ромбами) виникають тільки в доволі товстих оболонках ( $d \geq 90$  нм), а їхні пороги мають стабільно високі значення в межах  $0.3 \leq \gamma \leq 0.6$ , якщо поблизу них немає плазмонних мод. Ситуації, в яких плазмонна мода та мода оболонки знаходяться близько одна до одної, призводять до гібридизації цих мод, що створює незручності при визначенні типу моди. Незважаючи на те, що на Рис. 4.4-4.7 моди чітко позначені за типами, насправді серед них є багато супермод (тобто, гібридних мод), які демонструють інтенсивні плями поля і на поверхні срібла, і всередині оболонки. Наприклад, на Рис. 4.6 видно, що траєкторія моди оболонки  $H_{31}$  (ромби), нібито є продовженням траєкторії побічних плазмонних мод (трикутники) – при  $a_2 = 150$  нм вже немає цієї побічної плазмонної моди, однак з'являється мода  $H_{31}$  (див. поля цих мод на Рис. 4.9 (e)-(e)). Необхідно зауважити також, що траєкторія моди  $H_{31}$  зсувається вліво приблизно на 50 нм, порівняно з траєкторіями мод  $H_{11}$  и  $H_{21}$ . Повне уявлення про ту чи іншу моду дає її ближнє поле – чим і варто керуватися під час визначення її типу. Ближні поля мод для деяких випадків представлено нижче на Рис. 4.9. Цікава ситуація спостерігається на Рис. 4.7: лінія, яка з'єднує точки мод  $H_{21}$ , описує петлю, при цьому при збільшенні радіусу срібного сердечника поріг і довжина хвилі цих мод ростуть, а потім, з  $a = 60$  нм довжина хвилі починає зменшуватися при стабільних значеннях порогу  $\gamma$  навколо 0.34. Це також пов'язане з гібридизацією мод.

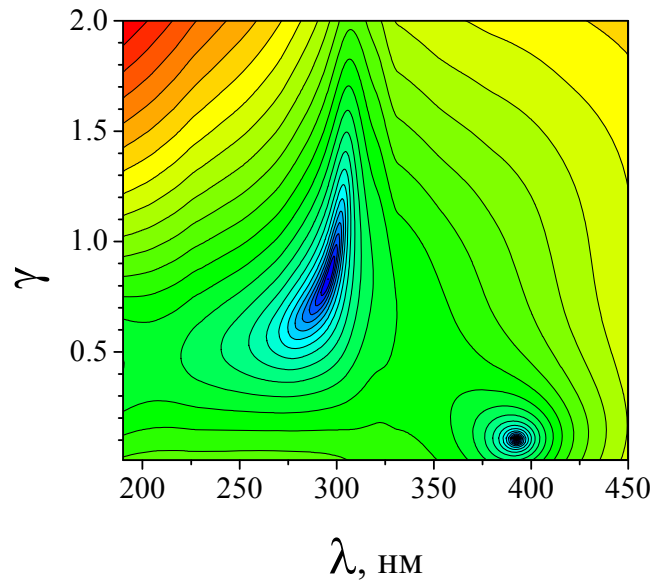


Рис. 4.8. Рельєф функції  $|\det \hat{T}^{wire}(m, \lambda, \gamma)|$  для нанолазера з параметрами:  $m = 2$ ,  $a = 50$  нм,  $a_2 = 120$  нм,  $\alpha = 1.5$ .

Нами було виявлено три побічних плазмонних моди в кожному сімействі по  $m$ . Цікаво те, що так звана перша й третя дипольні та квадрупольні побічні плазмонні моди (позначені напівпрозорими кругами на Рис. 4.4 і 4.5) існують для різних параметрів нанолазерів: перші для менших, з  $a_2 \leq 100$  нм, а другі для більших, з  $a_2 \geq 140$  нм. Їхні траєкторії нібито протилежні, особливо добре це помітно для дипольних мод (Рис. 4.4): при збільшенні товщини оболонки пороги перших побічних плазмонних мод зменшуються, а третіх збільшуються, а їхні довжини хвиль практично не змінюються. Також цікаво, що так звана друга побічна квадрупольна плазмонна мода проявляється тільки для випадку  $a_2 = 80$  нм. Для випадків  $a_2 = 110$  нм,  $120$  нм і  $130$  нм у діапазоні, що досліджується, взагалі зникають всі побічні дипольні й квадрупольні плазмонні моди, а також моди оболонки, й існують тільки основні плазмонні моди. В якості ілюстрації цього на Рис. 4.8 наведено рельєф детермінанту для  $m = 2$  для нанолазера з  $a_2 = 120$  нм. На цьому рельєфі видно велику западину поблизу  $\lambda \approx 300$  нм, однак в ній немає нулів детермінанту, тобто власних значень, а єдине власне

значення знаходиться на  $\lambda = 390$  нм і відповідає плазмонній квадрупольній моді.

На Рис. 4.9 наведено поля деяких з тих мод, що представлені на Рис. 4.4-4.7. Якщо порівняти декілька полів квадрупольних мод оболонки  $H_{22}$ , які позначені на Рис. 4.4-4.7 перегорнутими трикутниками, для нанолазерів з  $a = 30$  нм,  $a_2 = 200$  нм,  $a = 50$  нм,  $a_2 = 200$  нм і  $a = 50$  нм,  $a_2 = 150$  нм, що представлені на Рис. 4.9 (а)-(в), то можна побачити їхні відмінності та можливу трудність їхньої ідентифікації. На Рис. 4.9(а) чітко видно  $H_{22}$  моду, але поля на Рис. 4.9 (б)-(в) демонструють супермоди з яскравими плямами на границі сердечник-оболонка, що є типовим для плазмонних мод. Це означає, що для цих параметрів нанолазера мода оболонки гібридується з плазмонною модою. Але при цьому має сенс називати такі моди модами оболонки, тому що вони знаходяться на траєкторії, де для інших параметрів нанолазера такі  $H_{22}$  моди демонструють поле виключно мод оболонки.

Інша ситуація, коли ідентифікація мод ускладнюється – це близько розташовані моди різних типів. У таких випадках їхні поля стають дуже схожими і, як правило, мають типові для плазмонної моди максимуми на границі сердечник-оболонка. Для прикладу на Рис. 4.9 (г)-(д) представлено такі моди (жовті ромб і круг на Рис. 4.5) для нанолазерів з  $a = 50$  нм,  $a_2 = 140$  нм. Траєкторія з круглими точками відповідає побічній плазмонній моді, а з ромбами – моді оболонки  $H_{21}$ . На Рис. 4.9(г) якраз і представлено поле моди з цієї траєкторії для нанолазера з  $a = 50$  нм,  $a_2 = 170$  нм – та її поле не має ніяких особливостей полів плазмонних мод.

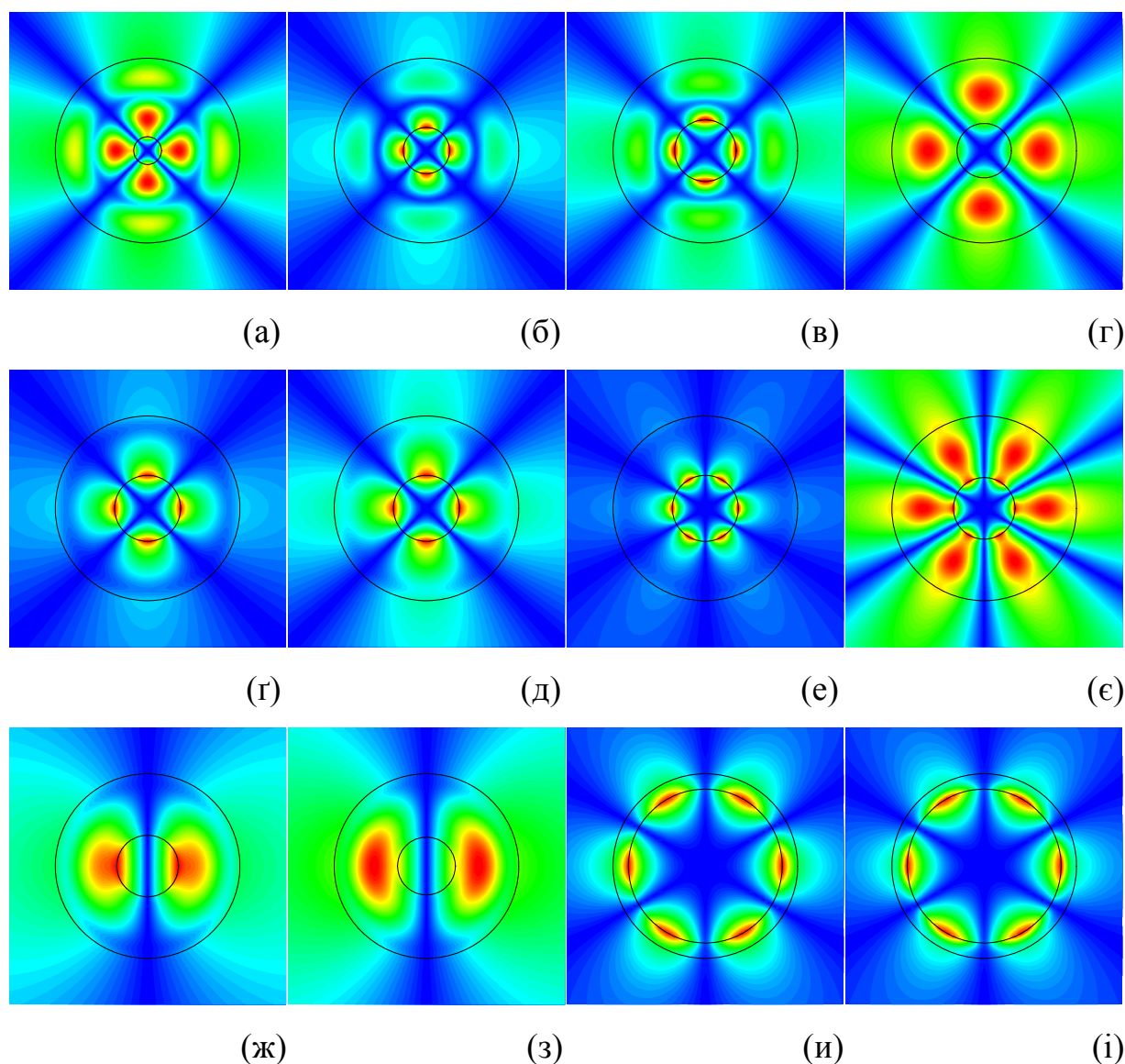


Рис. 4.9. Ближні поля власних мод нанолазера на основі срібної нанонитки з параметрами:

- (a)  $a = 30$  нм,  $a_2 = 200$  нм,  $\lambda = 225.737$  нм,  $\gamma = 0.202$ ;  
 (б)  $a = 50$  нм,  $a_2 = 200$  нм,  $\lambda = 251.777$  нм,  $\gamma = 0.368$ ;  
 (B)  $a = 50$  нм,  $a_2 = 150$  нм,  $\lambda = 195.509$  нм,  $\gamma = 0.393$ ;  
 (Г)  $a = 50$  нм,  $a_2 = 170$  нм,  $\lambda = 280.85$  нм,  $\gamma = 0.372$ ;  
 (Г)  $a = 50$  нм,  $a_2 = 140$  нм,  $\lambda = 301.376$  нм,  $\gamma = 0.896$ ;  
 (Д)  $a = 50$  нм,  $a_2 = 140$  нм,  $\lambda = 297.863$  нм,  $\gamma = 0.685$ ;  
 (e)  $a = 50$  нм,  $a_2 = 140$  нм,  $\lambda = 229.746$  нм,  $\gamma = 0.423$ ;  
 (e)  $a = 50$  нм,  $a_2 = 150$  нм,  $\lambda = 238.382$  нм,  $\gamma = 0.358$ ;  
 (ж)  $a = 50$  нм,  $a_2 = 150$  нм,  $\lambda = 316.332$  нм,  $\gamma = 0.651$ ;  
 (з)  $a = 50$  нм,  $a_2 = 160$  нм,  $\lambda = 320.843$  нм,  $\gamma = 0.516$ ;  
 (и)  $a = 50$  нм,  $a_2 = 60$  нм,  $\lambda = 354.265$  нм,  $\gamma = 0.141$ ;  
 (i)  $a = 50$  нм,  $a_2 = 60$  нм,  $\lambda = 295.426$  нм,  $\gamma = 2.026$ .

На Рис. 4.9 (ж)-(з) наведено поля дипольних мод оболонки  $H_{11}$  для нанолазерів з загальним радіусом  $a_2 = 150$  нм і 160 нм. Видно, що в першому випадку мода є гібридною, тому що максимуми поля присутні також на границі сердечник-оболонка, а у другому випадку вже цілковито знаходяться в оболонці. На Рис. 4.9 (и)-(і) представлено практично ідентичні поля основної  $P_3^0$  та побічної  $P_3^1$  гексапольних плазмонних мод нанолазера з тонкою оболонкою в 10 нм, тільки в одному випадку поріг самозбудження 0.141, а у другому – 2.026, що майже у 15 разів вище.

#### **4.4 Моды нанолазера на основі срібної нанотрубки з активним сердечником та оболонкою**

Металеві нанотрубки, на відміну від нанониток, крім зовнішньої границі мають також внутрішню, яка також може підтримувати власні поверхневі плазмонні моди. Наприклад, це було показано в роботах [7, 23], де були розглянуті власні моди срібних нанотрубок. Також там було показано, що для тонких трубок, товщина яких порівнянна з товщиною скін-шару в оптичному діапазоні (близько 10 нм), моди зовнішньої та внутрішньої границь гібридизуються та, в залежності від їхньої синфазності або протифазності, представляють з себе супермоди з максимумами поля біля обох границь і нульовими або ж ненульовими значеннями поля всередині шару срібла. В цьому підрозділі досліджуються частоти та пороги самозбудження, а також поля власних мод нанолазерів на основі срібних нанотрубок з тонкою активною оболонкою й активним сердечником. В якості активного матеріалу, як і під час моделювання нанолазерів на основі нанониток, розглядається немагнітний матеріал з  $\varepsilon = 2.25$  (показник заломлення  $\alpha = 1.5$ ).



Як було продемонстровано у попередньому підрозділі, оболонки товщиною від половини довжини хвилі в матеріалі й вище можуть підтримувати власні моди в оптичному діапазоні довжин хвиль. У цих мод, як правило, пороги самозбудження вищі, ніж в основних плазмонних мод, тому в цьому підрозділі розглядаються наноласери з достатньо тонкими оболонками товщиною у 10 нм, для того, щоб виключити появу мод оболонки в оптичному діапазоні. Крім того, у попередньому підрозділі було показано існування побічних плазмонних мод з великими порогами самозбудження, однак вони не представляють практичного інтересу, й тому в подальшому нами розглядатися не будуть. Зупинімося на згаданих вище гібридних  $P_m^-$  (поле між границями нанотрубки близько до нуля) і  $P_m^+$  плазмонних модах наноласера на основі тонкої нанотрубки, а також  $P_m^{in}$  і  $P_m^{out}$  плазмонних модах на внутрішній та зовнішній границях товстих нанотрубок, відповідно.

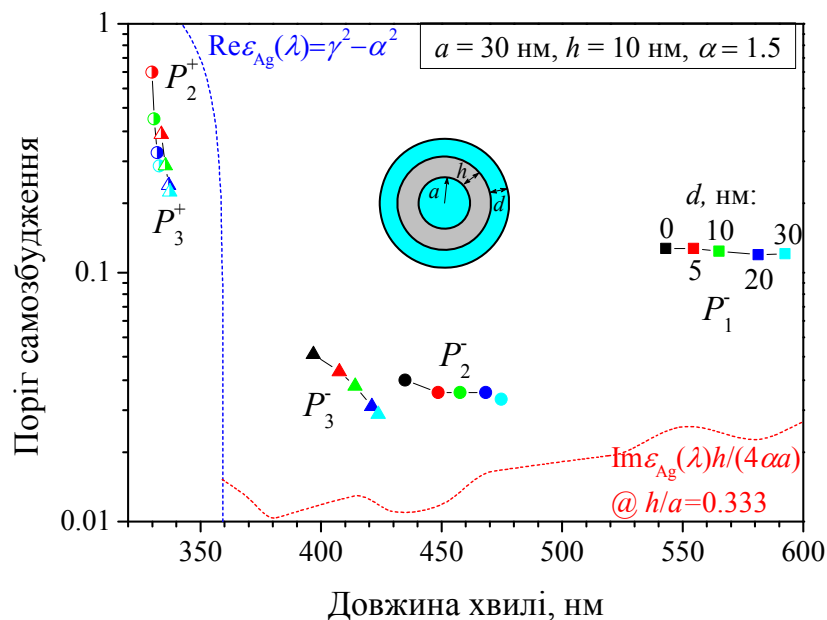


Рис. 4.10. Траєкторії власних значень (порогів самозбудження та довжин хвиль) лазерних мод на площині  $(\lambda, \gamma)$  для лазера на основі нанотрубки при зміні товщини оболонки, радіуси поверхонь трубки незмінні.

На Рис. 4.10-4.12 представлено траєкторії власних значень основних плазмонних мод на площині  $\lambda$  і  $\gamma$  нанолазерів на основі срібних нанотрубок для декількох азимутальних індексів,  $m = 1, 2, 3$  та 10. Вони демонструють як змінюється поріг самозбудження та довжина хвилі випромінювання моди, якщо варіюється один з геометричних параметрів нанолазера:  $h$ ,  $d$  або  $a$ . Як і на Рис. 4.5, форма точки відповідає значенню  $m$ , колір – значенню параметра, який змінюється. Для  $P_m^+$  мод точки напівзафарбовані, а для  $P_m^-$  мод – повністю зафарбовані.

