

НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ «ЛЬВІВСЬКА ПОЛІТЕХНІКА»
МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

ПОЛЬОВИЙ ВІТАЛІЙ ЄВГЕНОВИЧ

УДК 519.876.5; 537.8

ДИСЕРТАЦІЯ

**МОДЕЛЮВАННЯ ПОШИРЕННЯ
ПЛАЗМОН-ПОЛЯРИТОННИХ ХВИЛЬ В ШАРУВАТИХ
СТРУКТУРАХ**

113 – Прикладна математика

11 – Математика та статистика

Подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії
Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей,
результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

_____/Польовий В.Є./
(підпис, ініціали та прізвище здобувача)

Науковий керівник Костробій Петро Петрович, д. ф.-м. н., професор
(прізвище, ім'я, по-батькові, науковий ступінь, вчене звання)

Львів – 2021

АНОТАЦІЯ

Польовий В. Є. Моделювання поширення плазмон-поляритонних хвиль в шаруватих структурах. — Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 113 “Прикладна математика” (11 “Математика та статистика”).
– Національний університет “Львівська політехніка”, Львів, 2021.

Дисертаційна робота присвячена дослідженню процесу поширення поверхневих плазмон-поляритонних хвиль в гетерогенних структурах діелектрик/метал/діелектрик на границі діелектрик/метал та впливу на них товщини металевого прошарку, умови електронейтральності та кулонівських кореляцій електронів металу.

Шляхом математичного моделювання залежності частоти від хвильового вектора розглянуто різні металеві прошарки, такі як срібло (Ag), золото (Au), алюміній (Al), для яких характерна висока концентрація носіїв заряду. Ці металеві прошарки затиснуті між діелектриками, якими можуть бути вакуум, SiO_2 чи інші полімерні сполуки тощо. Для знаходження частотного спектру (або дисперсійного спектру) в усіх випадках початково розв’язується система макроскопічних рівнянь Максвела для кожного окремо взятого середовища. Застосувавши інтегральне перетворення Фур’є спочатку за часовою змінною t , а потім і за координатами (x, y) в площині металевого прошарку дає в результаті систему хвильових рівнянь. У випадках, коли металевий прошарок розглядається як двовимірна електронна система діелектрична проникність якої залежить тільки від часової змінної/частоти (система характеризується тільки часовою дисперсією), хвильове рівняння в області металу має аналітичний розв’язок. У випадках, коли ж діелектрична проникність металу є також функцією координат (системі властива просторова дисперсія) для отримання аналітичного розв’язку необхідно формулювати додаткові модельні припущення. Отримані розв’язки, в кожному з описаних випадків, зшиваються між собою використовуючи умови неперервності електромагнітних полів на границях середовищ. Із цих

умов в подальшому отримується дисперсійне рівняння для обчислення значень частотного спектру плазмонів.

Для знаходження частотного спектру плазмонних хвиль важливо змоделювати металевий прошарок [80]. У значній кількості робіт з дослідження поширення плазмонних хвиль з цією метою використовується класична теорія Друде-Лоренца. Попри всі недоліки цієї моделі [80, 81], зокрема нехтування взаємодією електронів та іонів ґратки, припущення, що довжина вільного пробігу електронів не залежить від температури, ця модель для металевих прошарків, товщина яких не є нанорозмірною, дає доволі хороше узгодження з експериментальними даними. При математичному моделюванні на першому етапі плазмонний спектр розраховано для моделі Друде та порівняно із результатами, отриманими для квантової моделі хаотичних фаз (RPA). Металевий прошарок, в цьому випадку, розглянуто як 2D електронну систему площа якої є безмежно великою в порівнянні з розміром досліджуваної системи вздовж OZ . Результати моделювання показали, що для малих значень хвильового вектора значення частотного спектру в обох випадках практично співпадають, проте значно відрізняються для більших значень хвильового вектора. Ці результати узгоджуються з результатами отриманими в інших працях оглянутими в ході виконання цього дослідження.

Наступним завданням цієї роботи було дослідження впливу просторової дисперсії на поведінку частотного спектру, зокрема для випадку атомно-тонких металевих плівок. У цій моделі метал розглядається як електронний газ поміщений у потенціальну яму, стінками якої є діелектричні середовища. Ця модель дозволяє дослідити залежність діелектричної проникності від z координати та врахувати залежність поведінки частотного спектру від товщини металу. Оскільки, в запропонованій математичній моделі поширення плазмонних хвиль, як уже зазначалось, дисперсійне рівняння залежить від розв'язку хвильового рівняння, то для отримання аналітичних їх розв'язків застосовано розклад магнітної напруженості поля за малим параметром, де у ролі малого параметру взято відношення між реальною діелектричною проникністю та її усередненням по z координаті. Результати отримані з допомогою математичного моделювання для структури параметри якої

відповідають гетерогенній плазмонній конфігурації $SiO_2/Ag/Si$ показують, що для металевих плівок, товщина яких вимірюється в атомних моношарах, результати для моделі побудованої тут краще узгоджуються з експериментальними даними в порівнянні з моделлю Друде та при збільшені кількості моношарів прямує знизу до значень розрахованих в рамках моделі Друде для однакових фізичних параметрів областей досліджуваних структур.

Попри те, що побудова моделі, яка дозволила вивчити вплив товщини металу на частотний спектр плазмонних хвиль наблизила результати моделювання до експериментальних даних, подальше покращення результатів моделювання виявилось необхідним. Для цього було розглянуто додаткові модельні припущення щодо того, які фізичні явища та процеси можуть краще описати об'єкт дослідження та покращити отримані результати. Принагідно необхідно зауважити, що усі наступні розглянуті фізичні процеси мають квантову природу та пов'язані з поведінкою електронів в металевій системі та їхнім проникненням в зони діелектриків на границях дотику з металевим прошарком.

З численних досліджень відомо, що для нанорозмірних атомно-тонких металевих плівок квантово розмірні ефекти відіграють суттєву роль в поведінці металевої системи тому логічним є припущення, що врахування цих ефектів так само вплинуть на поведінку плазмонної хвилі, яка поширюється по поверхні металу. Початково запропоновано розглянути вплив проникнення електронів в шар діелектрика через коректне врахування умови електронейтральності в рамках моделі “желе” для системи електронів через доведений факт, який полягає в тому, що ширина потенціальної ями є більшою від товщини металу. У різних розвідках показано, що таке врахування веде до отримання коректних значень для хімічного потенціалу μ та осциляційної картини його поведінки в залежності від товщини металу. Оскільки від хімічного потенціалу залежать значення хвильового вектора Фермі, який в свою чергу визначає число рівнів розмірного квантування в металі. Застосування описаної моделі до розрахунків параметрів системи показали значне покращення узгодження із експериментальними даними для SiO_2Ag/Si та, більш того, показано, що частотний спектр плазмона повторює залежну від товщини характерну осциляційну поведінку хімічного потенціалу.

Додатково показано, що характер такої картини в значній мірі залежить від концентрації вільних носіїв заряду в металі. Також відзначається помітне згасання амплітуди осциляцій зі збільшенням товщини металевої плівки.

Подальше удосконалення моделі полягає у спробі врахувати вплив електрон-електронної взаємодії (кулонівських кореляцій). В умовах описаних раніше досліджено електронну систему та знайдено значення для хімічного потенціалу з врахуванням цієї взаємодії. Варто тут одразу зазначити, що розгляд впливу кореляцій обмежується тут їх вкладом у хімічний потенціал та нехтується цим вкладом в усі інші параметри системи. Отримані результати математичного моделювання дають добре узгодження з експериментальними даними передовсім за рахунок того, що розраховані значення для хімічного потенціалу атомно-тонкої металевої плівки найкраще відповідають реальним даним. Відмічена вище осциляційна поведінка частотного спектру спостерігається і в цих умовах, але характеризується значно більшою амплітудою в залежності від товщини металевої плівки та, відповідно, кількості рівнів розмірного квантування.