На Рис. 4.10 наведено траєкторії власних значень для мод з  $m = 1, 2$  і 3 для лазера на основі нанотрубки з  $a = 30$  нм,  $h = 10$  нм та товщиною активної оболонки  $d$ , яка змінюється від 0 до 30 нм. Як видно, у діапазоні, що досліджується, відсутні дипольні  $P_1^+$  моди – вони зсунуті в дальній ультрафіолет. Збільшення товщини оболонки призводить до зсування довжин хвиль мод у червону сторону й незначному зменшенню їхніх порогів самозбудження. Це можна пояснити тим, що активний матеріал є оптично щільнішим за вільний простір. Пороги самозбудження для всіх плазмонних

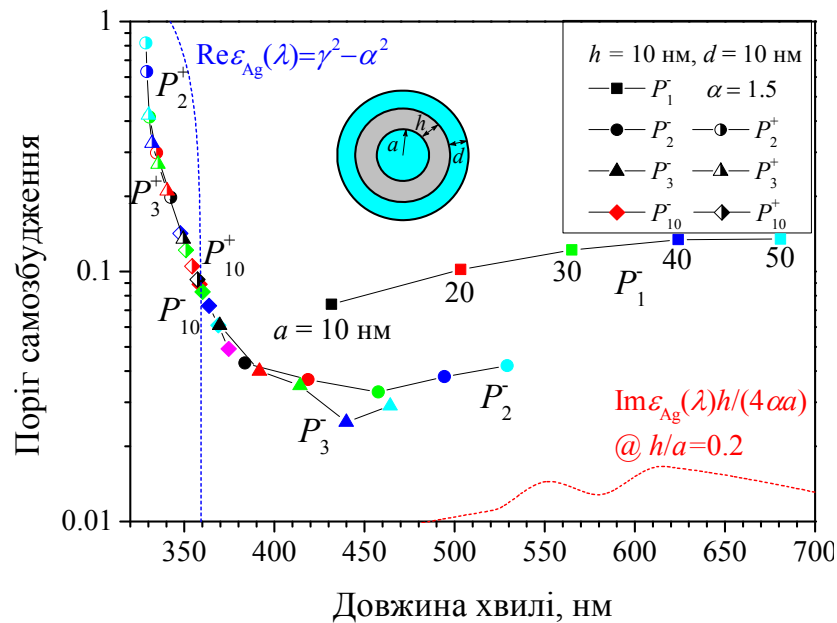


Рис. 4.11. Траєкторії власних значень лазерних мод для лазера на основі нанотрубки при зміні внутрішнього радіусу трубки, при цьому її товщина й товщина оболонки незмінні.

мод по порядку величини дорівнюють  $O(-\text{Re}v_{Ag} / \text{Im}v_{Ag})$ , оскільки у плазмонних нанолазерах втрати у сріблі завжди домінують над втратами на випромінювання. Тому подальше збільшення товщини оболонки не призводить до істотного зниження порогів, але веде до зсуву основних плазмонних мод із видимої частини спектру до інфрачервоної. Найбільш чутливі до такого роду змін гібридні дипольні моди  $P_1^-$ . Виходячи зі сказаного вище, під час подальшого моделювання таких нанолазерів найбільш резонно розглядати  $d = 10$  нм, як оптимальну товщину активної оболонки.

На Рис. 4.11 наведено траєкторії руху власних значень для плазмонних мод нанотрубки для  $m = 1, 2, 3$  та  $10$  при радіусі сердечника  $a$ , що змінюється від 10 нм до 50 нм (з кроком 10 нм) та фіксованими  $h = d = 10$  нм. Добре видно, що для маленьких нанолазерів моди  $P_m^+$  і  $P_m^-$  знаходяться близько одна до одної, а при збільшенні розмірів нанолазера їхні траєкторії рухаються в протилежних напрямках, причому в  $P_m^+$  мод, довжини хвиль випромінювання яких знаходяться в області високих втрат у сріблі, значно

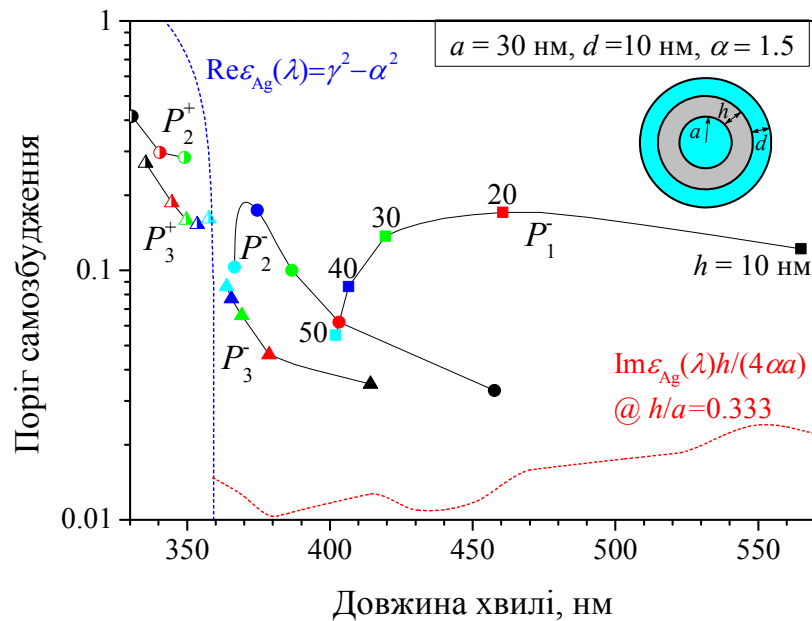


Рис. 4.12. Траєкторії власних значень лазерних мод для лазера на основі нанотрубки при зміні товщини трубки, при цьому її внутрішній радіус і товщина оболонки незмінні.

зростає поріг, сягаючи значення 0.82 при  $a = 30$  нм. Пороги мод  $P_m^-$  демонструють стабільність і мають менші значення, причому мінімальне значення  $\gamma$  має гексапольна мода  $P_3^-$  в нанолазера з  $a = 40$  нм (синій трикутник на Рис. 4.8(б)):  $\gamma = 0.025$ ,  $\lambda = 439.889$  нм.

На Рис. 4.12 представлено траєкторії власних значень плазмонних мод нанолазерів з різною товщиною срібної нанотрубки  $h$  від 10 нм до 50 нм (точки нанесено з кроком 10 нм, але лінії траєкторій розраховані з меншим кроком, для забезпечення їхньої гладкості), при цьому  $a = 30$  нм,  $d = 10$  нм. Збільшення товщини нанотрубки руйнує гібридизацію мод, й замість гібридних мод  $P_m^+$  і  $P_m^-$  спостерігаються моди з максимумами поля лише біля зовнішньої ( $P_m^{out}$ ) та лише біля внутрішньої ( $P_m^{in}$ ) границь трубки. Необхідно зауважити, що в оптичному діапазоні довжин хвиль, який ми досліджуємо, присутні лише дипольна  $P_1^{in}$  мода, її довжина хвилі сильно залежить від товщини нанотрубки (при  $h = 10$  нм для гібридної моди  $P_1^-$ :  $\lambda = 565.031$  нм,  $\gamma = 0.122$ , при  $h = 50$  нм:  $\lambda = 401.997$  нм,  $\gamma = 0.055$ ), а поріг самозбудження при руйнуванні гібридизації при товщині трубки  $h = 20$  нм дещо зростає до  $\gamma = 0.171$ , а потім при подальшому її збільшенні зменшується. Довжини хвиль квадрупольних і гексапольних мод внутрішньої границі також зсуваються в синю частину спектру при зростанні товщини трубки. Траєкторії ж мод  $P_m^{out}$  по довжинам хвиль спрямовані назустріч модам  $P_m^{in}$ , але діапазон їхнього змінювання набагато вужчий: від 320 нм до 370 нм. Що до порогів самозбудження цих мод, то вони змінюються різноспрямовано. Поріг самозбудження  $P_3^{in}$  мод зростає зі збільшенням  $h$ , а  $P_2^{in}$  – сягає максимального значення при  $h$  трохи більшому за 40 нм, а потім зменшується. В мод  $P_2^{out}$  і  $P_3^{out}$  поріг самозбудження зменшується зі зростом  $h$  та сягає мінімальних значень при  $h = 40$  нм і 30 нм, відповідно.

Підсумовуючи аналіз траєкторій власних значень, необхідно сказати, що найпривабливішими у практичному застосуванні плазмонними модами нанолазера на основі срібної нанотрубки є дипольні гібридні моди  $P_1^-$ , оскільки вони мають відносно низькі пороги (близько 0.1) й випромінюють у видимій частині спектра.

На Рис. 4.13 представлені поля деяких власних мод  $P^-$ ,  $P^+$  і  $P^{in}$ ,  $P^{out}$  різних азимутальних індексів ( $m = 1, 2, 3$  та 10) для нанолазерів на основі

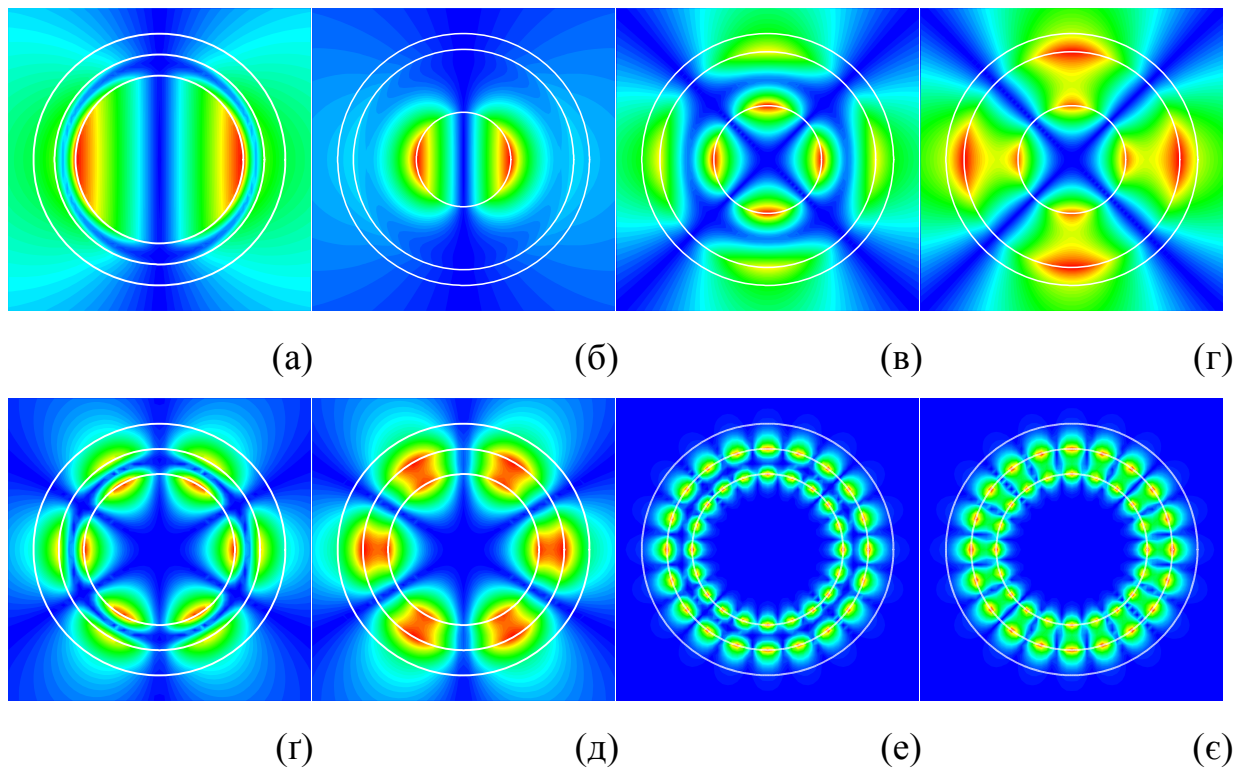


Рис. 4.13. Близні поля власних мод нанолазера на основі срібної нанотрубки з параметрами ( $d = 10$  нм):

- (а)  $P_1^-$ ,  $a = 40$  нм,  $h = 10$  нм,  $\lambda = 624.124$  нм,  $\gamma = 0.134$ ;
- (б)  $P_1^{in}$ ,  $a = 30$  нм,  $h = 40$  нм,  $\lambda = 406.587$  нм,  $\gamma = 0.086$ ;
- (в)  $P_2^{in}$ ,  $a = 30$  нм,  $h = 30$  нм,  $\lambda = 386.768$  нм,  $\gamma = 0.1$ ;
- (г)  $P_2^{out}$ ,  $a = 30$  нм,  $h = 30$  нм,  $\lambda = 349.074$  нм,  $\gamma = 0.283$ ;
- (г)-(є)  $a = 30$  нм,  $h = 10$  нм,
- (г)  $P_3^-$ ,  $\lambda = 414.238$  нм,  $\gamma = 0.035$ ;
- (д)  $P_3^+$ ,  $\lambda = 335.46$  нм,  $\gamma = 0.269$ ;
- (е)  $P_{10}^-$ ,  $\lambda = 363.737$  нм,  $\gamma = 0.073$ ;
- (є)  $P_{10}^+$ ,  $\lambda = 354.361$  нм,  $\gamma = 0.105$ .

срібних нанотрубок різноманітних геометричних розмірів. Всі ці моди було представлено на траєкторіях на Рис. 4.10-4.12. На портретах полів добре помітні особливості мод, про які йшла мова вище, та які вказують на тип моди: це нуль поля або його відсутність посередині стінки нанотрубки, а також максимуми поля біля зовнішньої та/або внутрішньої границь нанотрубки; число варіацій поля вздовж азимуту, яке дорівнює подвійному азимутальному індексу ( $2m$ ).

#### 4.5 Постановка задачі та основні рівняння для скінченної решітки з нанониток з активними оболонками

Наявність високочастотних граткових резонансів при розсіянні світла періодичними структурами з діелектричних і срібних нанониток, що було досліджено в розділі 2, передбачає наявність мод з низькими порогами самозбудження у відповідних лазерних задачах на власні значення. Нижче буде розглянуто ЛЗВЗ для нанолазерів на основі решіток з таких нанониток з активною оболонкою у кожній нитки.

Розглянемо лінійну решітку з  $M$  квантових ниток (тобто однорідних активних діелектричних нанониток) з комплексним показником заломлення  $\nu = \alpha - i\gamma$ , а також лінійну решітку з  $M$  срібних нанониток з показником заломлення  $\nu_{Ag}(\lambda)$ , які вкриті активною діелектричною оболонкою (з  $\nu = \alpha - i\gamma$ ). Схематично остання представлена на Рис. 4.14. Як видно, всі позначення параметрів решітки лишилися такими ж самими, але центр ГСК,

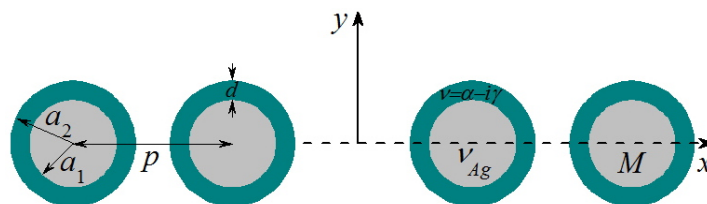


Рис. 4.14. Поперечний переріз решітки з  $M$  срібних нанониток з активними оболонками.

для зручності розділення на типи симетрії, розташовано у центрі решітки між нитками, тому ми будемо розглядати решітки з парною кількістю ниток  $M$ .

Щоб мати моди вість порівнювати пороги самозбудження плазмонних і граткових мод, будемо розглядати випадок Н-поляризації. Розкладання в ряди полів усередині й ззовні ниток, а також схема виведення СР для знаходження невідомих коефіцієнтів розкладання поля для решітки одношарових ниток, такі ж самі, як і ті, що були наведені в підрозділі 2.1. З них необхідно лише виключити падаюче поле. В результаті отримуємо однорідне блочне матричне рівняння Фредгольма 2-го роду,

$$X + AX = 0, \quad (4.7)$$

де для решітки з квантових ниток справедливі рівняння (2.22)-(2.24) для  $X$  й  $A$  (або  $B = 0$ ).