Суть дослідження поширення плазмон-поляритонних хвиль в структурах діелектрик/метал/діелектрик в цій роботі полягає у послідовному процесі побудови математичної моделі, починаючи від розгляду металевого прошарку як 2D провідної системи та застосування класичних і квазікласичних моделей провідності до врахування в функції діелектричної проникності квантових ефектів, які раніше не брались до уваги. Такий підхід дозволив показати як і в яких умовах достатнім є використання класичних підходів і які є їх межі застосування, та при яких умовах варто ускладнювати математичну модель ефектами, які важливі тільки для систем із певною розмірністю. Показано, що врахування просторової дисперсії та коректне застосування умови електронейтральності для наближення незалежних електронів дає помітно краще узгодження з експериментом та виявляє специфічну характерну поведінку частотного спектру. Відхід же від розгляду електронної системи як невзаємодіючої, а точніше, врахування кулонівських кореляцій, дає найкраще узгодження з-поміж усіх розроблених у цій роботі моделей. Основним практичним здобутком проведеного дослідження є встановлення факту, що для атомно-тонких металевих плівок необхідно враховувати квантову

природу поведінки електронів в металі і це дозволяє краще розуміти природу досліджуваного процесу та отримати якісно та кількісно кращі результати.

Ключові слова: плазмоніка, поверхневі плазмон-поляритони, дисперсійне рівняння, діелектрична проникність металу, атомно-тонка металева плівка, математичне моделювання поширення поверхневих плазмон-поляритонів, електронейтральність, кулонівські кореляції.

ABSTRACT

Polovyi V. Ye. Modeling of plasmon-polariton propagation in stratified structures. – Qualification scientific work on the rights of a manuscript.

The thesis for the Philosophy Doctor (Ph.D.) degree in specialty 11 “Applied Mathematics” (11 “Mathematics and Statistics”). – Lviv Polytechnic National University, Lviv, Ukraine, 2021.

The dissertation is devoted to the research of the process of propagation of surface plasmon-polariton waves in heterogeneous dielectric/metal/dielectric structures at the dielectric/metal boundary and the influence of metal layer thickness, electroneutrality conditions, and Coulomb correlations of electrons in a metal.

Various metal layers, such as silver (*Ag*), gold (*Au*), aluminum (*Al*), which are characterized by a high concentration of charge carriers, are considered by mathematical modeling of the dependence of frequency on the wave vector. These metal layers are sandwiched between dielectrics, which may be a vacuum, *SiO*₂ or other polymeric compounds and the like. To find the frequency spectrum (or dispersion spectrum) in all cases, we initially solved the system of Maxwell’s macroscopic equations for each medium. Applying the integral Fourier transform first for the time variable t and then for the coordinates (x, y) in the plane of the metal layer results in a system of wave equations. In cases when we consider the metal layer as a two-dimensional electronic system whose dielectric constant depends only on the time variable/frequency (the system is characterized only by a time dispersion), the wave equation in the metal region has an analytical solution. In cases when the dielectric constant of the metal is also a function of coordinates (the system is characterized by a spatial dispersion) to obtain an analytical solution, it is necessary to formulate additional model assumptions. The obtained solutions in each of the mentioned cases are connected using the conditions of continuity of electromagnetic fields at the boundaries of the media. From these conditions, we obtain the dispersion relation for the calculation of values of a frequency spectrum of plasmons.

To find the frequency spectrum of plasmon waves it is important to model the metal layer [80]. We used the classical Drude-Lorentz theory for this purpose in

a significant number of works on the study of the propagation of plasmon waves. Despite all the shortcomings of this model [80, 81] in particular, the neglect of the interaction of electrons and lattice ions, the assumption that the free path of electrons does not depend on temperature, this model for metal layers with thickness bigger than nanoscale gives a fairly good agreement with experimental data. During mathematical modeling in the first stage, the plasmon spectrum was calculated for the Drude model and compared with the results obtained for the quantum Random Phase Approximation (RPA) model. In this case, we consider the metal layer as a 2D electronic system with area that is infinitely big compared to the size of the studied system along OZ . The simulation results showed that for small values of the wave vector the values of the frequency spectrum in both cases are almost the same but differ significantly for larger values of the wave vector. These results are consistent with the results obtained in other works reviewed in this study.

The next goal of this work was to study the effect of a spatial dispersion on the behavior of the frequency spectrum, in particular for the case of atomically thin metal films. In this model, we considered the metal as an electron gas placed in a potential well, the walls of which are dielectric media. This model allows us to investigate the dependence of the dielectric constant on the z coordinate and take into account the dependence of the frequency spectrum behavior on the thickness of the metal. Since in the proposed mathematical model, the propagation of plasmon waves, as already noted, the dispersion relation depends on the solution of the wave equation. Then to obtain analytical solutions for these equations, we used the expansion of the magnetic field strength into a series on powers of a small parameter. This parameter is the ratio between the real dielectric constant and its average value calculated along the z coordinate. Mathematical modeling for the structure with parameters that correspond to the heterogeneous plasmonic configuration $SiO_2/Ag/Si$ show that for metal films with a thickness that is measured in atomic monolayers, the results for our model have better agreement with experimental data compared to the Drude model and with the increasing number of monolayers goes from the bottom to the values calculated for the Drude model with the same physical parameters for the areas of the studied structures.

Although the construction of the model, which allowed to study the influence

of metal thickness on the frequency spectrum of plasmon waves, brought the simulation results closer to the experimental data, further improvement of the simulation results was necessary. To do this, we considered additional model assumptions as to which physical phenomena and processes can better describe the object of study and improve the results obtained. It should be noted that all the following physical processes are quantum in nature and are related to the behavior of electrons in the metal system and their penetration into the dielectrics zones at the boundaries of contact with the metal layer.

Numerous studies have shown that for nanoscale atomic-thin metal films, quantum-dimensional effects play a significant role in the behavior of the metal system, so it is logical to assume that these effects will also affect the behavior of the plasmon wave propagating on the metal surface. It was initially proposed to consider the effect of electron penetration into the dielectric layer due to the correct consideration of the electroneutrality condition in the "jellium" model for the electron system due to the proven fact that the width of a potential well is greater than the metal thickness. Various investigations have shown that such consideration yields the correct values for the chemical potential μ and the oscillating picture of its behavior depending on the thickness of the metal. Because the values of the Fermi wave vector depend on the chemical potential, which in turn determines the number of levels of dimensional quantization in the metal. The application of the described model to the calculations of the system parameters showed a significant improvement in the agreement with the experimental data for *SiO₂/Ag/Si* and, moreover, it was shown that the plasmon frequency spectrum repeats the thickness-dependent characteristic oscillating behavior of the chemical potential. Additionally, it is shown that the nature of such a picture largely depends on the concentration of free charge carriers in the metal. There is also a noticeable attenuation of the amplitude of oscillations with increasing thickness of the metal film.

Further improvement of the model is an attempt to study the influence of electron-electron interaction (Coulomb correlations). Under the conditions described earlier, the electronic system was investigated and the value for the chemical potential was found taking into account this interaction. It should be noted here that the consideration of the influence of correlations is limited here by

their contribution to the chemical potential and we neglect this contribution to all other parameters of the system. The obtained results give good agreement with the experimental data, primarily because the calculated values for the chemical potential of the atomically thin metal film best correspond to the experimental data. The above-mentioned oscillating behavior of the frequency spectrum is observed in these conditions but is characterized by a much larger amplitude depending on the thickness of the metal film and, accordingly, the number of levels of dimensional quantization.