Для решітки зі срібних ниток, які вкриті активною оболонкою, внаслідок наявності другої границі з'являється ще пара невідомих коефіцієнтів  $v_n^{(q)}$  та  $w_n^{(q)}$  ( $q = 1, \dots, M$ ) для розкладання поля всередині оболонки  $j$ -ї нитки. Таким чином, маємо ще  $M$  пар рівнянь ГУ на внутрішній границі кожної нитки,

$$\begin{cases} \sum_{n=-\infty}^{\infty} y_n^{(q)} J_n(v_{Ag} ka_1) e^{in\varphi_q} - \sum_{n=-\infty}^{\infty} v_n^{(q)} J_n(vka_1) e^{in\varphi_q} - \sum_{n=-\infty}^{\infty} w_n^{(q)} H_n(vka_1) e^{in\varphi_q} = 0, \\ \frac{1}{v_{Ag}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} y_n^{(q)} J'_n(v_{Ag} ka_1) e^{in\varphi_q} - \frac{1}{v} \sum_{n=-\infty}^{\infty} v_n^{(q)} J'_n(vka_1) e^{in\varphi_q} - \frac{1}{v} \sum_{n=-\infty}^{\infty} w_n^{(q)} H'_n(vka_1) e^{in\varphi_q} = 0. \end{cases} \quad (4.8)$$

Виразимо  $w_n^{(q)}$  через  $v_n^{(q)}$ ,

$$w_n^{(q)} = v_n^{(q)} S_n / P_n, \quad (4.9)$$

$$S_n = J_n(vka_1) J'_n(v_{Ag} ka_1) - \frac{v_{Ag}}{v} J'_n(vka_1) J_n(v_{Ag} ka_1), \quad (4.10)$$

$$P_n = \frac{v_{Ag}}{v} H'_n(vka_1) J_n(v_{Ag}ka_1) - H_n(vka_1) J'_n(v_{Ag}ka_1). \quad (4.11)$$

Далі, шляхом перетворень, що аналогічні тим, які були проведені для решітки з одношарових ниток, та зробивши заміну,

$$x_m^{(q)} = v_m^{(q)} F_m^* J_m(ka_2), \quad (4.12)$$

приходимо до рівняння (4.7) де

$$X = \{X^{(q)}\}_{q=1}^M, X^{(q)} = \{x_m^{(q)}\}_{m=-\infty}^{+\infty}, A = \{A^{(q,j)}\}_{q,j=1}^M, A^{(q,j)} = \{A_{m,n}^{(q,j)}\}_{m,n=-\infty}^{+\infty}, \quad (4.13)$$

$$A_{m,n}^{(q,j)} = \frac{H_{n-m}(kd_{jq}) V_m^*(ka_1, ka_2, v_{Ag}, v) J_n(ka_2)}{F_m^*(ka_1, ka_2, v_{Ag}, v) J_m(ka_2)} e^{i(m-n)\psi_{jq}}, \quad (4.14)$$

$$V_m^* = \frac{S_m}{P_m} H_m(vka_2) J'_m(ka_2) + J_m(vka_2) J'_m(ka_2) - \\ - \frac{S_m}{vP_m} H'_m(vka_2) J_m(ka_2) - \frac{1}{v} J'_m(vka_2) J_m(ka_2), \quad (4.15)$$

$$F_m^* = \frac{S_m}{P_m} H_m(vka_2) H'_m(ka_2) + J_m(vka_2) H'_m(ka_2) - \\ - \frac{S_m}{vP_m} H'_m(vka_2) H_m(ka_2) - \frac{1}{v} J'_m(vka_2) H_m(ka_2), \quad (4.16)$$

Таким чином, після усічення кожного блоку рівняння (4.7) до скінченного числа  $N$ , та збільшуючи  $N$ , можна відшукати всі невідомі коефіцієнти розкладання полів з заданою точністю. Необхідно відмітити, що через те, що рівняння (4.7) однорідне, для його перетворення у відповідне неоднорідне, яке необхідне для відшукування власного вектору матриці, в якості правої частини необхідно вибрати стовпець, в якому знаходиться діагональний елемент матриці  $A$  з максимальним додатковим мінором. Тому



розв'язання (4.7) займає більше часу, ніж розв'язання (2.21) для задачі розсіяння на такий самій решітці з нанониток.

При дослідженні ЛЗВЗ, перш за все, необхідно знайти її власні значення – пари чисел  $(\lambda, \gamma)$ , тобто довжини хвиль і величини порогів самозбудження лазерних мод. Через те, що (4.7) є матричним рівнянням Фредгольма 2-го роду, цього достатньо для того, щоб його визначник існував як функція параметрів задачі. Таким чином, ЛЗВЗ зводиться до відшукування коренів нескінченного детермінантного рівняння,

$$\det \left\{ \delta_{mn} + A_{m,n}^{(q,j)}(\lambda, \gamma) \right\}_{\substack{m,n=-\infty \\ q,j=1}}^{\infty, M} = 0. \quad (4.17)$$

Корені (4.17) можна шукати різними числовими методами. Ми використовуємо метод січних. Необхідно зауважити, що при цьому важливу роль відіграє близькість початкового наближення до значення шуканого кореня. Також для більш ефективного чисельного розв'язання (4.17) можна зменшити матрицю завдяки наявності ліній симетрії в решітці з нанониток. Якщо центр ГСК розташований у центрі решітки, як на Рис. 4.10, цими лініями симетрії є координатні вісі  $x$  та  $y$ . Використаймо властивості симетрії й антисиметрії функції поля відносно вісі  $x$ . Тоді для  $x$ -парних мод,

$$x_m^{(q)} = x_{-m}^{(q)}, \quad (4.18)$$

$$A_{m,n}^{(q,j)} = \left\{ A_{m,n}^{(q,j)} \right\}_{m,n=0}^{\infty}, \mu_0 = 1/2, \mu_{m>0} = 1, \\ A_{m,n}^{(q,j)} = \mu_m \frac{V_m J_n(ka_2)}{F_m J_m(ka_2)} \cos((m-n)\psi_{jq}) \left[ (-1)^m H_{n+m}(kd_{jq}) + H_{n-m}(kd_{jq}) \right], \quad (4.19)$$

і для  $x$ -непарних мод,

$$x_m^{(q)} = -x_{-m}^{(q)}, \quad (4.20)$$

$$A^{(q,j)} = \{A_{m,n}^{(q,j)}\}_{m,n=1}^{\infty},$$

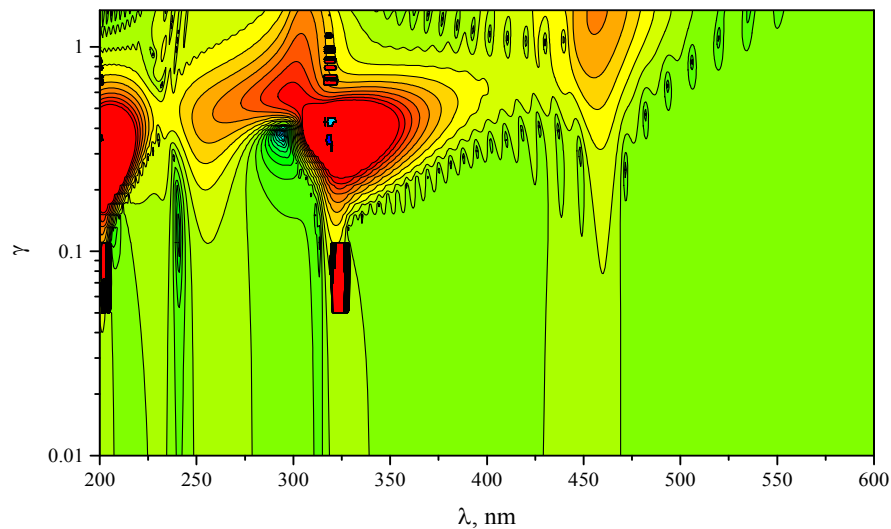
$$A_{m,n}^{(q,j)} = \frac{V_m J_n(ka_2)}{F_m J_m(ka_2)} \cos((m-n)\psi_{jq}) \left[ (-1)^{m+1} H_{n+m}(kd_{jq}) + H_{n-m}(kd_{jq}) \right]. \quad (4.20)$$

#### 4.6 Моді лазера на основі скінченної решітки з квантових нанониток

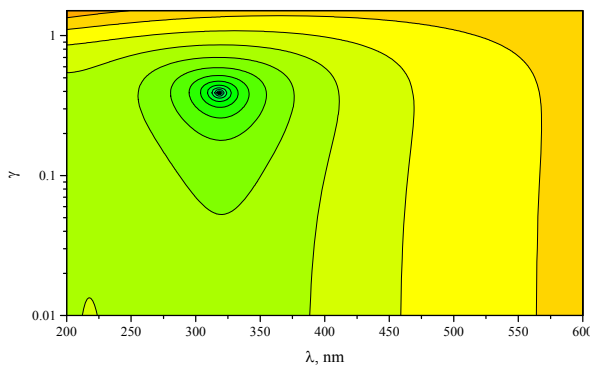
Аналіз мод лінійної решітки з активних діелектричних нанониток почнемо з вибору діапазонів, в яких змінюються параметри такої решітки. Це радіус нитки  $a$ , період  $p$ , кількість ниток у решітці  $M$ , а також дійсна частина показника заломлення матеріалу нитки  $\alpha$ . В даній дисертаційній роботі досліджуються моди субхвильових ниток у світловому діапазоні, тобто в діапазоні довжин хвиль від 200 до 700 нм. Вважатимемо, що радіус ниток не перевищує 100 нм та, окрім того, ці решітки є розрідженими, що дозволяє вибрати менший порядок редукції блоків матриці та, відповідно, розглядати решітки з більшим  $M$ , а також виключає ефекти від взаємодії сусідніх ниток.

Так само, як і при знаходженні мод нанолазерів, які складаються з однієї нитки, для визначення початкових наближень  $\lambda$  і  $\gamma$ , зручно будувати рельєфи модулю детермінанта характеристичного рівняння. На Рис. 4.15(а) представлено такий рельєф для решітки з двадцяти нанониток радіусу 60 нм з показником заломлення  $\alpha = 2$ , що розташовані з періодом 450 нм. Червоному кольору відповідають найбільші значення детермінанту, а синьому – найнижчі. На рельєфі видно багато проколів, де значення детермінанту близьке до нуля – координати цих точок на площині  $(\lambda, \gamma)$  й слід обирати в якості початкових наближень. Також на рельєфі є дві великих червоних області високих значень детермінанту з проколами в їхніх центрах – це області навколо мод однієї нитки. Це підтверджується рельєфами, що представлені на Рис. 4.15 (б)-(в). На них представлено рельєфи детермінанту для нанолазера з однієї нитки для  $m = 0$  та 1, на яких видно ці моди  $H_{01}$  та  $H_{11}$ , відповідно.

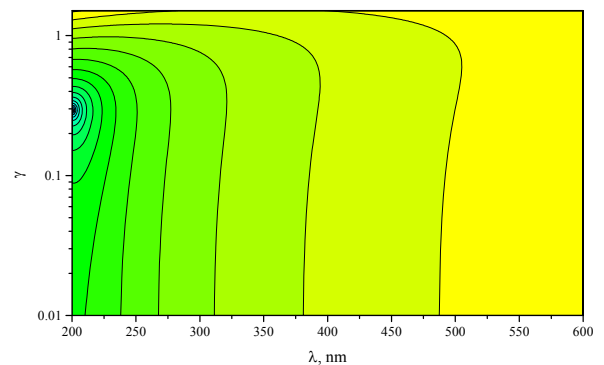
Аналіз ближніх полів мод таких решіток продемонстрував їхню складну будову. Звісно, найбільший інтерес представляють моди с низьким порогом самозбудження, але, як видно з Рис. 4.15 (а), для розглянутих решіток він рідко опускається нижче значення 0.1. Нами було встановлено, що серії власних значень, які на рельєфі розташовані під червоними зонами, пов'язані з модами  $H_{01}$  та  $H_{11}$  однієї нитки, але проявляються не на всіх нитках решітки одночасно, тому стається їхнє розщеплення на велику кількість гібридних мод (тим більшу, чим більша  $M$ ). При цьому в полі кожної моди світяться не всі нитки, а поруч одна з одною на площині  $(\lambda, \gamma)$



(a)



(б)



(в)

Рис. 4.15. Рельєф абсолютного значення детермінанта (4.17) на площині  $(\lambda, \gamma)$  для решітки з  $M = 20$  нанониток з параметрами  $a = 60$  нм,  $p = 450$  нм,  $\alpha = 2$  (а), а також те саме для одиночної нитки для  $m = 0$  (б) і  $m = 1$  (в).

знаходяться моди, поля яких парні та непарні відносно вісі  $y$ . Тому для ідентифікації моди важливо будувати ближнє поле всієї решітки, але це може бути важко зробити при великих  $M$ . На Рис. 4.16 для ілюстрації представлено поля декількох таких мод.

Як було показано у розділі 2, решітки з діелектричних нанониток демонструють високо добротні граткові резонанси при розсіянні світла. Такі резонанси повинні підтверджуватися наявністю відповідних граткових мод з низькими порогами самозбудження. Для решіток с великим  $M$  ці моди не завжди добре видно на рельєфі детермінанта, тому в якості початкових наближень для  $\lambda$  має сенс брати довжину хвилі граткового резонансу для

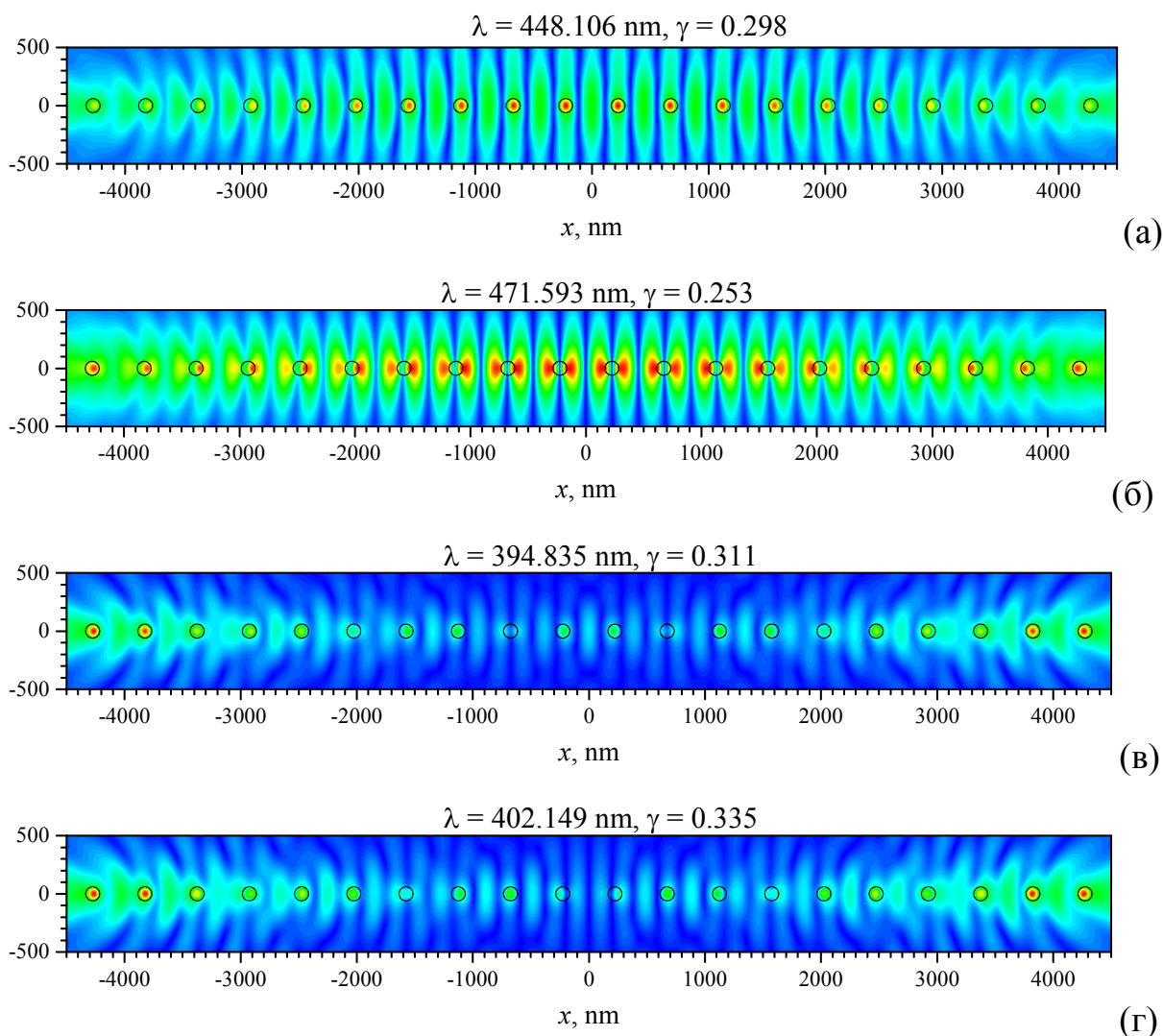


Рис. 4.16. Ближні поля деяких власних мод решітки з Рис. 4.15, (а), (в) – функція поля парна, (б), (г) – непарна відносно вісі  $y$ .

відповідної задачі розсіяння. Під час наших досліджень було встановлено, що для решіток з  $M \geq 50$  це правило підтверджується з точністю декількох сотих нанометру. Початкове наближення для  $\gamma$  необхідно вибирати у вигляді довільного числа  $\leq 0.1$ .

На Рис. 4.17 представлено графіки залежності нормованого ППР від довжини хвилі для решітки з таких самих ниток, що й на Рис. 4.15-4.16, для  $M = 20$  і  $50$ , для випадку нормального падіння плоскої хвилі. З цих графіків видно, що для решітки з 20 ниток ґратковий резонанс має низьку добротність. Це корелює з тим, що на довжині хвилі цього резонансу нам не вдається знайти відповідне власне значення у ЛЗВЗ. Разом з ти, для даної решітки основною ґратковою модою є мода з  $\lambda = 448.1$  нм, що трохи менше значення періоду, і  $\gamma = 0.298$ , поле якої наведено на Рис. 4.16(а). Для решітки з  $M = 50$  ниток основна ґраткові мода знаходиться на  $\lambda = 453.5$  нм і має майже у п'ять разів нижчий поріг самозбудження  $\gamma = 0.062$ . Зауважимо, що основною ґратковою модою завжди є мода, поле якої – це функція, парна відносно  $x$  і  $y$ .

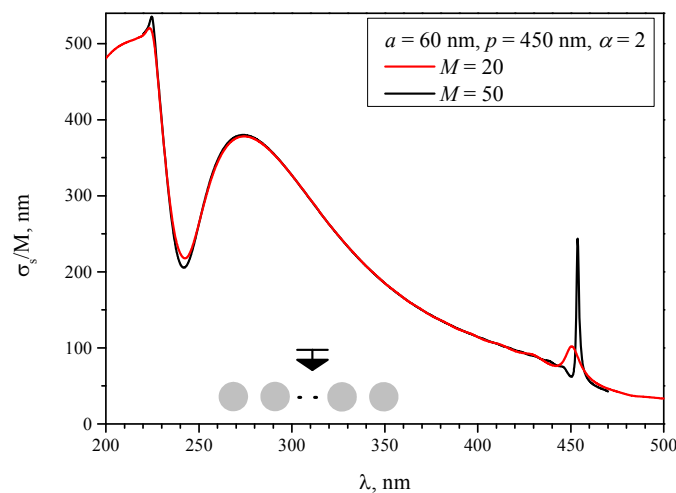
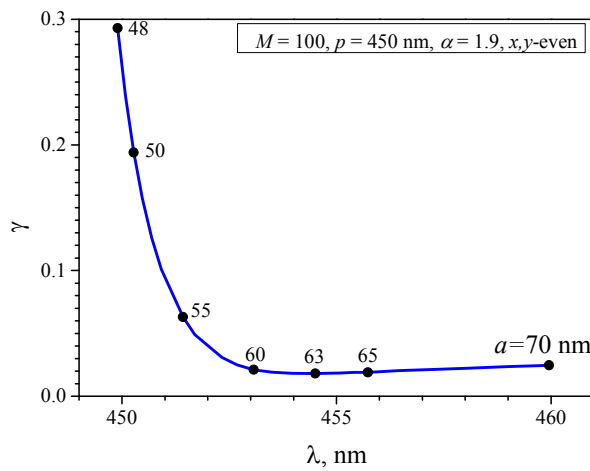
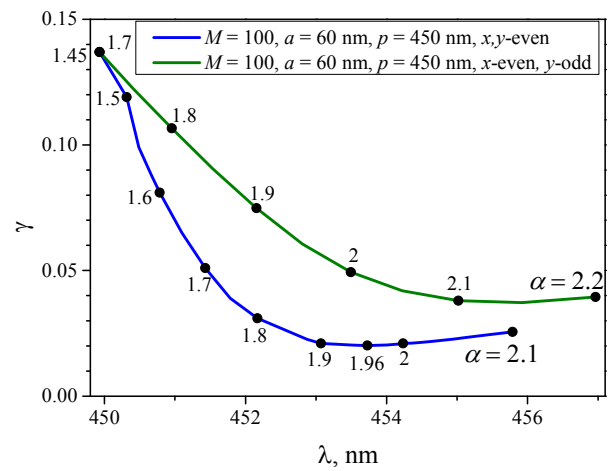


Рис. 4.17. Нормоване ППР як функція довжини хвилі при розсіянні нормально падаючої плоскої Н-поляризованої хвилі на решітки з різної кількості нанониток, таких самих як на Рис. 4.15-4.16 за відсутності накачки ( $\gamma = 0$ ).

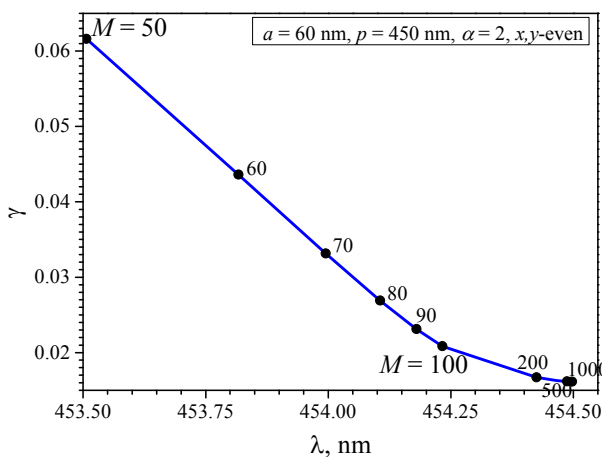
Таким чином, беручи в якості початкового наближення  $\lambda$  довжину хвилі відповідного ґраткового резонансу в задачі розсіяння, а далі, при розрахунку залежності власного значення від параметрів решітки, беручи в якості початкового наближення значення  $\lambda$  та  $\gamma$  для попереднього значення параметра, можна побудувати траєкторії руху лазерних мод на площині  $(\lambda, \gamma)$ . На Рис. 4.18 представлено такі траєкторії для змінного радіусу квантових ниток (Рис. 4.18(а)), показника заломлення матеріалу ниток (Рис. 4.18(б)), та кількості ниток (Рис. 4.18(в)-(г)). Також на Рис. 4.18 (б) і (г) нанесено траєкторії для мод класу *y-непарні*, що демонструє їхню наявність і



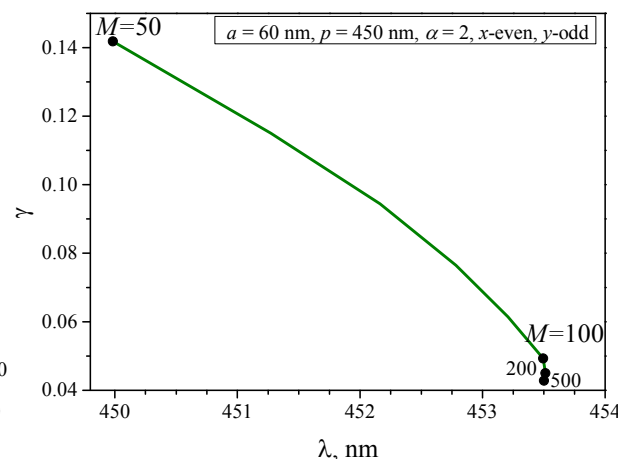
(а)



(б)



(в)



(г)

Рис. 4.18. Траєкторії ґраткових мод решіток з квантових нанониток при зміні одного з параметрів решітки: (а) – радіусу нитки  $a$ , (б) – показника заломлення матеріалу нитки  $\alpha$ , (в)-(г) – кількості ниток  $M$ .

близькість розташування на площині  $(\lambda, \gamma)$  до відповідних лазерних мод класу *y-парні*, функція поля яких симетрична відносно вісі *y*.

Як видно з траєкторій лазерних мод, що представлені на Рис. 4.18, при збільшенні кожного параметру довжина хвилі моди також збільшується. Щодо порогів самозбудження, то при збільшенні  $a$  або  $\alpha$ , а значить віддаленні  $\lambda$  від значення періоду ( $p = 450$  нм), значення  $\gamma$  спочатку доволі різко знижуються, але далі починають збільшуватися. Найнижчий поріг самозбудження, який дорівнює  $\gamma = 0.018$ , основної ґраткової моди при змінному  $a$  має решітка з квантових нанониток з  $a = 63$  нм, а при змінному  $\alpha$  – решітка з квантових нанониток з  $\alpha = 1.96$ :  $\gamma = 0.02$ . Найбільш очевидними є траєкторії мод при збільшенні  $M$ . Пороги самозбудження основних ґраткових мод таких решіток зменшуються з ростом  $M$ , а їхні довжини хвиль також збільшуються, але зовсім незначним чином ( $\Delta\lambda \approx 1$  нм при  $M$  від 50 до 1000). Нам вдалося знайти основну ґраткову моду для лінійної решітки з 1000 квантових нанониток. Слід сказати, що її поріг самозбудження ( $\gamma = 0.0161$ ) лише трохи нижчий за поріг для решітки зі 100 ( $\gamma = 0.0208$ ) або 200 ниток ( $\gamma = 0.0167$ ). Звісно, досліджені решітки мають багато параметрів, що спроможні впливати на величину порогів самозбудження лазерних мод, і неможна стверджувати, що траєкторії цих мод при інших фіксованих значеннях параметрів решіток з субхвильових квантових ниток будуть повторювати ті, що представлені на Рис. 4.18, але основні тенденції, безсумнівно, збережуться.

#### **4.7 Моди лазера на основі решітки зі срібних нанониток з активною оболонкою**

Наше дослідження плазмонних мод нанолазера на основі одиночної срібної нанонитки показало, що основні плазмоні моди таких нанолазерів мають високі пороги самозбудження  $\gamma > 0.1$ , у той час як пороги

самозбудження основних ґраткових мод решіток зі 100 діелектричних нанониток такого ж радіусу можуть бути меншими 0.02, що як мінімум у 5 разів менше. Тому в цьому підрозділі ми представимо результати дослідження лазерних мод решіток зі срібних ниток з активною оболонкою.

Так само як і для випадку решітки з квантових ниток, в якості початкових наближень для значень довжин хвиль ґраткових мод ми беремо довжину хвилі ґраткового резонансу у відповідній задачі розсіюння такою решіткою, але без посилення, нормально падаючої плоскої хвилі. На Рис. 4.19 представлено графіки нормованих ППР для різних решіток зі срібних нанониток в оболонці з показником заломлення  $\alpha = 1.414$  та періодом  $p = 450$  нм. Як видно з цих графіків, в усіх випадках присутній гострий пік ґраткового резонансу на довжинах хвиль, близьких до значення періоду. Також ми встановили, що на всіх довжинах хвиль цих ґраткових

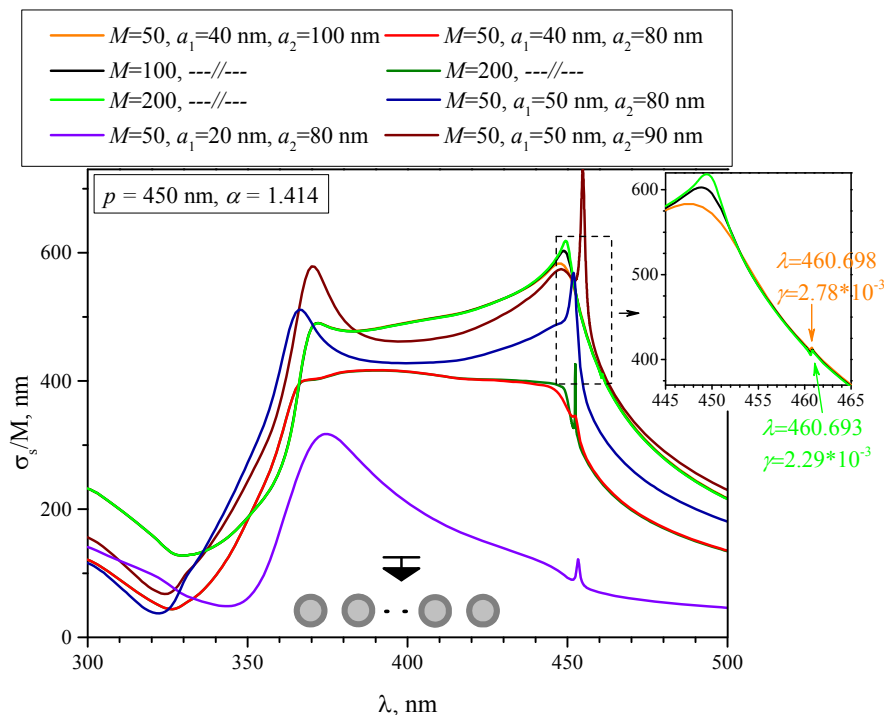


Рис. 4.19. Нормоване ППР як функція довжини хвилі при розсіянні нормально падаючої плоскої хвилі на різних решітках ( $p = 450$  нм) зі срібних нанониток з діелектричною оболонкою ( $\alpha = 1.414$ ) за відсутності накачки ( $\gamma = 0$ ).



резонансів у задачі розсіяння існують ґраткові лазерні моди у ЛЗВЗ. Наше дослідження також показало, що основна ґраткова мода може мати довжину хвилі, значення якої помітно більше значення періоду решітки (наприклад,  $>10$  нм при  $p = 450$  нм). На графіках ППР у відповідній задачі розсіяння цю ситуацію ілюструють графіки для решітки з  $a_1 = 40$  нм,  $a_2 = 100$  нм (помаранчева, чорна й салатові криві), причому в цьому випадку резонанс на  $\lambda \approx 461$  нм практично непомітний на кривих, а ґраткова мода знаходиться саме там, у той час як на  $\lambda \approx p$  присутній пік ППР, що збільшується разом з  $M$ , але ніякої моди у ЛЗВЗ там знайти не вдалося. Можливо, причиною цього є той факт, що вже при  $M = 50$  поріг самозбудження цієї моди вже дуже низький ( $\gamma = 2.78 \cdot 10^{-3}$ ) й далі, зі збільшенням  $M$ , зменшується дуже повільно

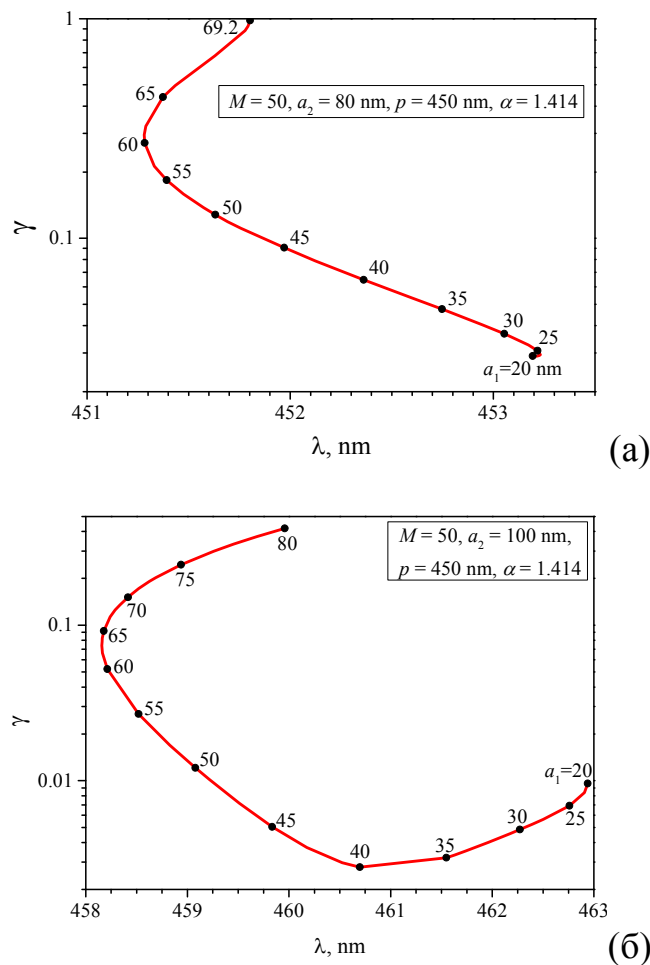


Рис. 4.20. Траєкторії власних значень для ґраткових мод решіток зі срібних нанониток з активною оболонкою при зміні радіусу срібної частини нитки  $a_1$ , незмінні параметри вказано на графіках.

На Рис. 4.20-4.22 представлено траєкторії основних ґраткових мод решіток зі срібних нанониток з активною оболонкою при зміні одного з параметрів решітки:  $a_1$ ,  $a_2$  або  $M$ . Проаналізувавши ці траєкторії можна сказати, що на довжину хвилі ґраткової моди та її поріг самозбудження комплексно впливають усі параметри решітки. На Рис. 4.21 видно, що збільшення товщини оболонки при фіксованому радіусі срібного сердечника призводить до гіперболічного виду падіння порога самозбудження та збільшенню довжини хвилі ґраткової моди. Тому подальше збільшення товщини оболонки при такому радіусі срібної частини не призведе до суттєвого падіння  $\gamma$ . Рис. 4.20 демонструє траєкторії основної ґраткової моди при змінних і радіусі  $a_1$  (зменшувався до значення 20 нм), і товщині оболонки  $d$ , при фіксованому загальному радіусі нитки  $a_2 = 80$  нм (Рис. 4.20(а)) й 100 нм (Рис. 4.20(б)). Як видно, у першому випадку поріг самозбудження мод зменшується зі зменшенням  $a_1$ , у другому ж сягає мінімуму при  $a_1 = 40$  нм, й далі збільшується, при цьому пороги самозбудження в мод на порядок нижчі, ніж у першому випадку. Тобто близькість довжини хвилі ґраткової моди до значення періоду решітки ще не означає, що поріг самозбудження цієї моди є низьким.

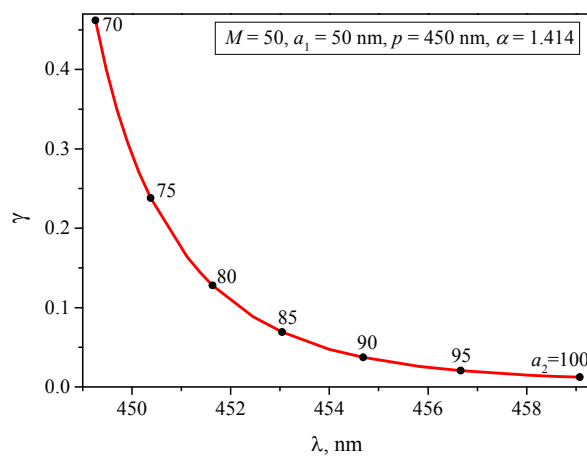


Рис. 4.21. Траєкторії власних значень для ґраткових мод решіток зі срібних нанониток з активною оболонкою при зміні товщини оболонки.

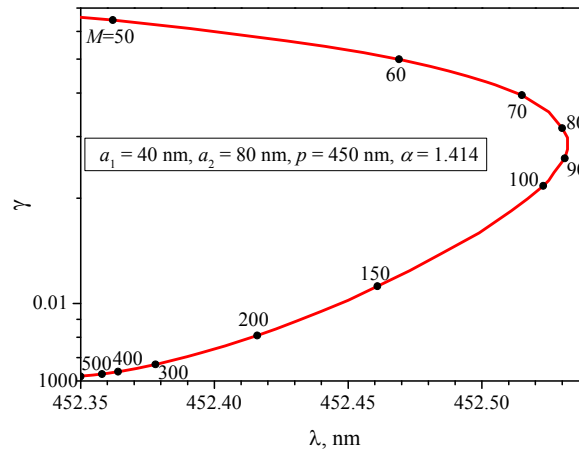


Рис. 4.22. Траєкторії власних значень для ґраткових мод решіток зі срібних нанониток з активною оболонкою при зміні кількості ниток  $M$ .

Однак якщо конфігурація решітки є такою, що довжина хвилі основної ґраткової моди знаходиться близько до значення періоду решітки, то збільшення числа елементів решітки  $M$  призводить до зменшення  $\gamma$ . На Рис. 4.22 представлено траєкторію основної ґраткової моди для решітки з  $a_1 = 40$  нм,  $a_2 = 80$  нм при збільшенні  $M$ . При  $M = 50$  поріг самозбудження цієї моди дорівнює  $6.46 \cdot 10^{-2}$ , але при  $M = 500$  він на порядок нижчий:  $\gamma = 6.28 \cdot 10^{-3}$ .