The essence of the study of the propagation of plasmon-polariton waves in dielectric/metal/dielectric structures in this work is the sequential process of building a mathematical model, starting from the consideration of the metal layer as a 2D conducting system and the application of classical and quasi-classical conductivity models, which were not previously taken into account. This approach allowed us to show how and under what conditions the use of classical approaches is sufficient and what are their limits of application, and under what conditions it is necessary to complicate the mathematical model with effects that are important only for systems with a certain dimension. Showed that taking into account the spatial dispersion and the correct application of the electroneutrality condition for the approximation of independent electrons gives a significantly better agreement with the experiment and reveals a specific characteristic behavior of the frequency spectrum. The departure from the consideration of the electronic system as non-interacting, or rather, taking into account Coulomb correlations, gives the best agreement among all the models developed in this paper. The main practical achievement of the study is to establish the fact that for atomically thin metal films it is necessary to take into account the quantum nature of the behavior of electrons in metal and it allows to better understand the nature of the process and get better and quantitatively better results. The main practical achievement of the study is to establish the fact that for atomically thin metal films it is necessary to take into account the quantum nature of the behavior of electrons in the metal and it leads to a better understanding of the nature of the process and yields qualitatively and quantitatively better results.

Keywords: plasmonics, surface plasmon polaritons, dispersion relation, dielectric constant of metal, atomically thin metal film, mathematical modeling

of surface plasmon-polariton propagation, electroneutrality, Coulomb correlations.

Список публікацій здобувача

1. Kostobij P., Polovyi V., Pavlysh V., Nevinskyi D. SPP waves in “dielectric-metal-dielectric” structures: influence of exchange correlations // Math. Model. Comput. 2018. Vol. 4, no. 2, P.148-155.
2. Kostobij P., Polovyi V. Surface plasmon polaritons in dielectric/metal/dielectric structures: metal layer thickness influence // Math. Model. Comput. 2019. Vol.6, no.1, P. 109-115.
3. Kostobij P., Markovych B., Polovyi V. Influence of the electroneutrality of a metal layer on the plasmon spectrum in dielectric-metal-dielectric structures // Math. Model. Comput. 2019. Vol.6, no.2, P. 297-303.
4. Kostobij P., Markovych B., Polovyi V. Frequency spectrum of surface plasmon-polariton waves: influence of Coulomb correlations // Math. Model. Comput. 2020. Vol.7, no.1, P. 140-145.

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

5. Kostobij P., Polovyi V. Plasmon-polariton waves in the structures “dielectric-metal-dielectric”: Experiment and modeling // XIth International Scientific and Technical Conference Computer Sciences and Information Technologies (CSIT), 2016, P. 208-211.
6. Костробій П. П., Польовий В. Є. Поширення плазмон-поляритонних хвиль в структурах діелектрик-метал-діелектрик // Сучасні проблеми математичного моделювання, обчислювальних методів та інформаційних технологій, 2-4 березня 2018 року, Рівне, Україна, 2018, С. 57-58.
7. Kostobij P., Polovyi V. Influence of the thickness of a metal nanofilm on the spectrum of surface plasmons // IEEE 15th International Conference on the Experience of Designing and Application of CAD Systems (CADSM), 26 Feb.-2 March 2019, Polyana, Ukraine, 2019, P. 1-4.

8. Kostobiy P., Polovyi V. The influence of the electroneutrality of the metal layer on the plasmon spectrum in "dielectric-metal-dielectric" structures // Modeling, Control and Information Technologies: Proceedings of International Scientific and Practical Conference, (3), 14-16 November, Rivne, Ukraine, 2019, P. 141-144.
9. Kostobiy P., Polovyi V. The behaviour of the surface plasmon spectrum in heterogeneous structures depending on the thickness of the metal layer // Nanotechnology and nanomaterials (NANO-2019) : international research and practice conference, 27–30 August 2019, Lviv, Ukraine : book of abstracts, 2019, P. 533.
10. Kostobiy P., Polovyi V. The behaviour of the surface plasmon spectrum in heterogeneous structures depending on the thickness of the metal layer // Nanotechnology and nanomaterials (NANO-2020) : international research and practice conference, 26–29 August 2020, Lviv, Ukraine : book of abstracts, 2020, P. 501.
11. Костробій П. П., Маркович Б. М., Польовий В. Є. Частотний спектр плазмон-поляритонних хвиль: вплив кулонівських кореляції // 16-та Відкрита наукова конференція Інституту прикладної математики та фундаментальних наук (ІМФН) : збірник матеріалів конференції, 6–7 лютого, Львів, 2020 р, 2020, С. 85–86.
12. Kostobij P., Polovyi V. Markovych B. Modeling of a Surface Plasmons Frequency Spectrum in Dielectric/metal/dielectric Structures: the Influence of the Coulomb Correlations // IEEE 15th International Conference on Computer Sciences and Information Technologies (CSIT), 23-26 Sept. 2020, Zbarazh, Ukraine, 2020, P. 1-4.
13. Kostrobij P., Markovych B., Polovyi V. Frequency spectrum of surface plasmon-polariton waves: influence of Coulomb correlations. // XXII International Seminar on Physics and Chemistry of Solids, June 17-19, 2020 Lviv, Ukraine, P. 23.

14. Kostrobij P., Markovych B., Polovyi V. Study of SSPs Waves Frequency Spectrum in Atomically-Thin Films: Case of Electron-Electron Interaction. // IEEE 11th International Conference “Nanomaterials: Applications & Properties” (IEEE NAP – 2021), September 5-11, 2021 Odesa, Ukraine.

Зміст

Перелік умовних позначень	17
Вступ	18
Огляд літератури	23
1.1 Схеми збудження плазмонних хвиль	26
1.2 Моделі опису плазмонних хвиль та провідного середовища . . .	29
1.2.1 Модель Друде діелектричної проникності металу	31
1.2.2 Квазікласичні підходи до моделювання поширення плазмон-поляритонних хвиль в шаруватих структурах .	34
1.3 Числові методи дослідження плазмонних хвиль	39
1.3.1 Метод фур'є-мод	39
1.3.2 Метод трансфер-матриці	41
2 Математичне моделювання поширення плазмон-поляритонних хвиль в структурах діелектрик/метал/діелектрик	44
2.1 Результати експериментальних досліджень	44
2.2 Постановка задачі поширення плазмон-поляритонних в структу- рах діелектрик/метал/діелектрик	45
2.3 Висновки	58
3 Квантові моделі поширення плазмон-поляритонних хвиль в шаруватих структурах	59
3.1 Квантові методи опису діелектричної функції металевого прошарку в шаруватих структурах	60

3.2	Квантові моделі діелектричної функції металевого прошарку з врахуванням просторової дисперсії	63
3.3	Дослідження впливу умови електронейтральності та кулонів- ських кореляцій на спектр плазмон-поляритонних хвиль	70
3.3.1	Умова електронейтральності	71
3.3.2	Кулонівські кореляції	79
3.4	Висновки	85
4	Математичне моделювання поширення плазмон- поляритонних хвиль в реальних структурах діелектрик/метал/діелектрик	88
4.1	Плазмон-поляритонні хвилі для випадку надтонких металевих прошарків	88
4.2	Врахування товщини металевого прошарку на спектр плазмон- поляритонних хвиль	92
4.3	Висновки	97
	Висновки	98
	Список використаної літератури	101
	Додатки	115
A	Тексти комп'ютерних програм	115
A.1	Розрахунок моделі Друде та RPA для 2D металевого прошарку	115
A.2	Розрахунок з врахуванням товщини АТМП	116
A.3	Розрахунок з врахуванням квантових ефектів	117

Перелік умовних позначень

ППХ - полазмон-поляритонна хвиля

АТМП - атомно-тонка металева плівка

ДМД - діелектрик/метал/діелектрик

ДАД - діелектрик/АТМП/діелектрик

МШ/МЛ - моношар

РРА - наближення випадкових фаз

DFT - теорія функціоналу густини

$\nabla \cdot$ - оператор дивергенції

$\nabla \times$ - оператор ротора

Вступ

Актуальність теми. Попри те, що два основних об'єкти вивчення науки плазмоніки *поверхневі плазмон-поляритони* та *локалізовані поверхневі плазмон-поляритони* почали вивчатися ще на початку 1990-х [1], зокрема в працях та А. Зоммерфельда [2], Й. Ценніке [3] та Вуда [4], й тепер поверхневі плазмон-поляритони відкриваються для застосування у різноманітних контекстах і сферах, та знаходять дедалі нові застосування.

На сучасному етапі, плазмоніка завдячує своєму стрімкому розвитку тому, що для вивчення явищ, які описує ця наука наявні усі необхідні засоби, а саме: технології для побудови структур у наномасштабах, високоточні та високочутливі оптичні технології для виміру характеристик, потужні у обчислювальному плані засоби моделювання.

Базовим застосуванням плазмон-поляритонних хвиль в так званих плазмонних структурах (тобто, структурах, в яких збуджуються плазмони) є створення на їхній основі компактних високочутливих оптичних хвилеводів [1, 5], плазмонних біосенсорів [6–8], призначених для вивчення різноманітних аналізів на наявність домішкових речовин, ДНК та дії ліків у реальних відрізках часу тощо, робота яких заснована на ефекті резонансу поверхневих плазмонів [9] та пристроях лазерної стетоскопії [10]. Також, оскільки, на наномасштабах плазмони характеризуються високою локалізацією та зростанням інтенсивності, то перспективною галуззю є керування хвилями світла саме на наномасштабах. Додатково варто відзначити, що ще одним важливим застосуванням плазмоніки є використання в якості провідного матеріалу планарного графену [11–15], який забезпечує високу активність носіїв заряду [13,16] та, як наслідок, веде до менших втрат плазмонів [14,15,17].

Ще одне перспективне застосування плазмоніки, яке власне нас у цій роботі й найбільше цікавитиме, – це використання для збудження

плазмонних хвиль гетерогенних структур метал-діелектрик, зокрема таких як, діелектрик/метал, метал/діелектрик чи діелектрик/метал/діелектрик [1, 18–25, 27]. Використання різних матеріалів для металу чи діелектриків дають змогу отримати плазмонні хвилі з різними інтегральними характеристиками, як-от частотою чи довжиною поширення.

Зважаючи на широту застосування, різноманітні властивості цих хвиль та згадану уже наявність необхідного інструментарію для проведення досліджень як математичного так й експериментального, ця тематика також притягує увагу багатьох вчених експериментаторів [25, 27, 29–32].

Мета і задачі дослідження. У якості *об'єкта* дослідження вибрано колективні збудження електронної густини на поверхні металу – плазмон-поляритонні хвилі (ППХ) у гетерогенних структурах діелектрик/метал/діелектрик (ДМД).

Предметом дослідження є поширення ППХ у ДМД, та вплив кулонівських кореляцій на частотний спектр ППХ, де діелектрики розглянуто як абсолютно непровідні середовища, а металеві прошарки є атомно-тонкі металеві плівки (АТМП).

Мета роботи – моделювання процесів збудження та поширення ППХ, вивчення залежності поведінки ППХ від характеристик матеріалів структури, як-от діелектричних проникностей середовищ, товщини АТМП, кулонівських кореляцій.

Для досягнення мети сформульовано такі *завдання*:

- вивчення впливу частотної та просторової дисперсії (нестационарності) на поширення ППХ;
- встановлення залежності між товщиною металевого прошарку та поведінкою частотного спектру ППХ;
- формулювання альтернативного до моделі Друде чи апроксимації випадкових фаз (RPA) підходу до опису діелектричної проникності металу в контексті її впливу на частотний спектр;
- дослідження впливу умови електронейтральності та міжелектронної взаємодії (кулонівських кореляції).

Щодо **методів дослідження**, то для пошуку вирішення поставлених завдань проведено етап побудови базової математичної моделі досліджуваного явища із подальшим доповненням, спрощенням чи ускладненням отриманої моделі, в залежності від частини або характеристики процесу, на якій акцентувалась увага про виконанні конкретно взятого завдання. Зокрема, було використано класичні методи макроскопічної електродинаміки, квантово механічні методи дослідження поведінки електрона в просторово-обмежених структурах.

Математичну модель та усі її одержані варіації перенесено у програмний код і проведено етап комп'ютерного моделювання. Це дозволило отримати частотний спектр для кожного випадку та, в окремих випадках, довжину поширення ППХ.

Верифікацію одержаних результатів проведено як порівнюючи їх з експериментальними даними для аналогічних структур, так і використовуючи апробовані методи математичного моделювання, а також в ході презентацій та обговорення на наукових конференціях, зокрема й міжнародних.

Наукова новизна одержаних результатів полягає у розв'язанні наукового завдання розвитку математичних методів моделювання поширення плазмонних збуджень в структурах з атомно-тонким провідним прошарком. За результатами дисертаційної роботи визначено межі застосування моделі Друде діелектричної проникності металевого прошарку, якщо їхня товщина становить від кількох до десятків атомних моношарів (МШ) і в паралельному встановленні факту переваги застосування квантовомеханічного опису діелектричної проникності в цьому конкретному випадку.

- Вперше доведено необхідність врахування квантоворозмірних ефектів при розгляді АТМП.
- Вперше показано вплив умови електронейтральності в металі на частотний спектр ППХ.
- Вперше показано вплив кулонівських кореляцій в металі на частотний спектр ППХ.

- Вперше відзначено, що поведінка спектру залежить як від товщини АТМП та кулонівських кореляцій.

Практичне значення отриманих результатів полягає у отриманні картини поширення ППХ на поверхні ультратонких металевих прошарків. Отримані результати, на думку автора, доповнюють уявлення про природу виникнення та поширення ППХ у ДМД структурах та показують взаємозв'язок цього явища з іншими фізичними явищами.

Особистий внесок здобувача. Задачі дослідження було сформульовано науковим керівником роботи доктором фізико-математичних наук, завідувачем кафедри прикладної математики П. П. Костробієм. У спільних публікаціях автором самостійно виконано:

- аналітичне дослідження задачі поширення ППХ у гетерогенній плазмонній ДМД структурі, на основі системи рівнянь Максвелла та умов неперервності електромагнітних полів при різних варіантах опису елементів структури [33];
- розраховано та порівняно значення частотного спектру ППХ для моделей Друде та хаотичних фаз провідності металевого прошарку [33, 37, 38];
- розглянуто та досліджено різноманітні квантові підходи до опису АТМП з врахуванням просторової дисперсії;
- досліджено залежність частотного спектру ППХ від товщини металевого прошарку в рамках опису АТМП для наближення невзаємодіючих електронів та розгляду тензора діелектричної проникності, а отримані результати порівняно із результатами одержаними для моделі Друде та експериментальними даними [34, 39, 41];
- вивчено вплив умови електронейтральності на характеру поведінку частотного спектру ППХ та порівняно з експериментальними даними [35, 40, 43].

- розглянуто модель поведінки електронів в АТМП з врахуванням кулонівських кореляції та розраховано їх вплив на досліджувану систему [36, 42–46].

Отримані результати обговорювались, аналізувались, інтерпретувались автором цього дослідження та співавторами публікацій колективно.