Траєкторії, які представлені на Рис. 4.20-4.22 відносяться до основної ґраткової лазерної моди відповідної решітки з нанониток. Уведемо для неї позначення  $G_{11}$ . У ближньому полі таких мод «світиться» максимальне число центральних ниток (Рис. 4.16(а), 4.23(а)), тобто поле має яскраві плями біля більшості ниток. Однак під час дослідження ми виявили, що існують також лазерні ґраткові моди, в яких решітка поділена на  $n = 2, 3, \dots$  частин, і кожна з яких «світиться» як у моді  $G_{11}$ . Природно, що у великих решіток (з великим  $M$ ) існує більша кількість  $G_{1n}$  мод. Якщо  $n$  парне, то функція поля непарна відносно вісі  $y$ , якщо непарне, то, відповідно, парна. При невеликому  $M$  довжини хвиль і пороги самозбудження таких мод сильно відрізняються від  $G_{11}$ , однак при великих  $M$ , зважаючи на те, що частини цих решіток також

будуть містити доволі велику кількість ниток, частоти й пороги мод  $G_{12}$ ,  $G_{13}$  тощо близькі до  $G_{11}$ .

На Рис. 4.23 представлені поля мод  $G_{11}$ ,  $G_{12}$  и  $G_{13}$  для решітки з 50 нанониток, а також траєкторії цих мод на площині  $(\lambda, \gamma)$  при зміні  $M$ . По графікам на Рис. 4.23(г) видно, що при  $M = 1000$  значення їхніх порогів самозбудження й довжин хвиль стають досить близькими один до одного, а найменше  $\gamma$ , як і очікувалося, має основна ґраткова мода.

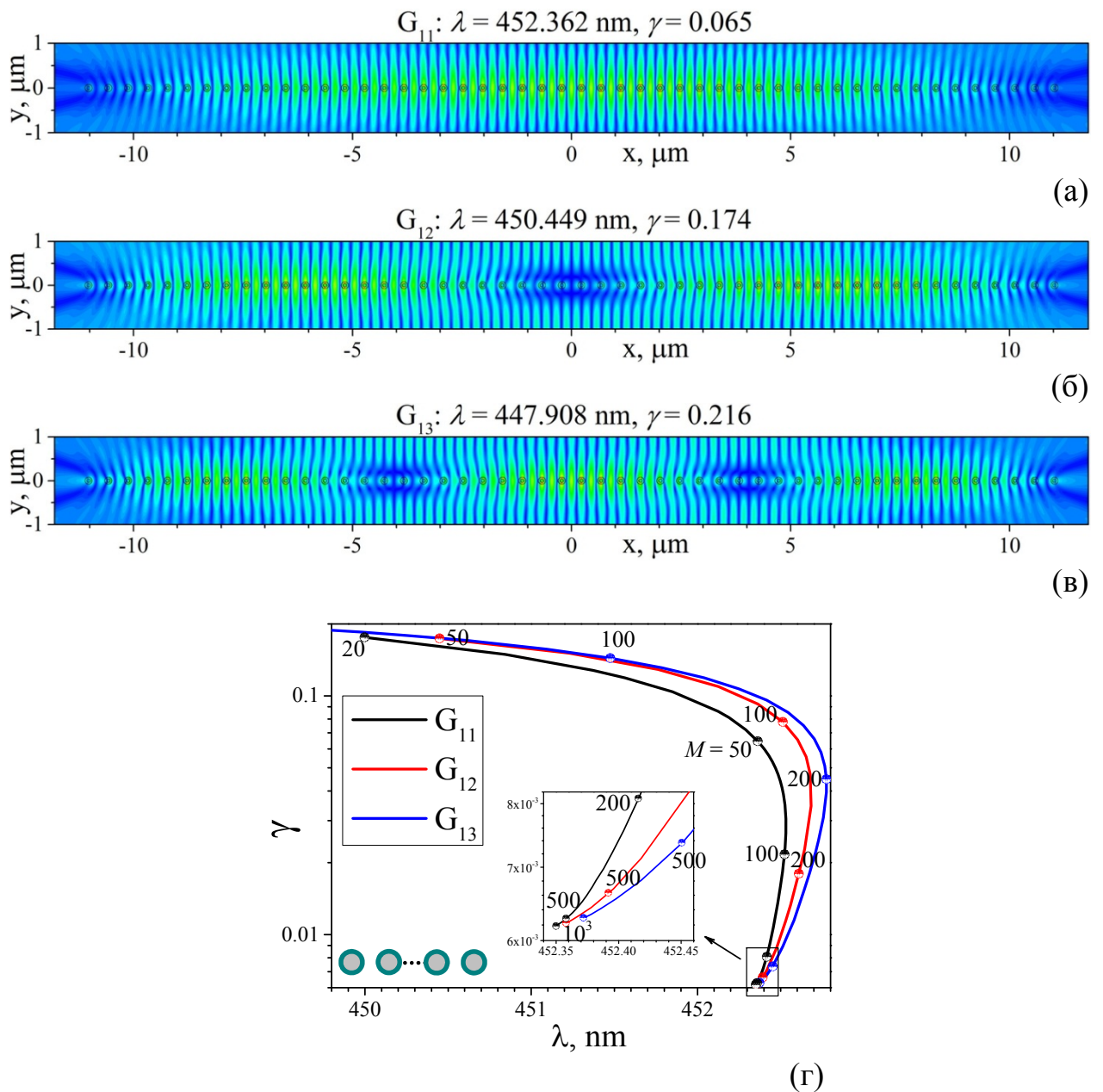


Рис. 4.23. Близні поля ґраткових лазерних мод  $G_{11}$  (а),  $G_{12}$  (б) і  $G_{13}$  (в) решітки з параметрами  $M = 50$ ,  $a_1 = 40 \text{ nm}$ ,  $a_2 = 80 \text{ nm}$ ,  $p = 450 \text{ nm}$ , а також траєкторії власних значень для цих мод на площині  $(\lambda, \gamma)$  при зміні  $M$  (г).

## Висновки до розділу 4

У даному розділі було представлено результати моделювання, за допомогою лазерної задачі на власні значення, двовимірних нанолазерів на основі одиночних срібних нанониток і нанотрубок, а також періодичних решіток з квантових і срібних (з активною оболонкою) нанониток. Було вивчено поля, частоти та пороги самозбудження власних мод таких нанолазерів. За результатами проведених досліджень можна зробити наступні висновки:

1. Аналіз порогів самозбудження та довжин хвиль власних мод нанолазерів на основі срібної нитки з активною оболонкою показав наявність кількох плазмонних мод з однаковим азимутальним індексом, а також, якщо товщина оболонки достатньо велика ( $> 80$  нм), мод оболонки. Найбільш важливою модою таких нанолазерів є дипольна плазмонна мода  $P_1^0$ , довжина хвилі якої знаходиться у видимій частині спектру (400-600 нм) та яка має відносно невисокі пороги самозбудження (0.2-0.5). Побічні плазмонні моди, а також моди оболонки, за довжиною хвилі знаходяться в області високих втрат у сріблі, через що мають великі пороги самозбудження. Оптимальний радіус срібної нанонитки для таких нанолазерів 40-60 нм, а товщина оболонки 60-100 нм.

2. Проведено порівняльний аналіз мод нанолазера на основі срібної нанонитки з активною оболонкою з використанням декількох аналітичних методів опису діелектричної проникності срібла у світловому діапазоні й експериментальних даних Джонсона і Крісті, апроксимованих сплайнами, який показав, що використання класичної формули Друде призводить до зсуву довжини хвилі основної плазмонної моди до фіолетової частини спектру та відсутності побічних плазмонних мод. У той же час використання модифікованих формул Друде дає добрий збіг з експериментальними даними, за виключенням частини діапазону, де  $\text{Im}\epsilon$  приймає від'ємні значення, що позбавлено фізичного сенсу.

3. Конфігурація нанолазера на основі срібної нанотрубки з активними сердечником і оболонкою є більш привабливою. Аналіз мод таких нанолазерів показав гібридизацію основних плазмонних мод, яка стається через наявність у нанотрубки двох границь. Внаслідок цього з'являються  $P_m^+$  і  $P_m^-$  моди з максимумами поля біля обох границь трубки, внутрішньої та зовнішньої. Найбільш привабливою робочою модою таких нанолазерів є «різницева» дипольна  $P_1^-$  мода, яка випромінює у жовтій або зеленій частинах спектру й має невисокий поріг самозбудження (0.1). Оптимальною можна вважати конфігурацію з сердечником радіусу 30-50 нм і товщиною срібної нанотрубки 10 нм, вкритою 10 нм оболонкою. Збільшення товщини нанотрубки призводить до руйнування гібридизації основної плазмонної моди.

4. У процесі аналізу власних мод лінійних решіток з активних діелектричних (квантових) нанониток та зі срібних нанониток з активною оболонкою у світловому діапазоні було знайдено граткові моди. Вони мають у багато разів нижчі пороги самозбудження (порядку  $10^{-2}$ - $10^{-3}$ ), ніж моди інших типів, а їхні довжини хвиль з точністю до сотих нанометру збігаються з довжинами хвиль граткових резонансів у відповідній задачі розсіяння нормально падаючої на таку решітку плоскої хвилі. У великих решітках, окрім основної граткової моди, присутні також інші, які можна описати, увівши цілочисловий індекс  $n$ , який позначає, скільки частин решітки «світяться» у ближньому полі цієї моди. При збільшенні кількості нанониток в решітці поріг самозбудження граткових мод зменшується, причому найшвидше зменшення стається при збільшенні кількості ниток до 200.

## ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі розроблено математично обґрунтований чисельний алгоритм з гарантованою збіжністю для дослідження розсіяння електромагнітних хвиль скінченними решітками з матеріальних ниток кругового поперечного перерізу. Зазначену задачу було зведено до розв'язання нескінченного блочного матричного рівняння Фредгольма другого роду, усічення кожного блоку якого до скінченного числа дозволяє отримати рішення з заданою точністю. Таким чином було досліджено характеристики розсіяння та поглинання, ближні поля лінійних решіток, дискретних кутів, хрестів та параболічних рефлекторів, багатосарових решіток та решіток з кількома періодами зі скінченного числа срібних та діелектричних нанониток. Крім того, за допомогою детермінантних рівнянь на основі вищезазначених матричних рівнянь Фредгольма другого роду, було досліджено власні моди плазмонних нанолазерів на основі срібної нанонитки та нанотрубки, а також решіток з діелектричних та срібних нанониток.

Основні наукові та практичні результати полягають у наступному:

- вперше чисельно досліджено з гарантованою точністю резонанси на високодобротних ґраткових модах в розсіянні електромагнітних хвиль скінченними решітками з діелектричних нанониток, досліджено їхні резонансні поля, продемонстровано, що добротність таких резонансів залежить від кількості ниток в решітці;
- продемонстровано наявність двох типів резонансів: на плазмонних та ґраткових модах, при розсіянні та поглинанні Н-поляризованих ЕМ хвиль скінченними решітками з металевих нанониток у світловому діапазоні, вивчено їхній взаємний вплив;
- вперше досліджено взаємний вплив резонансів на низькодобротних плазмонних модах та високодобротних ґраткових модах; показано, що при збігу дійсних частин їхніх власних частот спостерігається явище електромагнітної індукованої прозорості;

- досліджено можливість фокусування світлових хвиль квазі-періодичними дискретними параболічними рефлекторами з металевих нанониток, при умові збудження плазмонного резонансу на кожній з ниток, а також продемонстровано відсутність ґраткових резонансів для таких рефлекторів;

- вперше проведено порівняння коефіцієнтів відбиття скінченних та нескінченних решіток зі срібних нанониток; продемонстровано, що в околі частот ґраткових резонансів для того, щоб значення коефіцієнту відбиття скінченної решітки були близькими до значень для нескінченної решітки, необхідна набагато більша кількість ниток (порядку 100), ніж у решті діапазону (порядку 10);

- вперше продемонстровано «ознаку періодичності», що з'являється на рельєфах перерізу повного розсіяння як функції довжини хвилі та кута падіння у вигляді областей високих значень цієї величини; ці області тягнуться вздовж ліній аномалій Релея відповідної нескінченної решітки, з невеликим «червоним» зсувом; вони є добре видимими навіть для решітки з 50 срібних нанониток, яку помістили у «хмару» з великого числа довільно розташованих таких самих ниток;

- вперше у межах класичної електродинаміки знайдено частоти, пороги самозбудження та поля власних мод нанолазерів на основі срібної нанонитки та нанотрубки з активними оболонкою та сердечником (у випадку нанотрубки); проведено класифікацію мод, у процесі якої було знайдено основну та кілька побічних плазмонних мод, досліджено вплив різних параметрів нанолазерів на частоти та пороги самозбудження їхніх власних мод;

- вперше знайдено та класифіковано ґраткові лазерні моди решіток зі скінченного числа діелектричних та срібних нанониток; продемонстровано, що їхні пороги самозбудження є набагато нижчими за пороги мод інших типів, а довжини хвиль з точністю до сотих нанометру співпадають з довжинами хвиль ґраткових резонансів у відповідній задачі розсіяння.



**СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ**

1. D.M. Natarov, V.O. Byelobrov, R. Sauleau, T.M. Benson, A.I. Nosich. Periodicity-induced effects in the scattering and absorption of light by infinite and finite gratings of circular silver nanowires // *Optics Express*. – 2011. - Vol. 19, No. 22. - P. 22176-22190.
2. D.M. Natarov, R. Sauleau, A.I. Nosich. Periodicity-enhanced plasmon resonances in the scattering of light by sparse finite grids of circular silver nanowires // *IEEE Photonics Technology Letters*. - 2012. - Vol. 24, No. 1. - P. 43-45.
3. D.M. Natarov, R. Sauleau, A.I. Nosich. Resonance scattering and absorption of light by finite two-period gratings of circular silver nanowires // *Int. J. Semiconductor Physics, Quantum Electronics, and Optoelectronics*. – 2012. - Vol. 15, No. 3. - P. 204-208.
4. D.M. Natarov, R. Sauleau, M. Marciniak, A.I. Nosich. Effect of periodicity in the resonant scattering of light by finite sparse configurations of many silver nanowires // *Plasmonics*. – 2014. - Vol. 9, No. 2. - P. 389-407.
5. D.M. Natarov. Modes of a core-shell silver wire plasmonic nanolaser beyond the Drude formula // *IOP J. of Optics*. - 2014. - Vol. 16, No. 6. - P. 075002/6.
6. D.M. Natarov, M. Marciniak, R. Sauleau, A.I. Nosich. Seeing the order in a mess: optical signature of periodicity in a cloud of plasmonic nanowires // *Optics Express*. – 2014. - Vol. 22, No. 23. - P. 28190–28198.
7. E.A. Velichko, D.M. Natarov. Localized versus delocalized surface plasmons: dual nature of optical resonances on a silver circular wire and a silver tube of large diameter // *IOP J. of Optics*. – 2018. - Vol. 20, No. 7. – P. 075002/9.
8. D.M. Natarov, T.M. Benson, A. Altintas, R. Sauleau, A.I. Nosich. Resonances in the electromagnetic scattering by very large finite-periodic grids of circular dielectric wires // *Proc. Int. Kharkov Sym. on Physics and Engineering of Microwaves, Millimeter and Sub-millimeter Waves (MSMW'10)*, Kharkiv, 2010, A-7.

9. D.M. Natarov, T.M. Benson, A. Altintas, R. Sauleau, A.I. Nosich. Plasmon and grid resonances in the electromagnetic scattering by finite grids of silver nanowires // Proc. Int. Conf. Transparent Optical Networks (ICTON'10), Munich, 2010, Tu.P.8.
10. D.M. Natarov, T.M. Benson, R. Sauleau, A.I. Nosich. Electromagnetic wave scattering by periodically structured chains of closely spaced sub-wavelength wires // Proc. Int. Conf. Mathematical Methods in Electromagnetic Theory (MMET\*10), Kiev, 2010, NME-4.
11. D.M. Natarov, T.M. Benson, A. Altintas, R. Sauleau, A.I. Nosich. Enhancement of plasmon resonances in the wave scattering by finite grids of circular silver wires // Proc. Int. Conf. Laser and Fiber-Optics Numerical Modeling (LFNM-10), Sebastopol, 2010, pp. 42-44..
12. D.M. Natarov, T.M. Benson, A. Altintas, R. Sauleau, A.I. Nosich. Grid and plasmon resonances in the electromagnetic scattering by finite chains of nanowires from noble metals // Proc. Asia-Pacific Radio Science Conf. (AP-RASC'10), Toyama, 2010, B5b-8.
13. D.M. Natarov, M. Marciniak, R. Sauleau, A.I. Nosich. Radiatively coupled plasmons in the scattering of light by periodic grids of circular silver nanowires // Proc. Int. Conf. Transparent Optical Networks (ICTON-11), Stockholm, 2011, We.B2.6.
14. D.M. Natarov, R. Sauleau, A.I. Nosich. Plasmon-assisted scattering of light by a discrete corner made of silver nanowires // Proc. Int. Conf. Laser and Fiber-Optics Numerical Modeling (LFNM-11), Kharkiv, 2011, 080.
15. D.M. Natarov, R. Sauleau, A.I. Nosich. Scattering of light by a discrete cross made of silver nanowires // Proc. Int. Conf. Theoretical and Computational Nanophotonics (TACONA-2011), Bad Honnef, pp. 159-161, 2011.
16. D.M. Natarov, R. Sauleau, A.I. Nosich. Resonant scattering of light by finite sparse configurations of silver nanowires // Proc. Int. European Conf. on Antennas and Propagation (EuCAP-2012), Prague.