Апробація результатів дослідження. Основні результати дослідження доповідались та обговорювались на конференціях та семінарах: 11th, 15th International Scientific and Technical Conference Computer Sciences and Information Technologies (Львів, 2016 та Збараж, 2020), International Conference on the Experience of Designing and Application of CAD Systems (CADSM) (Поляна, 2019), Modeling, Control and Information Technologies: Proceedings of International Scientific and Practical Conference (Півне, 2019), Nanotechnology and nanomaterials (NANO) (Львів, 2019 та 2020), 16-та Відкрита наукова конференція Інституту прикладної математики та фундаментальних наук (Львів, 2020), XXII International Seminar on Physics and Chemistry of Solids (Львів, 2020), IEEE 11th International Conference “Nanomaterials: Applications & Properties” (Одеса, 2021).

Публікації. Під час виконання дисертаційного дослідження опубліковано 14 наукових праць, з них: 4 статті у фахових наукових виданнях (індексовані у Scopus) [33–36, 46] та 10 тез коференцій та семінарів [37–43].

Структура та обсяг дисертації. Дисертаційна робота складається із анотації, вступу, чотирьох розділів основної частини, загальних висновків, списку використаних джерел із 171 найменувань, 1 додатку, містить 40 рисунків, 5 таблиць. Повний обсяг дисертації 120 сторінок.

Огляд літератури

У цьому розділі наведено огляд робіт, здійснений під час написання цього дослідження, тематика яких стосується як і математичних моделей збудження та поширення плазмон-поляритонних хвиль в різноманітних гетерогенних плазмонних структурах так і, частково, основних аспектів експериментальних методів дослідження. Акцентовано увагу на тому, які основні характеристики та властивості дослідники цієї тематики беруть до уваги та намагаються отримати в своїх роботах. Розглянуто існуючі методи та моделі опису поширення цих хвиль, вказано їхні переваги, недоліки та межі застосування. В основному зосереджено увагу на структурах діелектрик/метал/діелектрик чи інших схожих за характеристиками об'єктах вивчення.

На сучасному етапі розвитку мікроелектроніки існують технологічні можливості для виготовлення плоских періодичних структур з металевих елементів складної форми на діелектричній підкладці, характерні розміри яких співмірні з довжинами хвиль ближнього інфрачервоного і навіть оптичного діапазонів. Такі структури, так звані планарні метаматеріали, дають можливість контролювати електромагнітні поля, а дослідження їх властивостей може привести до створення нового покоління компонентів пристроїв фотоніки.

У даний час актуальною є розробка методів дослідження наноструктурованих середовищ і управління їх основними характеристиками. Сучасні технологічні можливості створення наноструктур виводять процеси взаємодії випромінювання і речовини на масштаби, менші довжини хвилі світла. Фотонні структури, що поєднують функціональність і компактність, цікаві для створення нових пристроїв, в яких відбувається ефективне управління процесом взаємодії світла з речовиною.

Як відомо, при взаємодії електромагнітного випромінювання із провідним

середовищем поле неглибоко проникає у нього (так зване явище скін-ефекту [1]). Це правило для металів виконується у доволі широкому інтервалі частот. При цьому, у метал проникає лише незначна частина випромінювання, що падає на нього. Проте, у ближньому інфрачервоному та діапазоні видимого світла властивості металів такі, що електромагнітне поле проникає всередину металу на значно більшу глибину, аніж довжина хвилі, а дійсна частина діелектричної проникності металу набуває від'ємних значень.

Процеси поширення хвиль в електронній плазмі становлять інтерес для ряду областей фізики, таких як астрофізика, поширення радіохвиль в іоносфері, фізика газового розряду, теорія електронно-вакуумних приладів, фізика напівпровідників та теорія металів. Тому перші роботи по дослідженню хвиль у плазмі з'явилися ще в середині ХХ ст. [47–49].

Особливістю плазми, яка відрізняє її від середовищ іншої природи, полягає у існуванні у ній повздовжніх електромагнітних збуджень названих плазмовими хвилями. Плазмони – кванти хвиль електронної густини, що виникають в твердих тілах або поблизу їх поверхні внаслідок колективних коливань електронів провідності відносно іонів. Такі плазмові коливання, які пов'язані із коливаннями електронів в об'ємі кристалу називають об'ємними плазмовими коливаннями або об'ємними плазмонами.

Термін **плазмон** був введений в 1952 році американськими фізиками Д. Пайнсом і Д. Бомом [50, 51] для дослідження далекосяжних електрон-електронних кореляцій та при теоретичному описі характеристичних втрат енергії електронами, що проходять крізь метали [52]. У розвинутій ними теорії, ці втрати приписують колективним коливанням вільних електронів у металі, які були названі “плазмовими хвилями”. Ця теорія базується на подібності електронного газу металу із класичною плазмою і відрізняється від моделі класичної плазми тим, що концентрація електронів у електронній плазмі металу є великою ($n_e \approx 5 \cdot 10^{22} \text{см}^{-3}$), а температура – дуже низькою ($T < T_F$), тому до її опису слід застосовувати квантову статистику, а не класичну. Тому електронний газ металу при низьких температурах слід розглядати як квантову плазму, а її колективна поведінка проявляється у екрануванні поля зарядів та у плазмових коливаннях.

Оскільки плазмони – це квантовані класичні плазмові коливання,

більшість їх властивостей можна одержати безпосередньо із рівнянь Максвелла. Об'ємні плазмони описують коливання електронів провідності в об'ємі кристала. Частота плазмона дорівнює плазмовій частоті. Плазмони є квантами повздовжніх коливання електронів відносно позитивних іонів у об'ємі плазми. Загальне збудження, яке включає рух заряду і пов'язаного з ним електромагнітного поля, називають або поверхневим плазмон-поляритоном на плоскій границі, або локалізованим поверхневим плазмон-поляритоном для замкнутої поверхні малої частки.

Розрізняють об'ємні плазмони, які описують коливання електронів провідності всередині кристала, і поверхневі плазмони. Плазмони поширюються уздовж межі поділу метал-діелектрик. За своєю природою поверхневі плазмони є квантами коливань електронної густини металу, що поширюються уздовж його межі з діелектриком. Вони можуть існувати в області непрозорості металу і є сильно локалізованими в просторі на оптичних частотах. Такі коливання можуть відбуватися у двовимірних структурах, наприклад на межі метал/діелектрик. Поверхневі ж плазмони – це кванти коливань електронної густини металу, що поширюються тільки уздовж його межі з діелектриком.

У твердих тілах, світло частота якого менша від плазмової частоти не буде проникати в тверде тіло, тоді як світло частота якого переважає плазмову може проникати всередину нього. При проникненні електромагнітної хвилі в матеріальне середовище відбувається формування нової хвилі, що розповсюджується по речовині. Відмінність нової хвилі від вихідної полягає в тому, що при її поширенні відбуваються процеси, пов'язані не тільки з коливаннями електричного і магнітного полів, а й з рухом заряджених частинок усередині речовини.

Поляритони є складеними квазічастинками, які виникають внаслідок взаємодії фотонів з елементарними збудженнями середовища – оптичними фононами, екситонами, плазмонами, магнонами та іншими, які називаються відповідно фонон поляритонами, екситонними поляритонами (світлоекситонами), і так далі. Взаємодія електромагнітних хвиль із збудженнями середовища, які призводять до їх зв'язного стану, стає найсильнішим, коли одночасно їх частоти і хвильові вектори співпадають (резонанс).

У цьому випадку утворюються зв'язані хвилі, тобто поляритони, які мають характерний законом дисперсії $\omega(k)$. Їх енергія складається частково з електромагнітної і частково з енергії власних колективних збуджень середовища. Існування поляритонів створює передумови для поширення в кристалі поздовжніх електромагнітних хвиль.

Експериментально поверхневі електромагнітні хвилі на границі з металом було виявлено Робертом Вудом в 1901 році, як аномалії у спектрах відбивання від металевих дифракційних ґраток і відомі як ґратчасті аномалії Вуда [53, 54]. Їх інтерпретація здійснена У. Фано у 1941р., який пов'язав аномалії із збудженням поверхневих хвиль, однак, не прояснивши природу цих хвиль [55]. Вперше узгоджене розповсюдження коливань оптичних фононів й електромагнітної хвилі, тобто спектр поляритонів, було теоретично досліджено К.Б. Толпиго і К. Хуангом [56, 57].

Детальніше дослідження поверхневих плазмон-поляритонних хвиль було виконано пізніше Р. Річі. Досліджуючи спектри характеристичних втрат енергії електронів він в роботі [58] вперше показав, що в тонких металевих плівках плазмонні хвилі можуть розповсюджуватися близько до поверхні металу. В даний час активно вивчаються плазмонні метаматеріали – наноструктури, що включають в себе металеві та діелектричні шари, та мають властивості, які відрізняються від матеріалів, що зустрічаються в природі. Типовим прикладом є структури з негативними значеннями діелектричної та магнітної проникностей.

1.1 Схема збудження плазмонних хвиль

Оскільки плазмові коливання мають поздовжню поляризацію [1, 51], то для їх **збудження** не можна застосувати поперечні електромагнітні хвилі. Проте, збудження об'ємних плазмонів можна здійснити напрямленим потоком частинок.

Поверхневі плазмон-поляритони можна збуджувати електронами або фотонами. При використанні фотонів це неможливо зробити безпосередньо, але можна реалізувати з допомогою призми, ґратки чи дефекта на поверхні металу.

Метод вимірювання енергетичних втрат, які виникають внаслідок дифракції на тонких плівках металу є поширеним методом збудження повздовжніх плазмових хвиль. Коли електрони розсіюються, їх енергія передається в об'ємну плазму. Складова вектора розсіювання, паралельна поверхні, призводить до утворення поверхневого плазмон-поляритона. Експериментально існування цих збуджень проявляється у появі додаткового піку в спектрі енергетичних втрат. Зазначимо, що якщо в експериментах з використанням низькоенергетичних пучків електронів можна виявити поверхневі плазмони, то аналіз спектру енергетичних втрат швидких електронів, що пройшли через тонкі плівки металу дає змогу дослідити закон дисперсії плазмонів. Для збудження поверхневих плазмон-поляритонів з допомогою електромагнітних хвиль необхідні спеціальні методи узгодження, як то метод ґраткового введення, або призмового введення. Щоб фотон збудив поверхневі плазмон-поляритони вони обидва повинні мати однакову частоту та імпульс. Однак для даної частоти вільний фотон має менший імпульс, ніж поверхневий поляритон, тому що їхні закони дисперсії – різні. Ця невідповідність імпульсів є причиною того, що вільний фотон в просторі не може безпосередньо утворювати зв'язаний стан плазмон-поляритон. З тієї ж причини поверхневий плазмон-поляритон на гладкій металевій поверхні не може випромінювати енергію у вигляді вільного фотона у діелектрик, якщо діелектрик однорідний. Ця несумісність аналогічна відсутності передачі, яке відбувається при повному внутрішньому відбиванні. Проте, зв'язування фотонів у поверхневий плазмон-поляритон можна досягнути використавши середовище зв'язку, таке як призма [63,64] або ґратка [1]. Це дозволяє узгодити хвильові вектори фотона і поверхневого плазмона.

Ґратка має періодичну структуру, яка описується своїм хвильовим вектором. Цей вектор може додаватися до хвильового вектора поверхневих плазмон-поляритонів, що сприяє зближенню графіків законів дисперсії фотона та плазмона. Ґраткове відгалуження узгоджує хвильові вектори, збільшуючи паралельну складову хвильового вектора на величину, яка відповідає періоду ґратки. Цей метод має вирішальне значення для теоретичного розуміння впливу шорсткості поверхні. Більш того, прості ізолювані поверхневі дефекти, такі як канавки, щілини або гофровані

поверхні на площині, забезпечують випромінювання у вільний простір і тому плазмони та поляритони можуть здійснювати обмін енергією, а отже, взаємодіяти. Зокрема, для металевих плівок із перфорованою поверхнею, що містить періодично розташовані отвори субхвильового розміру були встановлені аномально значні коефіцієнти проходження світла [59–62]. При різних упорядкуваннях отворів можна добитися як значного підсилення проходження світла, так і його послаблення. Такі властивості сприяють створенню різноманітних пристроїв керування світлом, які можуть бути частиною інтегральних схем та сприяти створенню оптичних елементів із наперед заданими оптичними властивостями.

Найпростішою моделлю поверхневої структури, у якій можуть виникати поверхневі плазмон-поляритони, є плоска межа розділу між непоглинаючим діелектриком із додатною дійсною частиною діелектричної проникності і провідним середовищем металу, що має від'ємну дійсну частину діелектричної проникності. Отже, поверхнева хвиля може існувати на межі розділу двох середовищ із протилежними знаками дійсних частин їх діелектричних проникностей, тобто на межі металу і діелектрика. Узгодження фаз для поверхневих плазмон-поляритонів можна досягнути для тришарової структури, що містить тонку металеву плівку між двома діелектричними шарами із різними діелектричними проникностями. У такій структурі, промінь, що відбився від межі поділу між діелектриком, який відіграє роль призми і шаром металу матиме складову імпульсу паралельну до межі поділу достатню для збудження плазмон-поляритонних хвиль на межі поділу метал-діелектрик із меншим значенням діелектричної проникності. У цій схем порушується повне внутрішнє відбивання, що і спричиняє тунельне проходження полів на границі метал-діелектрик із меншою діелектричною проникністю.

Сучасні технології дають змогу створення таких наносередовищ у яких взаємодія випромінювання відбувається у об'ємах лінійні розміри яких менші аніж довжина хвилі світла, що падає на них. Нанорозмірні пристрої фотоніки, що поєднують функціональність та компактність створюють передумови для створення таких пристроїв, які зможуть ефективно керувати процесом взаємодії світла із речовиною. І, якщо поверхневі плазмон-поляритони

поширюються вздовж плоскої межі поділу провідник- діелектрик, то в наноструктурах утворених із металу можуть існувати локалізовані поверхневі плазмон-поляритони. Вони є електромагнітною хвилею, що пов'язана із колективними збудженнями електронної плазми наночастинки. Важливо, що проблема локалізованих плазмон-поляритонів пов'язана із задачею розсіювання електромагнітних хвиль частинками металу розміри яких менші від довжини хвилі падаючого випромінювання. Крім наноструктур утворених із металів поверхневі плазмон-поляритони можна збуджувати і в діелектричних нановключеннях поміщених у середовище металу.

Іншим прикладом наносистем, у яких можливі плазмон-поляритонні збудження є так звані фотонні кристали. Це діелектричні матеріали для яких характерні періодична модуляція показника заломлення, яка реалізується додаванням у основне середовище часток із іншим значенням діелектричної проникності. Розміри часток, що додають середовище повинні бути співрозмірними із довжиною хвилі, яка поширюється у середовищі.

Ще одним типом матеріалів, для яких можна керувати фотонним відгуком є метаматеріали. У останніх розміри та періодичність розміщення центрів розсіювання значно мені від довжини хвилі, яка в них поширюється. Завдяки том, що розмір наночастинок є субхвильовим електрична і магнітна складові хвилі, яка поширюється середовищі не зв'язані між собою, а тому діелектричну та магнітну проникності можна змінювати незалежно, шляхом підбору форми розсіюючих нановключень.