17. D.M. Natarov, O.V. Shapoval, M. Marciniak, A.I. Nosich. Rayleigh anomalies in the E-polarized scattering by finite flat gratings of silver nanostrips or nanowires // Proc. Int. Conf. Mathematical Methods in Electromagnetic Theory (MMET\*12), Kharkiv, 2012, pp. 44-47.
18. D.M. Natarov, E.I. Smotrova, R. Sauleau, A.I. Nosich. Electromagnetic analysis of the lasing thresholds of a plasmon-assisted nanowire laser in the visible range // Proc. Int. Conf. Near-Field Optics (NFO-12), San Sebastian, 2012.
19. D.M. Natarov, R. Sauleau, A.I. Nosich. Plasmon and periodicity assisted scattering and absorption of light by finite nanowire gratings // Proc. Int. Symp. Antennas and Propagation (ISAP-2012), Nagoya, 2012.
20. D.M. Natarov, M. Marciniak, R. Sauleau, A.I. Nosich. Periodicity assisted scattering and absorption of light by finite layered gratings of silver nanowires // Proc. Int. Conf. Electronics and Nanotechnology (ELNANO-2013), Kiev, 2013, pp. 188-191.
21. A.I. Nosich, V.O. Byelobrov, O.V. Shapoval, D.M. Natarov, T.L. Zinenko, M. Marciniak. Grating resonances as an alternative to plasmon resonances in nanophotonics applications // Proc. Int. Conf. Transparent Optical Networks (ICTON-2013), Cartagena, 2013, We.C5.2.
22. E.A. Velichko, D.M. Natarov, A.I. Nosich. Plasmon-assisted scattering of light by a circular silver nanowire with concentric dielectric coating // Proc. Int. Conf. Transparent Optical Networks (ICTON-13), Cartagena, 2013, Tu.P.24.
23. D.M. Natarov, M. Marciniak, R. Sauleau. Modeling of discrete parabolic reflector made of sub-wavelength plasmonic wires // Proc. Int. Symp. Physics and Engineering of Microwaves, MM, and Sub-MM Waves (MSMW-13), Kharkiv, 2013, pp. 455-457.
24. A.I. Nosich, V.O. Byelobrov, O.V. Shapoval, D.M. Natarov, T.L. Zinenko, M. Marciniak, J. Ctyroky. Grating resonances on periodic arrays of sub-wavelength wires and strips: historical narrative and possible applications

- // Proc. Int. Conf. Advanced Optoelectronics and Lasers (CAOL-2013), Sudak, 2013, pp. 10-13.
25. D.M. Natarov, M. Marciniak, R. Sauleau. Role of periodicity in the scattering by a cloud of randomly located plasmonic nanowires // Proc. Int. Conf. Laser and Fiber-Optical Networks Modeling (LFNM-2013), Sudak, 2013, pp. 10-12.
  26. D.M. Natarov. Inadequacy of the Drude formula in the simulation of a silver nanowire laser // Proc. Int. Conf. Electronics and Nanotechnology (ELNANO-2014), Kiev, 2014.
  27. D.M. Natarov. Anomalous scattering of light by finite clusters of silver nanowires containing periodicity // Proc. Int. Conf. Microwaves, Radar and Wireless Communications (MIKON-2014), Gdansk, 2014, pp. 407-409.
  28. D.M. Natarov. Electromagnetic analysis of a silver nanowire laser with a concentric active region // Proc. URSI General Assembly and Scientific Symp. (URSI-GASS-2014), Beijing, 2014, BP1.37.
  29. D.M. Natarov. Two types of optical resonances in the scattering of visible light by discrete metal nanowire scatterers // Proc. Int. Conf. Mathematical Methods in Electromagnetic Theory (MMET\*14), Dnipropetrovsk, 2014, pp. 68-70.
  30. D.M. Natarov, J. Ctyroky. Analysis of the modes of a core-shell plasmonic nanowire laser with a silver core // Proc. Int. Conf. Electronics and Nanotechnology (ELNANO-2015), Kiev, 2015, pp. 228-230.
  31. A.I. Nosich, O.V. Shapoval, V.O. Byelobrov, D.M. Natarov. New frontiers for Maxwell equations: electromagnetic modeling of lasers as open resonators with active regions // Proc. National Electromagnetic Theory Meeting Japan (EMT-2015), Miyazaki, 2015, pp. 49-56.
  32. D.M. Natarov. Grating resonances in the scattering of light by periodically structured dielectric nanowires // Proc. Int. Conf. Mathematical Methods in Electromagnetic Theory (MMET\*2016), Lviv, 2016, pp. 236-238.

33. D.M. Natarov. Electromagnetic analysis of a silver nanotube laser with two active regions // Proc. Int. Conf. Advanced Optoelectronics and Lasers (CAOL-2016), Odessa, 2016, pp. 260-261.
34. A.I. Nosich, M.V. Balaban, V.O. Byelobrov, D.M. Natarov, O.V. Shapoval. Essentials and merits of the method of analytical regularization in computational optics and photonics // Proc. Int. Conf. Laser and Fiber-Optics Numerical Modeling (LFNM-2016), Odessa, 2016, pp. 77-81.
35. O.V. Shapoval, D.M. Natarov, K. Kobayashi. Wave scattering and emission by a plasmonic strip placed into a circular quantum wire // Proc. Int. Young Scientists Forum on Applied Physics and Engineering (YSF-2016), Kharkiv, 2016.
36. D.M. Natarov. Lasing thresholds of plasmonic modes of a silver tube nanolaser with active shell and core // Proc. IEEE Ukraine Conf. Electrical Computer Eng. (UKRCON-2017), Kiev, 2017, pp. 748-751.
37. D.M. Natarov. Analysis of eigenmodes of laser based on finite quantum nanowire grating // Int. Workshop Direct and Inverse Problems of Electromagnetic and Acoustic Wave Theory (DIPED-2018), Tbilisi, 2018, pp. 76-79.
38. J. Fraunhofer. New modification of light by the mutual influence and the diffraction of light rays // Memoirs of the Royal Academy of Science in Munich (In German). – 1821. – Vol. 8. – P. 3–76.
39. J. Fraunhofers. Kurzer Bericht von den Resultaten neuerer Versuche über die Gesetze des Lichtes, und die Theorie derselben // Annalen der Physik (In German). – 1823. – Vol. 74, No. 8. – P. 337–378.
40. A.R. Parker. A geological history of reflecting optics // Journal of the Royal Society, Interface. – 2005. – Vol. 2, No. 2. – P. 1–17.
41. H. Hertz. Ueber strahlen elektrischer kraft // Ann. Phys. Chem. Leipzig (In German). – 1889. – Vol. 36. – P. 769-783.

42. R. W. Wood. On a Remarkable Case of Uneven Distribution of Light in a Diffraction Grating Spectrum // Proceedings of the Physical Society of London. – 1902. – Vol. 18, No 1. – P. 269-275.
43. Lord Rayleigh. On the dynamical theory of gratings // Proc. Royal Soc. London. – 1907. – A-79. – P. 399-416.
44. V. Twersky. On scattering of waves by the infinite grating of circular cylinders // IRE Trans. Antennas Propagation. – 1962. – Vol. 10, No 3. – P. 737-765.
45. V. Twersky. On a multiple scattering theory of the finite grating and the wood anomalies // Journal of Applied Physics. – 1952. – Vol. 23, No 10. – P. 1099-1118.
46. G. O. Olaofe. Scattering by two cylinders // Radio Science. – 1970. – Vol. 4. – P. 1351–1360.
47. H. A. Ragheb, M. Hamid. Scattering by N parallel conducting circular cylinders // Int. J. Electronics. – 1985. – Vol. 59. – P. 407-421.
48. A. Z. Elsherbeni, A. A. Kishk. Modeling of cylindrical objects by circular dielectric and conducting cylinders // IEEE Trans. Antennas Propagat. – 1992. – Vol. 40. – P. 96-99.
49. D. Felbacq, G. Tayeb, D. Maystre. Scattering by a random set of parallel cylinders // J. Opt. Soc. Am. A. – 1994. – Vol. 11. – P. 2526–2538.
50. В.П. Шестопапов, Л.Н. Литвиненко, С.А. Масалов и В.Г. Сологуб. Дифракция волн на решетках. Изд-во Харьковского Университета, 1973.
51. F.G. Bogdanov, G.Sh. Kevanishvili, M.N. Chikhladze. Diffraction of a plane electromagnetic wave from a lattice of coaxial dielectric cylinders // Radiophysics and Quant. Electron. – 1987. – Vol. 30, No 5. – P. 485-491.
52. X. Antoine, C. Chniti, K. Ramdani. On the numerical approximation of high-frequency acoustic multiple scattering problems by circular cylinders // J. Comput. Phys. – 2008. – Vol. 227. – P. 1754-1771.
53. X. Antoine, C. Geuzaine, K. Ramdani. Computational methods for multiple scattering at high frequency with applications to periodic structure

- calculations // In: Ehrhardt M (Ed.) Progress in Computational Physics (PiCP), Bentham Science Publ. – 2010. – P. 73–107.
54. R. Gomez-Medina, M. Laroche, J.J. Saenz. Extraordinary optical reflection from sub-wavelength cylinder arrays // Optics Express. – 2006. – Vol. 14, No 9. – P. 3730-3737.
  55. M. Laroche, S. Albaladejo, R. Carminati, and J. J. Saenz. Optical resonances in one-dimensional dielectric nano-rod arrays: field-induced fluorescence enhancement // Optics Letters. – 2007. – Vol. 32, No.18. – P. 2762-2764.
  56. A. Taflove and S. C. Hagness. Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method, 3rd ed. // Artech House Publishers. – 2005.
  57. A. Aminian, Y. Rahmat-Samii. Spectral FDTD: a novel technique for the analysis of oblique incident plane wave on periodic structures // IEEE Trans. Antennas and Propagation. – 2006. – Vol. 54. – P. 1818–1825.
  58. O.C. Zienkiewicz, R.L. Taylor, J.Z. Zhu. The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals (Sixth ed.) // Butterworth-Heinemann. – 2005.
  59. J.N. Reddy. An Introduction to the Finite Element Method (Third ed.) // McGraw-Hill. – 2006.
  60. G.L. Hower, R.G. Olsen, J.D. Earls, J.B. Schneider. Inaccuracies in numerical calculations of scattering near natural frequencies of penetrable objects // IEEE Trans. Antennas and Propagation. – 1993. – Vol. 41, No. 7. – P. 982-986.
  61. <https://www.lumerical.com/tcad-products/fdtd/>
  62. <https://www.comsol.eu/products>
  63. Y. K. Sirenko and L. G. Velychko. Time-domain and frequency-domain methods combined in the study of open resonance structures of complex geometry // Progress in Electromagnetics Research. – 2004. – Vol. 44. – P. 57–79.
  64. K. Yu. Sirenko and Yu. K. Sirenko. Exact “absorbing” conditions in initial-boundary value problems in the theory of open waveguide resonators //

Computational Mathematics and Mathematical Physics. – 2005. – Vol. 45, No. 3. – P. 490–506.

65. Н.А. Хижняк. Интегральные уравнения макроскопической электродинамики // Киев: «Наукова думка», 1986. – С. 280.
66. Д. Колтон. Методы интегральных уравнений в теории рассеяния // М.: «Мир», 1987. – С. 311.
67. С. Muller. Foundations of the mathematical theory of electromagnetic waves // Berlin, Springer, 1969. – P. 345.
68. O.F. Martin. Plasmon resonances in nanowires with nonregular cross-section // Tominaga J, Tsai DP (Eds.) Optical Nano-Technologies, Topics Appl. Phys., Springer. – 2003. – Vol. 88. – P. 183–210.
69. D.R. Fredkin, I. Mayergoyz. Resonant behavior of dielectric objects (electrostatic resonances) // Phys. Rev. Lett. – 2003. – Vol. 91. – P. 3902–3905.
70. J. P. Kottman, O. J. F. Martin. Plasmon resonances of silver nanowires with a nonregular cross-section // Phys. Rev. B. – 2001. – Vol. 64. – P. 235402–10.
71. J.P. Kottman, O.J.F. Martin. Plasmon resonant coupling in metallic nanowires // Opt. Exp. – 2001. – Vol. 8. – P. 655–663.
72. V. Giannini, J.A. Sanchez-Gil. Calculations of light scattering from isolated and interacting metallic nanowires of arbitrary cross section by means of Green's theorem surface integral equations in parametric form // J. Opt. Soc. Am. A. – 2007. – Vol. 24. – P. 2822–2830.
73. T. Søndergaard, S.J. Bozhevolnyi. Strip and gap plasmon polariton optical resonators // Phys. Stat. Sol. (b). – 2008. – Vol. 245. – P. 9-19.
74. F.J.G. Garcia de Abajo. Nonlocal effects in the plasmons of strongly interacting nanoparticles, dimers, and waveguides // J. Phys. Chem. C. – 2008. – Vol. 112. – P. 17983-17987.
75. P. B. Johnson and R. W. Christy. Optical constants of the noble metals // Phys. Rev. B. – 1972. - Vol. 6, No. 12. - P. 4370-4379.



76. D. W. Lynch and W. R. Hunter. Handbook of Optical Constants of Solids // E. D. Palik, (Ed.), Academic Press: New York, 1985.
77. D.J. Nash, J.R. Sambles. Surface plasmon-polariton study of the optical dielectric function of silver // J. Mod. Opt. – 1996. - Vol. 43, No. 1. – P. 81-91.
78. A. Vial and T. Laroche. Description of dispersion properties of metals by means of the critical points model and application to the study of resonant structures using the FDTD method // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2007. – Vol. 40. - P. 7152–7158.
79. A. Vial and T. Laroche. Comparison of gold and silver dispersion laws suitable for FDTD simulations // Appl. Phys. B. – 2008. – Vol. 93. – P. 139–143.
80. A. Vial, T. Laroche, M. Dridi., L. Le Cunff. A new model of dispersion for metals leading to a more accurate modeling of plasmonic structures using the FDTD method // Appl. Phys. A. – 2011. – Vol. 103. – P. 849–853.
81. H. Akima. A New Method of Interpolation and Smooth Curve Fitting Based on Local Procedures // J.ACM. – 1970. – Vol. 17, No. 4. – P. 589-602.
82. F. Hao and P. Nordlander. Efficient dielectric function for FDTD simulation of the optical properties of silver and gold nanoparticles // Chem. Phys. Lett. – 2007. – Vol. 446. - P. 115-118.
83. V.P. Drachev, U.K. Chettiar, A.V. Kildishev, H.-K. Yuan, W. Cai, V.M. Shalaev. The Ag dielectric function in plasmonic metamaterials // Opt. Exp. – 2008. – Vol. 16. - P. 1186-1195.
84. S. Zou, N. Janel, G.C. Schatz. Silver nanoparticle array structures that produce remarkably narrow plasmon lineshapes // J. Chem. Phys. – 2004. – Vol. 120. – P. 10871-5.
85. S. Zou, G.C. Schatz. Narrow plasmonic/photonic extinction and scattering lineshapes for one and two-dimensional silver nanoparticle arrays // J. Chem. Phys. – 2004. – Vol. 121. – P. 12606-7.

86. S. Zou, G.C. Schatz. Silver nanoparticle array structures that produce giant enhancements in electromagnetic fields // *Chem. Phys. Lett.* – 2005. – Vol. 403. – P. 62-67.
87. E.M. Hicks, S. Zou, G.C. Schatz, K.G. Spears, R.P. Van Duyne, L. Gunnarsson, T. Rindzevicius, B. Kasemo, M. Kall. Controlling plasmon line shapes through diffractive coupling in linear arrays of cylindrical nanoparticles fabricated by electron beam lithography // *Nano Lett.* – 2005. – Vol. 5. – P. 1065-1070.
88. N. Felidj, G. Laurent, J. Aubard, G. Levi, A. Hohenau, J.R. Krenn, F.R. Aussenegg. Grating-induced plasmon mode in gold nanoparticle arrays // *J. Chem. Phys.* – 2005. – Vol. 123. – P. 221103-5.
89. V.G. Kravets, F. Schedin, A.N. Grigorenko. Extremely narrow plasmon resonances based on diffraction coupling of localized plasmons in arrays of metallic nanoparticles // *Phys. Rev. Lett.* – 2008. – Vol. 101. – P. 087403-4.
90. B. Auguie, W.L. Barnes. Collective resonances in gold nanoparticle arrays // *Phys. Rev. Lett.* – 2008. – Vol. 101. – P. 143902-4.
91. S.V. Boriskina, L. Dal Negro. Multiple-wavelength plasmonic nanoantennas // *Opt. Lett.* – 2010. – Vol. 35. – P. 538-540.
92. K. Ohtaka, H. Numata. Multiple scattering effects in photon diffraction for an array of cylindrical dielectrics // *Phys. Lett.* – 1979. - Vol. 73-A, No. 5-6. - P. 411-413.
93. K.T. Carron, W. Fluhr, M. Meier, A. Wokaun, H.W. Lehmann. Resonances of two-dimensional particle gratings in surface-enhanced Raman scattering // *J. Opt. Soc. Am. B.* – 1986. - Vol. 3, No. 3. - P. 430-440.
94. T.L. Zinenko, A.I. Nosich, Y. Okuno. Plane wave scattering and absorption by resistive-strip and dielectric-strip periodic gratings // *IEEE Trans. Antennas Propagat.* – 1998. - Vol. 46, No. 10. - P. 1498-1505.
95. A. Christ, T. Zentgraf, J. Kuhl, S.G. Tikhodeev, N.A. Gippius, H. Giessen. Optical properties of planar metallic photonic crystal structures: experiment and theory // *Phys. Rev. B.* – 2004. - Vol. 70, No. 12. - P. 125113/15.