1.2 Моделі опису плазмонних хвиль та провідного середовища

Взаємодію електромагнітних полів із середовищем можна описати базуючись на законах класичної електродинаміки, зокрема на рівняннях Максвелла. Навіть вивчаючи взаємодію електромагнітного випромінювання із металами аж до нанометрових масштабів, можна використавши квазікласичне наближення, оскільки енергетичний спектр електронів у металах є квазінеперервним. Тому при розгляді багатьох задач електродинаміки металів можна обмежитися класичними уявленнями і, в такий спосіб, вивчити поведінку електронів на

поверхні в залежності від частоти. Розв'язок рівнянь Максвелла для випадку немагнітних середовищ дає умови розповсюдження поперечних та поздовжніх хвиль, які відрізняються своїми законами дисперсії

Для опису таких процесів використовують систему макроскопічних рівнянь Максвелла:

$$\begin{aligned}
 \nabla \times \mathbf{H} &= \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \\
 \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\
 \nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho, \\
 \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0, \\
 \mathbf{B} &= \mu\mu_0 \mathbf{H}, \\
 \mathbf{D} &= \epsilon\epsilon_0 \mathbf{E},
 \end{aligned} \tag{1.1}$$

з відповідними краєвими умовами.

У випадку, коли властивості просторово однорідного середовища залежать від координат та часу, тобто

$$\begin{aligned}
 \mathbf{D} &= \mathbf{D}(\mathbf{r}, t), \mathbf{B} = \mathbf{B}(\mathbf{r}, t), \\
 \mathbf{r} &= (x, y, z).
 \end{aligned}$$

при застосуванні перетворення Фур'є останнє співвідношення набуває вигляду [1, 89]

$$\mathbf{D}(\mathbf{k}, \omega) = \epsilon_0 \epsilon(\mathbf{k}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega). \tag{1.2}$$

Застосувавши операцію ротора до другого рівняння системи (1.1) та врахувавши, що $\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) = i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega))$ і співвідношення (1.2), отримуємо

$$\mathbf{k}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega)) - k^2 \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) = -\epsilon(\mathbf{k}, \omega) \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega), \quad k = |\mathbf{k}|. \tag{1.3}$$

Останнє рівняння за умови $\mathbf{k} \perp \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega)$ дає закон дисперсії поперечних електромагнітних хвиль

$$\omega^2 = \frac{c^2}{\epsilon(\mathbf{k}, \omega)} k^2,$$

а за умови $\mathbf{k} \parallel \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega)$ приходимо до дисперсійного рівняння для поздовжніх

$$\epsilon(\mathbf{k}, \omega) = 0.$$

Електромагнітне поле поверхневого плазмон-поляритона в плоскошаруватому середовищі, що містить шари металу та діелектрика можна знайти із розв'язків рівнянь Максвелла при використанні умов неперервності тангенціальних складових поля на межах поділу і вимоги того, щоби поле щезало на нескінченно великій відстані від зовнішніх границь структури. Вперше опис поверхневих хвиль було здійснено при розв'язку задачі про поширення радіохвиль вздовж провідної поверхні [65].

1.2.1 Модель Друде діелектричної проникності металу

Для знаходження розв'язків отриманих рівнянь Максвелла у Фур'є представленні, зокрема, постає необхідність у моделюванні діелектричної проникності металевого прошарку $\epsilon(\mathbf{r}, \omega)$. Тут розглянуто найпростішу модель діелектричної проникності, що базується теорії металів Друде.

У випадку, коли розглядають функції діелектричної проникності та провідності металу при наявності лише частотної дисперсії

$$\epsilon \equiv \epsilon(\omega) \text{ та } \sigma \equiv \sigma(\omega) \quad (1.4)$$

оптичні властивості металу описують плазмовою моделлю або ж моделлю Друде [1]. У цій моделі електрони в металі розглядаються як вільний електронний газ в якому у одинці об'єму перебуває n_e електронів. У ній ігнорується електрон-електронною взаємодією, а електрон-іонну взаємодію із ґраткою пов'язують із дією дисипативної сили гальмування, яка характеризується частотою $\gamma = \tau^{-1}$. Величину τ [1, 80] називають часом релаксації або, який є середнім часом руху електрона по прямій без зіткнень. І, оскільки, маса іонів - дуже велика порівняно із електронами то їх вважають нерухомими.

Модель Друде отримана із розгляду дисперсної моделі Лоренца - моделі гармонічного осцилятора [80] в якому повертаюча сила та резонансна частота

дорівнюють 0. Рівняння руху електрона має такий вигляд:

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} + m\gamma \frac{d\mathbf{x}}{dt} = -e\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \quad (1.5)$$

тут m - маса електрона.

Також, оскільки густина струмів визначається як

$$\mathbf{J} = -Ne \frac{d\mathbf{x}}{dt} = -Ne\mathbf{v}, \quad (1.6)$$

що дає таке диференціальне рівняння для \mathbf{J}

$$\frac{d\mathbf{J}}{dt} + \gamma\mathbf{J} = \left(\frac{Ne^2}{m} \right) \mathbf{E}, \quad (1.7)$$

N - кількість вільних носіїв заряду із зарядом e . Розв'язок цього рівняння, якщо $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{J}_0 e^{-i\omega t}$ є таким

$$(-i\omega - \gamma)\mathbf{J}_0 = \left(\frac{Ne^2}{m} \right) \mathbf{E}_0, \quad (1.8)$$

що еквівалентно

$$(-i\omega - \gamma)\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{Ne^2}{m} \right) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t). \quad (1.9)$$

Для статичних полів $\omega = 0$

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) &= \sigma_0 \mathbf{E}, \\ \sigma_0 &= \frac{Ne^2}{m\gamma}. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Величину σ_0 називають *статичною провідністю*. Відповідна *динамічна провідність* матиме вигляд:

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - \frac{i\omega}{\gamma}}. \quad (1.11)$$

Однією з умов застосування моделі Друде є те, що зміщення осцилятора повинне бути меншим від довжини хвилі $x \ll \lambda$. Якщо, крім того, розглянути гармонічну залежність полів від часу, а саме $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t}$ та $\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_0 e^{i\omega t}$, тут \mathbf{E}_0 - електричне поле в положенні рівноваги електрона, а \mathbf{x}_0 -

комплекснозначна амплітуда, то [80]

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} + m\gamma \frac{d\mathbf{x}}{dt} = -e\mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad (1.12)$$

де, $m\gamma \frac{d\mathbf{x}}{dt}$ - сила опору рухові, $-e\mathbf{E}_0 e^{i\omega t}$ - сила, що діє з боку електричного поля. Розв'язок для зміщення \mathbf{x} має вигляд [1, 89]:

$$\mathbf{x}(t) = \frac{e}{m(\omega^2 + i\gamma\omega)} \mathbf{E}(t). \quad (1.13)$$

а поляризація $\mathbf{P} = -n_e e \mathbf{x}$ пов'язана із зміщенням електронів виражається залежністю

$$\mathbf{P} = -\frac{n_e e^2}{m(\omega + i\gamma\omega)}, \quad (1.14)$$

Останнє разом із (1.14) дає

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \epsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega} \right) \mathbf{E}, \\ \omega_p &= \sqrt{\frac{n_e e^2}{\epsilon_0 m}}. \end{aligned} \quad (1.15)$$

ω_p - плазмова частота вільного електронного газу [80]. Звідси маємо вираз для $\epsilon(\omega)$

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega}. \quad (1.16)$$

Зауважимо, що залежність між динамічною провідністю $\sigma(\omega)$ та $\epsilon(\omega)$ у цій моделі задається співвідношенням [80, 89]

$$\epsilon(\omega) = 1 + i \frac{\sigma(\omega)}{\epsilon_0 \omega}. \quad (1.17)$$