96. P. Offermans, M.C. Schaafsma, S.R.K. Rodriguez, Y. Zhang, M. Crego-Calama, S.H. Brongersma, J. Gomez Rivas. Universal scaling of the figure of merit of plasmonic sensors // *ACS Nano*. – 2011. – Vol. 5, No. 6. – P. 5151–5157.
97. F.J.G. Garcia de Abajo. Colloquium: Light scattering by particle and hole arrays // *Rev. Mod. Phys.* – 2007. - Vol. 79, No. 4. - P. 1267-1289.
98. D.C. Marinica, A.G. Borisov, S.V. Shabanov. Second harmonic generation from arrays of subwavelength cylinders // *Phys. Rev. B*. – 2007. - Vol. 76, No. 8. - P. 085311/10.
99. Y. Chu, E. Schonbrun, T. Yang, K. B. Crozier. Experimental observation of narrow surface plasmon resonances in gold nanoparticle arrays // *Appl. Phys. Lett.* – 2008. - Vol. 93, No. 18. - P. 181108/3.
100. V.G. Kravets, F. Schedin, A.N. Grigorenko. Extremely narrow plasmon resonances based on diffraction coupling of localized plasmons in arrays of metallic nanoparticles // *Phys. Rev. Lett.* – 2008. - Vol. 101. - P. 087403/4.
101. M.R. Gadsdon, I.R. Hooper, and J.R. Sambles. Optical resonances on sub-wavelength lamellar gratings // *Opt. Exp.* – 2008. - Vol. 16, No. 26. - P. 22003-22028.
102. H. Gao, J.M. McMahon, M.H. Lee, J. Henzie, S.K. Gray, G.C. Schatz, T.W. Odom. Rayleigh anomaly - surface plasmon polariton resonances in palladium and gold subwavelength hole arrays // *Opt. Exp.* – 2009. - Vol. 17, No. 4. - P. 2334-2340.
103. V. Giannini, G. Vecchi, J. Gomez Rivas. Lighting up multipolar surface plasmon polaritons by collective resonances in arrays of nanoantennas // *Phys. Rev. Lett.* – 2010. - Vol. 105. - P. 266801/4.
104. V.O. Byelobrov, J. Ctyroky, T.M. Benson, R. Sauleau, A. Altintas, A.I. Nosich. Low-threshold lasing eigenmodes of an infinite periodic chain of quantum wires // *Optics Letters*. – 2010. - Vol. 35, No. 21. - P. 3634-3636.
105. V.O. Byelobrov, T.M. Benson, A.I. Nosich. Binary grating of sub-wavelength silver and quantum wires as a photonic-plasmonic lasing platform with

- nanoscale elements // IEEE J. Sel. Top. Quant. Electron. – 2012. - Vol. 18, No 6. - P. 1839-1846.
106. S.R.K. Rodriguez, M.C. Schaafsma, A. Berrier, J.G. Rivas. Collective resonances in plasmonic crystals: size matters // Phys. B. – 2012. - Vol. 407. - P. 4081-4085.
107. T.V. Teperik, A. Degiron. Design strategies to tailor the narrow plasmon-photonic resonances in arrays of metallic nanoparticles // Phys. Rev. B. – 2012. - Vol. 86. - P. 245425/5.
108. P. Ghenuche, G. Vincent, M. Laroche, N. Bardou, R. Haidar, J.-L. Pelouard, S. Collin. Optical extinction in a single layer of nanorods // Phys. Rev. Lett. – 2012. - Vol. 109. - P. 143903/5.
109. A. Ricciardi, S. Savoia, Al. Crescitelli, E. Esposito, V. Galdi, A. Cusano. Surface vs. bulk sensitivity of sensors based on Rayleigh anomalies in metallic nanogratings // Proc. SPIE: Optical Sensors. – 2013. - Vol. 8774.
110. T.L. Zinenko, M. Marciniak, A.I. Nosich. Accurate analysis of light scattering and absorption by an infinite flat grating of thin silver nanostrips in free space using the method of analytical regularization // IEEE J. Sel. Top. Quant. Electron. – 2013. - Vol. 19, No. 3. - art. no. 9000108/8.
111. O.V. Shapoval, A.I. Nosich. Finite gratings of many thin silver nanostrips: optical resonances and role of periodicity // AIP Advances. – 2013. - Vol. 3, No. 4. - P. 042120/13.
112. H.C. van de Hulst. Light scattering by small particles // New York: Dover Publ., 1981. – 470 p.
113. Radar cross-section handbook / G.T. Ruck, D.E. Barrick, W.D. Stuart, C.K. Krichbaum. – New York: Plenum-Press, 1970. – Vol. 1. – 472 p.
114. Абрамовиц М. Справочник по специальным функциям / под ред. М. Абрамовиц, И. Стиган. – М.: Наука, 1979. – 832 с.
115. Фихтенгольц Г.М. Курс дифференциального и интегрального исчисления / М.: Наука, 1966. – Т. 3. – 656 с.

116. C. F. Bohren and D. R. Huffman. Absorption and Scattering of Light by Small Particles. - Wiley-VCH Publ, Weinheim, 2004.
117. L. Novotny and B. Hecht. Principles of Nano-Optics / Cambridge Univer. Press, 2012.
118. M.A. Noginov, G. Zhu, A.M. Belgrave. Demonstration of a spaser-based nanolaser // Nature. – 2009. – Vol. 460. – P. 1110.
119. J. Pan, Z. Chen, J. Chen, P. Zhan, C.J. Tang, Z.L. Wang. Low-threshold plasmonic lasing based on high-Q dipole void mode in a metallic nanoshell // Opt. Lett. – 2012. - Vol. 37, No. 7. - P. 1181-1183.
120. D.G. Baranov, A.P. Vinogradov, A.A. Lisyansky, Y.M. Strel'niker, D.J. Bergman. Magneto-optical spaser // Opt. Lett. – 2013. - Vol. 38, No. 12. - P. 2002-2004.
121. P. Ding, J. He, J. Wang, C. Fan, G. Cai, E. Liang. Low-threshold surface plasmon amplification from a gain-assisted core-shell nanoparticle with broken symmetry // J. Opt. – 2013. - Vol. 15. - P. 105001/8.
122. Q.-F. Yao, Y.-Z. Huang, L.-X. Zou, X.-M. Lv, J.-D. Lin, Y.-D. Yang. Analysis of mode coupling and threshold gain control for nanocircular resonators confined by isolation and metallic layers // J. Lightwave Techn. – 2013. - Vol. 31, No. 5. - P. 786-792.
123. L. Tang, H. Shi, H. Gao, J. Du, Z. Zhang, X. Dong, C. Du. An eigenvalue method to study the threshold behaviors of plasmonic nano-lasers // Appl. Phys. B: Lasers and Optics. – 2013. - Vol. 113. - P. 575-579.
124. M. Dridi and G. C. Schatz. Model for describing plasmon-enhanced lasers that combines rate equations with finite-difference time-domain // J. Opt. Soc. Am. B. – 2013. - Vol. 30, No. 11. - P. 2791-2797.
125. C. Deeb and J.-L. Pelouard. Plasmon lasers: coherent nanoscopic light sources // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2017. - Vol. 19. - P. 29731-29741.
126. T.V. Shahbazyan. Mode volume, energy transfer, and spaser threshold in plasmonic systems with gain // ACS Photonics. – 2017. - Vol. 4. - P. 1003–1008.

127. O.V. Shapoval, K. Kobayashi, and A.I. Nosich. Electromagnetic engineering of a single-mode nanolaser on a metal plasmonic strip placed into a circular quantum wire // *IEEE J. Sel. Top. Quant. Electron.* – 2017. - Vol. 23, No. 6. - art no 1501609.
128. J.B. Khurgin. Relative merits of phononics vs. plasmonics: the energy balance approach // *Nanophotonics.* – 2018. - Vol. 7, No. 1, P. 305–316.
129. F. van Beijnum, P.J. van Veldhoven, E.J. Geluk, M.J.A. de Dood, G.W. Hooft, and M.P. van Exter. Surface plasmon lasing observed in metal hole arrays // *Phys. Rev. Lett.* – 2013. – Vol. 110. – P. 206802/5.
130. W. Zhou, M. Dridi, J.Y. Suh, C.H. Kim, D.T. Co, M.R. Wasielewski, G. Schatz, and T.W. Odom. Lasing action in strongly coupled plasmonic nanocavity arrays // *Nature Nanotechnol.* – 2013. – Vol. 8. – P. 506.
131. A.H. Schokker and A.F. Koenderink. Lasing at the band edges of plasmonic lattices // *Phys. Rev. B.* – 2014. – Vol. 90, No. 15. – P. 15545225.
132. A. Yang, T.B. Hoang, M. Dridi, C. Deeb, M.H. Mikkelsen, G.C. Schatz, and T.W. Odom. Real-time tunable lasing from plasmonic nanocavity arrays // *Nature Commun.* – 2015. – Vol. 6. – P. 6939.
133. E.I. Smotrova, A.I. Nosich. Mathematical study of the two-dimensional lasing problem for the whispering gallery modes in a circular dielectric microcavity // *Optical and Quantum Electronics.* – 2004. – Vol. 36. – No. 1-3. – P. 213-221.
134. E.I. Smotrova, A.I. Nosich, T.M. Benson, P. Sewell. Cold-cavity thresholds of microdisks with uniform and nonuniform gain: quasi-3-D modeling with accurate 2-D analysis // *IEEE J. Sel. Top. Quant. Electron.* – 2005. - Vol. 11, No. 5. - P. 1135-1142.
135. E.I. Smotrova, V.O. Byelobrov, T.M. Benson., J. Ctyroký, R. Sauleau, A.I. Nosich. Optical theorem helps understand thresholds of lasing in microcavities with active regions // *IEEE J. Quant. Electron.* - 2011. - Vol. 47, No. 1. - P. 20-30.

136. E.I. Smotrova, V. Tsvirkun, I. Gozhyk, C. Lafargue, C. Ulysse, M. Lebental, A.I. Nosich. Spectra, thresholds and modal fields of a kite-shaped microcavity laser // *J. Opt. Soc. Am. B.* – 2013. - Vol. 40, No. 6. - P. 1732-1742.
137. E.I. Smotrova, A.I. Nosich. Optical coupling of an active microdisk to a passive one: effect on the lasing thresholds of the whispering-gallery supermodes // *Opt. Lett.* – 2013. - Vol. 38, No. 12. - P. 2059-2061.
138. A.O. Spiridonov, E.M. Karchevskii, and A.I. Nosich. Symmetry accounting in the integral-equation analysis of the lasing eigenvalue problems for two-dimensional optical microcavities // *J. Opt. Soc. Am. B.* – 2017. – Vol. 34, No. 7. – P. 1435.
139. A.S. Zolotukhina, A.O. Spiridonov, E.M. Karchevskii, and A.I. Nosich. Lasing modes of a microdisk with a ring gain area and of an active microring // *Opt. Quant. Electron.* – 2015. - Vol. 47, No. 12. - P. 3883-3891.
140. A.S. Zolotukhina, A.O. Spiridonov, E.M. Karchevskii, and A.I. Nosich. Electromagnetic analysis of optimal pumping of a microdisk laser with a ring electrode // *Appl. Phys. B.* – 2017. - Vol. 123, No. 1. - art no 32.
141. В.В. Никольский, Т.И. Никольская. Электродинамика и распространение радиоволн // М.: Наука, 1989. – 544 С.
142. M. Kerker. Resonances in electromagnetic scattering by objects with negative absorption // *Appl. Opt.* – 1979. – Vol.18, No. 8. – P. 1180-1189.
143. А.Г. Власов. Краевая задача электродинамики для излучающего диэлектрического цилиндра с зеркалами на торцах // *Радиотехника и электроника.* – 1977. - №1. – С. 21-28.
144. S.W. Corzine, R.S. Geels, J.W. Scott, R.-H. Yan, L.A. Coldren. Design of Fabry-Perot surface-emitting lasers with a periodic gain structure // *IEEE J. Quantum Electron.* – 1989. – Vol. 25, No. 6. – P. 1513-1524.
145. B. Klein, L.F. Register, K. Hess, D.G. Deppe, Q. Deng. Self-consistent Green's function approach to the analysis of dielectrically apertures VCSEL's // *Appl. Physics Lett.* – 1998. – Vol. 73, No. 23. – P. 3324-3326.

146. M.J. Noble, J.P. Loehr, J.A. Lott. Analysis of microcavity VCSEL lasing modes using a full-vector weighted index method // IEEE J. Quantum Electron. – 1998. – Vol. 34. – P. 1890-1903.
147. J.V. Campenhout, P. Bienstman, R. Baets. Bang-edge lasing in gold-clad photonic-crystal membranes // IEEE J. Select. Areas Commun. – 2005. – Vol. 25. – P. 1418-1423.
148. S.-C. Chu, K. Otsuka. Numerical study for selective excitation of Inge-Gaussian modes in end-pumped solid-state lasers // Opt. Express. – 2005. – Vol. 15, No. 25. – P. 16506-16519.
149. C. Manolatou, F. Rana. Subwavelength nanopatch cavities for semiconductor plasmon lasers // IEEE J. Quantum Electron. – 2008. – Vol. 44, No. 5. – P. 435-447.
150. S. Nojima, “Theoretical analysis of feedback mechanisms of two-dimensional finite-sized photonic-crystal lasers,” J. Appl. Phys. 98 (4), 043102/9 (2005).
151. A. Mock, “First principles derivation of microcavity semiconductor laser threshold condition and its application to fdtd active cavity modeling,” J. Opt. Soc. Am. B 27 (11), 2262 (2010).
152. S.W. Chang, “Confinement factors and modal volumes of micro and nanocavities invariant to integration regions,” IEEE J. Sel. Top. Quant. Electron. 18 (6), 1771 (2012).
153. L. Tang, H. Shi, H. Gao, J. Du, and Z. Zhang, “An eigenvalue method to study the threshold behaviors of plasmonic nano-lasers,” Appl. Phys. B: Lasers and Optics 113, 575 (2013).
154. D. Gagnon, J. Dumont, J.-L. Deziel, and L. J. Dube, “Ab initio investigation of lasing thresholds in photonic molecules,” J. Opt. Soc. Amer. B 31 (8), 1867 (2014).
155. Е.А. Иванов. Дифракция электромагнитных волн на двух телах // Минск: Наука и техника, 1968. – 584 с.
156. H. Lochbihler. Enhanced transmission of TE polarized light through wire gratings // Phys Rev B. – 2009. – Vol. 79, No. 24. – P. 245427/8.



157. H.-Y. She, L.-W. Li, O.J.F. Martin and J.R. Mosig. Surface polaritons of small coated cylinders illuminated by normal TM and TE plane waves // *Opt. Exp.* – 2008. – Vol. 16. – P. 1007–19.
158. E.I. Smotrova, T.M. Benson, P. Sewell, J. Ctyroky and A.I. Nosich. Lasing frequencies and thresholds of the dipole-type supermodes in an active microdisk concentrically coupled with a passive microring // *J. Opt. Soc. Am. A.* – 2008. – Vol. 25. – P. 2884–92.
159. V.S. Bulygin, A.I. Nosich, Y.V. Gandel. Nystrom-type method in three-dimensional electromagnetic diffraction by a finite PEC rotationally symmetric surface // *IEEE Trans. Antennas and Propagation.* – 2012. - Vol. 60, No. 10. - P. 4710-4718.
160. B. Auguie and W. L. Barnes. Diffractive coupling in gold nanoparticle arrays and the effect of disorder // *Opt. Lett.* – 2009. – Vol. 34, No. 4. – P. 401–403.
161. W. Khunsin and R. Vogelgesang. Recent advances in nearfield optical analysis and description of amorphous metamaterials // in *Amorphous Nanophotonics*, C. Rockstuhl and T. Scharf, eds., Springer Series Nano-Optics and Nanophotonics (Springer, 2013), pp. 169–200.
162. B. S. Lukyanchuk and V. Ternovsky. Light scattering by a thin wire with a surface-plasmon resonance: Bifurcations of the Poynting vector field // *Phys. Rev. B.* – 2006. – Vol. 73. – P. 235432.

**ДОДАТОК А**  
**СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ**

1. D.M. Natarov, V.O. Byelobrov, R. Sauleau, T.M. Benson, A.I. Nosich. Periodicity-induced effects in the scattering and absorption of light by infinite and finite gratings of circular silver nanowires // *Optics Express*. – 2011. - Vol. 19, No. 22. - P. 22176-22190.
2. D.M. Natarov, R. Sauleau, A.I. Nosich. Periodicity-enhanced plasmon resonances in the scattering of light by sparse finite grids of circular silver nanowires // *IEEE Photonics Technology Letters*. - 2012. - Vol. 24, No. 1. - P. 43-45.
3. D.M. Natarov, R. Sauleau, A.I. Nosich. Resonance scattering and absorption of light by finite two-period gratings of circular silver nanowires // *Int. J. Semiconductor Physics, Quantum Electronics, and Optoelectronics*. – 2012. - Vol. 15, No. 3. - P. 204-208.
4. D.M. Natarov, R. Sauleau, M. Marciniak, A.I. Nosich. Effect of periodicity in the resonant scattering of light by finite sparse configurations of many silver nanowires // *Plasmonics*. – 2014. - Vol. 9, No. 2. - P. 389-407.
5. D.M. Natarov. Modes of a core-shell silver wire plasmonic nanolaser beyond the Drude formula // *IOP J. of Optics*. - 2014. - Vol. 16, No. 6. - P. 075002/6.
6. D.M. Natarov, M. Marciniak, R. Sauleau, A.I. Nosich. Seeing the order in a mess: optical signature of periodicity in a cloud of plasmonic nanowires // *Optics Express*. – 2014. - Vol. 22, No. 23. - P. 28190–28198.
7. E.A. Velichko, D.M. Natarov. Localized versus delocalized surface plasmons: dual nature of optical resonances on a silver circular wire and a silver tube of large diameter // *IOP J. of Optics*. – 2018. - Vol. 20, No. 7. – P. 075002/9.
8. D.M. Natarov, T.M. Benson, A. Altintas, R. Sauleau, A.I. Nosich. Resonances in the electromagnetic scattering by very large finite-periodic grids of circular dielectric wires // *Proc. Int. Kharkov Sym. on Physics and Engineering of Microwaves, Millimeter and Sub-millimeter Waves (MSMW'10)*, Kharkiv, 2010, A-7.
9. D.M. Natarov, T.M. Benson, A. Altintas, R. Sauleau, A.I. Nosich. Plasmon and grid resonances in the electromagnetic scattering by finite grids of silver nanowires // *Proc. Int. Conf. Transparent Optical Networks (ICTON'10)*, Munich, 2010, Tu.P.8.
10. D.M. Natarov, T.M. Benson, R. Sauleau, A.I. Nosich. Electromagnetic wave scattering by periodically structured chains of closely spaced sub-wavelength wires // *Proc. Int. Conf. Mathematical Methods in Electromagnetic Theory (MMET\*10)*, Kiev, 2010, NME-4.

11. D.M. Natarov, T.M. Benson, A. Altintas, R. Sauleau, A.I. Nosich. Enhancement of plasmon resonances in the wave scattering by finite grids of circular silver wires // Proc. Int. Conf. Laser and Fiber-Optics Numerical Modeling (LFNM-10), Sebastopol, 2010, pp. 42-44..
12. D.M. Natarov, T.M. Benson, A. Altintas, R. Sauleau, A.I. Nosich. Grid and plasmon resonances in the electromagnetic scattering by finite chains of nanowires from noble metals // Proc. Asia-Pacific Radio Science Conf. (AP-RASC'10), Toyama, 2010, B5b-8.
13. D.M. Natarov, M. Marciniak, R. Sauleau, A.I. Nosich. Radiatively coupled plasmons in the scattering of light by periodic grids of circular silver nanowires // Proc. Int. Conf. Transparent Optical Networks (ICTON-11), Stockholm, 2011, We.B2.6.
14. D.M. Natarov, R. Sauleau, A.I. Nosich. Plasmon-assisted scattering of light by a discrete corner made of silver nanowires // Proc. Int. Conf. Laser and Fiber-Optics Numerical Modeling (LFNM-11), Kharkiv, 2011, 080.
15. D.M. Natarov, R. Sauleau, A.I. Nosich. Scattering of light by a discrete cross made of silver nanowires // Proc. Int. Conf. Theoretical and Computational Nanophotonics (TACONA-2011), Bad Honnef, pp. 159-161, 2011.
16. D.M. Natarov, R. Sauleau, A.I. Nosich. Resonant scattering of light by finite sparse configurations of silver nanowires // Proc. Int. European Conf. on Antennas and Propagation (EuCAP-2012), Prague.
17. D.M. Natarov, O.V. Shapoval, M. Marciniak, A.I. Nosich. Rayleigh anomalies in the E-polarized scattering by finite flat gratings of silver nanostrips or nanowires // Proc. Int. Conf. Mathematical Methods in Electromagnetic Theory (MMET\*12), Kharkiv, 2012, pp. 44-47.
18. D.M. Natarov, E.I. Smotrova, R. Sauleau, A.I. Nosich. Electromagnetic analysis of the lasing thresholds of a plasmon-assisted nanowire laser in the visible range // Proc. Int. Conf. Near-Field Optics (NFO-12), San Sebastian, 2012.
19. D.M. Natarov, R. Sauleau, A.I. Nosich. Plasmon and periodicity assisted scattering and absorption of light by finite nanowire gratings // Proc. Int. Symp. Antennas and Propagation (ISAP-2012), Nagoya, 2012.
20. D.M. Natarov, M. Marciniak, R. Sauleau, A.I. Nosich. Periodicity assisted scattering and absorption of light by finite layered gratings of silver nanowires // Proc. Int. Conf. Electronics and Nanotechnology (ELNANO-2013), Kiev, 2013, pp. 188-191.
21. A.I. Nosich, V.O. Byelobrov, O.V. Shapoval, D.M. Natarov, T.L. Zinenko, M. Marciniak. Grating resonances as an alternative to plasmon resonances in nanophotonics applications // Proc. Int. Conf. Transparent Optical Networks (ICTON-2013), Cartagena, 2013, We.C5.2.

22. E.A. Velichko, D.M. Natarov, A.I. Nosich. Plasmon-assisted scattering of light by a circular silver nanowire with concentric dielectric coating // Proc. Int. Conf. Transparent Optical Networks (ICTON-13), Cartagena, 2013, Tu.P.24.
23. D.M. Natarov, M. Marciniak, R. Sauleau. Modeling of discrete parabolic reflector made of sub-wavelength plasmonic wires // Proc. Int. Symp. Physics and Engineering of Microwaves, MM, and Sub-MM Waves (MSMW-13), Kharkiv, 2013, pp. 455-457.
24. A.I. Nosich, V.O. Byelobrov, O.V. Shapoval, D.M. Natarov, T.L. Zinenko, M. Marciniak, J. Ctyroky. Grating resonances on periodic arrays of sub-wavelength wires and strips: historical narrative and possible applications // Proc. Int. Conf. Advanced Optoelectronics and Lasers (CAOL-2013), Sudak, 2013, pp. 10-13.
25. D.M. Natarov, M. Marciniak, R. Sauleau. Role of periodicity in the scattering by a cloud of randomly located plasmonic nanowires // Proc. Int. Conf. Laser and Fiber-Optical Networks Modeling (LFNM-2013), Sudak, 2013, pp. 10-12.
26. D.M. Natarov. Inadequacy of the Drude formula in the simulation of a silver nanowire laser // Proc. Int. Conf. Electronics and Nanotechnology (ELNANO-2014), Kiev, 2014.
27. D.M. Natarov. Anomalous scattering of light by finite clusters of silver nanowires containing periodicity // Proc. Int. Conf. Microwaves, Radar and Wireless Communications (MIKON-2014), Gdansk, 2014, pp. 407-409.
28. D.M. Natarov. Electromagnetic analysis of a silver nanowire laser with a concentric active region // Proc. URSI General Assembly and Scientific Symp. (URSI-GASS-2014), Beijing, 2014, BP1.37.
29. D.M. Natarov. Two types of optical resonances in the scattering of visible light by discrete metal nanowire scatterers // Proc. Int. Conf. Mathematical Methods in Electromagnetic Theory (MMET\*14), Dnipropetrovsk, 2014, pp. 68-70.
30. D.M. Natarov, J. Ctyroky. Analysis of the modes of a core-shell plasmonic nanowire laser with a silver core // Proc. Int. Conf. Electronics and Nanotechnology (ELNANO-2015), Kiev, 2015, pp. 228-230.
31. A.I. Nosich, O.V. Shapoval, V.O. Byelobrov, D.M. Natarov. New frontiers for Maxwell equations: electromagnetic modeling of lasers as open resonators with active regions // Proc. National Electromagnetic Theory Meeting Japan (EMT-2015), Miyazaki, 2015, pp. 49-56.
32. D.M. Natarov. Grating resonances in the scattering of light by periodically structured dielectric nanowires // Proc. Int. Conf. Mathematical Methods in Electromagnetic Theory (MMET\*2016), Lviv, 2016, pp. 236-238.

33. D.M. Natarov. Electromagnetic analysis of a silver nanotube laser with two active regions // Proc. Int. Conf. Advanced Optoelectronics and Lasers (CAOL-2016), Odessa, 2016, pp. 260-261.
34. A.I. Nosich, M.V. Balaban, V.O. Byelobrov, D.M. Natarov, O.V. Shapoval. Essentials and merits of the method of analytical regularization in computational optics and photonics // Proc. Int. Conf. Laser and Fiber-Optics Numerical Modeling (LFNM-2016), Odessa, 2016, pp. 77-81.
35. O.V. Shapoval, D.M. Natarov, K. Kobayashi. Wave scattering and emission by a plasmonic strip placed into a circular quantum wire // Proc. Int. Young Scientists Forum on Applied Physics and Engineering (YSF-2016), Kharkiv, 2016.
36. D.M. Natarov. Lasing thresholds of plasmonic modes of a silver tube nanolaser with active shell and core // Proc. IEEE Ukraine Conf. Electrical Computer Eng. (UKRCON-2017), Kiev, 2017, pp. 748-751.
37. D.M. Natarov. Analysis of eigenmodes of laser based on finite quantum nanowire grating // Int. Workshop Direct and Inverse Problems of Electromagnetic and Acoustic Wave Theory (DIPED-2018), Tbilisi, 2018, pp. 76-79.

## ДОДАТОК Б

### КООРДИНАТИ ЦЕНТРІВ НИТОК ПСЕВДО-ВИПАДКОВОЇ ХМАРИ

Таблиця Б.1

Координати центрів ниток псевдо-випадкової хмари (у мікрометрах) та мінімальні відстані  $d_{\min}/a$  від відповідної нитки до найближчої

No	(x, y)	$d_{\min}/a$	No	(x, y)	$d_{\min}/a$	No	(x, y)	$d_{\min}/a$
1	(-44.64, 0.81)	22.14	38	(-11.3175, 36.0)	52.8	75	(15.3, 8.64)	76.21
2	(-43.695, 3.105)	16.6	39	(-10.305, 18.36)	51.14	76	(16.11, 13.14)	18.81
3	(-43.38, 4.05)	16.6	40	(-10.08, 15.3)	51.14	77	(17.145, 13.59)	18.81
4	(-42.255, 7.74)	43.69	41	(-9.54, 22.59)	29.86	78	(17.595, 23.715)	56.03
5	(-41.58, 1.53)	36.01	42	(-8.6625, 12.51)	52.16	79	(18.54, 27.765)	69.31
6	(-40.59, 5.715)	43.69	43	(-8.199, 40.05)	71.44	80	(19.17, 20.745)	56.03
7	(-40.05, 3.15)	37.14	44	(-7.7625, 22.815)	29.86	81	(20.295, 5.13)	44.29
8	(-38.295, 11.25)	29.7	45	(-7.6275, 7.425)	58.87	82	(21.06, 10.08)	76.05
9	(-37.9575, 4.59)	42.34	46	(-6.93, 19.584)	55.61	83	(22.005, 3.096)	44.29
10	(-37.035, 9.99)	29.17	47	(-5.8725, 36.45)	71.44	84	(22.86, 24.075)	51.01
11	(-35.82, 8.73)	29.17	48	(-5.1075, 9.9)	58.87	85	(24.21, 16.596)	71.97
12	(-35.1, 3.15)	28.98	49	(-4.3425, 14.58)	14.43	86	(25.155, 22.05)	51.01
13	(-34.785, 4.86)	28.98	50	(-3.555, 14.94)	14.43	87	(25.605, 9.675)	76.05
14	(-33.39, 18.99)	92.55	51	(-2.5605, 6.57)	69.87	88	(27.18, 25.29)	63.68
15	(-31.567, 0.675)	70.33	52	(-2.43, 30.555)	113.78	89	(27.7425, 19.08)	63.33
16	(-31.185, 8.19)	36.28	53	(-1.7775, 42.39)	103.04	90	(28.89, 5.76)	77.84
17	(-29.88, 13.41)	63.3	54	(-0.8775, 0.945)	39.41	91	(29.835, 14.94)	58.75
18	(-29.295, 7.11)	36.28	55	(-0.09, 23.76)	67.5	92	(30.69, 11.52)	58.75
19	(-28.012, 20.376)	85.47	56	(1.17, 9.405)	46.33	93	(30.87, 1.53)	32.93
20	(-26.82, 11.16)	63.3	57	(1.62, 1.449)	42.46	94	(31.455, 18.27)	61.72
21	(-26.55, 25.74)	83.41	58	(2.52, 6.975)	46.33	95	(32.7825, 1.035)	32.93
22	(-25.74, 5.94)	31.83	59	(2.97, 38.43)	103.04	96	(34.245, 6.21)	45.68
23	(-25.155, 14.715)	44.63	60	(3.96, 23.715)	67.5	97	(34.56, 15.84)	65.71
24	(-24.66, 4.365)	22.37	61	(5.4, 19.8)	47.63	98	(35.8875, 10.26)	53.22
25	(-24.03, 17.145)	44.61	62	(6.255, 15.75)	54.54	99	(36.801, 7.2)	45.68
26	(-23.355, 4.68)	22.37	63	(6.66, 32.715)	27.01	100	(37.6875, 3.915)	21.9
27	(-22.59, 22.68)	73.7	64	(7.0425, 31.14)	27.01	101	(38.7225, 4.725)	21.9
28	(-21.645, 18.36)	43.54	65	(7.965, 18.54)	47.63	102	(39.42, 10.134)	53.99
29	(-19.89, 16.425)	43.54	66	(8.73, 7.38)	102.98	103	(40.4775, 1.8)	31.7
30	(-18.99, 32.796)	88.26	67	(9.315, 32.76)	44.26	104	(40.7925, 7.2)	53.78
31	(-18.495, 7.875)	96.94	68	(10.26, 36.09)	57.69	105	(42.0075, 3.78)	28.58
32	(-17.235, 20.34)	64.93	69	(11.1825, 25.425)	50.03	106	(42.345, 1.44)	26.75
33	(-15.9075, 13.68)	68.12	70	(11.565, 1.89)	89.72	107	(43.3395, 2.7)	26.75
34	(-13.86, 34.11)	52.8	71	(13.005, 27.81)	50.03	108	(44.46, 0.495)	19.81
35	(-13.365, 20.79)	64.93	72	(13.455, 17.46)	26.87	109	(-44.595, -0.517)	16.77
36	(-12.51, 5.67)	86.47	73	(13.8375, 19.026)	26.87	110	(-43.695, -0.967)	10.67
37	(-12.195, 11.97)	59.56	74	(14.58, 30.96)	58.7	111	(-43.065, -1.08)	10.67

## Продовження таблиці Б.1

No	(x, y)	$d_{min}/a$	No	(x, y)	$d_{min}/a$	No	(x, y)	$d_{min}/a$
112	(-42.435, -1.507)	12.69	142	(-17.64, -12.465)	60.34	172	(11.43, -29.295)	78.92
113	(-41.94, -2.385)	16.79	143	(-16.56, -29.925)	74.13	173	(12.69, -9.495)	99.69
114	(-41.139, -0.585)	26.51	144	(-15.3, -15.93)	42.44	174	(13.455, -19.98)	62.95
115	(-40.32, -3.69)	22.25	145	(-14.4225, -4.95)	84.89	175	(14.715, -2.475)	89.72
116	(-39.6765, -2.52)	22.25	146	(-13.545, -17.775)	42.44	176	(16.29, -15.48)	66.09
117	(-38.205, -3.465)	29.15	147	(-12.555, -27.99)	36.93	177	(17.01, -24.975)	63.3
118	(-37.485, -9.5985)	58.8	148	(-11.25, -9.495)	92.38	178	(18.135, -11.97)	66.09
119	(-36.765, -1.62)	39.01	149	(-10.62, -26.91)	36.93	179	(19.26, -21.915)	63.3
120	(-36.18, -13.14)	62.9	150	(-9.81, -2.79)	84.89	180	(20.7225, -5.9085)	99.44
121	(-35.2305, -6.885)	40.6	151	(-8.73, -37.035)	77.77	181	(22.005, -14.445)	63.06
122	(-34.56, -4.455)	42.01	152	(-7.785, -17.055)	96.75	182	(23.715, -11.07)	39.86
123	(-33.795, -9.495)	49.65	153	(-6.5925, -25.83)	69.5	183	(25.155, -0.99)	85.99
124	(-32.805, -6.66)	40.6	154	(-5.85, -32.49)	72.88	184	(25.515, -9.495)	39.86
125	(-31.68, -12.645)	20.52	155	(-5.31, -10.44)	100.25	185	(27.72, -20.9475)	128.61
126	(-31.297, -11.475)	20.52	156	(-4.095, -36.495)	72.88	186	(29.565, -13.455)	69.07
127	(-30.285, -7.56)	44.6	157	(-2.79, -20.925)	103.44	187	(30.915, -7.245)	79.8
128	(-29.655, -14.175)	25.5	158	(-1.8, -40.455)	32.56	188	(31.815, -1.53)	45.69
129	(-28.71, -2.43)	61.78	159	(-1.26, -14.895)	100.35	189	(33.705, -13.275)	51.87
130	(-28.305, -13.455)	25.5	160	(-0.585, -41.985)	32.56	190	(34.605, -10.296)	51.87
131	(-27.36, -20.34)	57.9	161	(0.18, -1.17)	39.41	191	(35.865, -5.445)	22.06
132	(-26.685, -5.535)	51	162	(0.72, -40.5)	32.95	192	(36.945, -6.21)	22.06
133	(-25.965, -15.84)	30.64	163	(1.62, -5.04)	68.82	193	(38.205, -2.34)	17.4
134	(-25.29, -17.55)	30.64	164	(3.285, -25.38)	82.76	194	(39.0375, -1.71)	17.4
135	(-23.985, -4.095)	51	165	(4.05, -20.25)	17.58	195	(40.095, -9.9)	63.06
136	(-23.49, -22.5)	36.06	166	(5.0895, -20.07)	17.58	196	(40.815, -3.015)	36.75
137	(-22.635, -7.47)	56.54	167	(5.22, -38.43)	82.55	197	(41.805, -6.525)	60.78
138	(-21.42, -23.13)	36.06	168	(6.705, -28.98)	78.92	198	(43.02, -0.99)	18.81
139	(-20.61, -14.535)	60.34	169	(7.83, -16.695)	72.46	199	(44.055, -1.44)	18.81
140	(-19.485, -8.73)	56.54	170	(9.0, -33.48)	80.66	200	(45.045, -0.54)	19.81
141	(-18.63, -23.67)	47.36	171	(9.81, -20.97)	62.95			