При частотах $\omega < \omega_p$ метал зберігає свої металеві властивості. А для частот таких, що $\omega\tau \gg 1$, це дозволяє знехтувати доданком $i\gamma\omega$, що дає [1, 80]

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}. \quad (1.18)$$

Як уже зазначалось у огляді, основні висліди для моделі Друде можна

отримати із рівняння Больцмана [104]:

$$\frac{df(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c, \quad (1.19)$$

де $f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)$ – функція розподілу Максвелла-Больцмана, для якої $f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ – кількість електронів у одиниці об'єму $d\mathbf{r}$, швидкість яких в межах від \mathbf{v} до $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$ у час t , а $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ – кількість електронів у одиниці об'єму $d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ (у фазовому просторі), які спрямовані в цей об'єм зіткненнями за час dt . Рівняння вказує, що швидкість зміни розподілу $f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)$ зрівноважується швидкістю її зміни за рахунок зіткнень. У найпростішій формі вираз для зіткнень має таку форму [105]:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c = \frac{f - f_0}{\tau}, \quad (1.20)$$

тут f_0 – функція розподілу в стані спокою, а f – функція розподілу нерівноважного стану, який виник внаслідок зовнішнього збурення. При розгляді моделі Друде Лоренц у своїй теорії використав для f_0 вираз для розподілу Больцмана-Максвелла [105]

$$f_0(v) = n_0 \frac{m}{2\pi\beta} e^{-\frac{\epsilon}{\beta}}, \quad (1.21)$$

в якому $n_0 = N/V$ – концентрація частинок в одиниці об'єму, $\beta = k_B T$, k_B – постійна Больцмана, $\epsilon = 1/2mv^2$. Додатково введено умову нормування

$$\int_V f_0(v)d\mathbf{v} = n_0. \quad (1.22)$$

1.2.2 Квазікласичні підходи до моделювання поширення плазмон-поляритонних хвиль в шаруватих структурах

Використання класичної статистичної механіки і розподілу Больцмана-Максвелла викликало певні проблеми у теорії побудованій Лоренцом (див. [105]). Тому Зоммерфельд використав новий на той час принцип заборони Паулі [106] та статистику Фермі-Дірака [107, 108] й розглянув електронний газ Друде з квантової точки зору.

Припустимо, що електрон поміщений у куб із стороною l , а потенціал всередині куба - постійний. Загальновідомо [98], що таку систему можна описати стаціонарним рівнянням Шредінґера

$$-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}), \quad (1.23)$$

яке має розв'язок

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (1.24)$$

Припустивши, що на систему накладені періодичні крайові умови $\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{l}) = \Psi(\mathbf{r})$. Тоді отримуємо, що

$$\begin{aligned} k_\nu &= \frac{2\pi}{l}n_\nu, \quad n_\nu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad \nu = x, y, z, \\ \varepsilon_k &= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{l}\right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2). \end{aligned} \quad (1.25)$$

Зауважимо додатково, що функції $|\mathbf{k}\rangle$ утворюють повний ортонормований базис, а, отже

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle &= \int_V d\mathbf{r} \Psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \\ \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}') &= \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.26)$$

Далі скористаємось принципом заборони Паулі [106], який стверджує, що в багаточастинковій системі невзаємодіючих ферміонів дві однакові частинки не можуть перебувати у одному квантовому стані. У моделі Зоммерфельда квантовий стан позначають

$$\{\mathbf{k}, \sigma\} = (k_x, k_y, k_z, \sigma),$$

тут σ описує спіни частини. При температурі $T = 0$ тільки N найнижчих енергетичних рівнів будуть зайняті N електронами. Ввівши величину k_F (яку називають хвильовим вектором Фермі), яка вказує на кількість k найвищих заповнених енергетичних рівнів. Тоді кількість частинок N визначається

як [98]

$$N = \sum_{k < k_F, \sigma} 1 = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d^3k. \quad (1.27)$$

Після інтегрування отримуємо таке співвідношення [105]:

$$k_F^3 = 3\pi^2 n_0. \quad (1.28)$$

Врешті отримаємо вирази для енергії ε_F , швидкості v_F та температури T_F Фермі

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^3 k_F^2}{2m} = \frac{1}{2} m v_F^2, \quad T_F = \frac{\varepsilon_F}{k_B}. \quad (1.29)$$

Функція розподілу Фермі-Дірака є такою

$$\bar{n}_i = \frac{1}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/\beta} + 1}, \quad \beta = k_B T, \quad (1.30)$$

де ε_i – енергія частинки в квантовому стані i , а μ – хімічний потенціал [80].

При нульовій температурі $T = 0$

$$f_0(\varepsilon) = \begin{cases} 1 & \text{if } \varepsilon < \varepsilon_F, \\ 0 & \text{if } \varepsilon > \varepsilon_F, \end{cases} \quad (1.31)$$

а при скінченій температурі ($T \neq 0$)

$$f_0(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/\beta} + 1}. \quad (1.32)$$

Значення хімічного потенціалу як функції температури T задається умовою

$$\sum_{\mathbf{k}, \sigma} f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}) = N. \quad (1.33)$$

Далі, виходячи з припущення, що наявне електричне поле $\mathbf{E} = E\mathbf{e}_1$ та градієнт температури $\nabla T = \frac{\partial T}{\partial x}\mathbf{e}_1$ розглянемо розв'язок рівняння Больцмана у формі [80, 105]

$$f = f_0 - \tau \left(-\frac{eE}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} + v_x \frac{\partial f_0}{\partial x} \right) \quad (1.34)$$

Оскільки у рівнянні наявний внесок від ∇T , то T та μ залежать від

координати x , проте енергія ε – ні. Тому ми можемо записати, що

$$\begin{aligned}\frac{\partial f_0}{\partial x} &= \frac{\partial f_0}{\partial \alpha} \frac{\partial \alpha}{\partial x}, \\ \alpha &= \frac{\varepsilon - \mu}{\beta}.\end{aligned}\tag{1.35}$$

або

$$\frac{\partial f_0}{\partial x} = \beta \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \alpha}{\partial x} = -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \left(\frac{\varepsilon}{\beta} \frac{\partial \beta}{\partial x} + \beta \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\mu}{\beta} \right) \right).\tag{1.36}$$

Врахувавши, що $\varepsilon = \frac{1}{2}mv^2$ ми також отримуємо, що:

$$\frac{\partial f_0}{\partial v_x} = \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial v_x} = mv_x \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}.\tag{1.37}$$

Тепер підставивши (1.32), (1.36), (1.37) у (1.34) та використавши отриманий вираз для $f(\varepsilon)$ у рівнянні для густини струмів j_x [80]:

$$\begin{aligned}j_x &= \int_0^\infty d\varepsilon (-ev_x) g(\varepsilon) f(\varepsilon) = \\ &= e \int_0^\infty d\varepsilon v_x g(\varepsilon) \tau v_x \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \left(eE + \frac{\varepsilon}{\beta} \frac{\partial \beta}{\partial x} + \beta \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\mu}{\beta} \right) \right) = \\ &= \left(e^2 E + e \frac{\varepsilon}{\beta} \frac{\partial \beta}{\partial x} \right) \int_0^\infty d\varepsilon v_x^2 g(\varepsilon) \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) + \\ &\quad + \frac{e}{\beta} \frac{\partial \beta}{\partial x} \int_0^\infty d\varepsilon v_x^2 g(\varepsilon) \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right).\end{aligned}\tag{1.38}$$

Тут $g(\varepsilon)$ – густина електронних станів [80, 105]

$$g(\varepsilon) = \frac{3}{2} \frac{n_0}{\mu_0^{3/2} \sqrt{\varepsilon}},\tag{1.39}$$

μ_0 – хімічний потенціал при $T = 0$. Поклавши $v_x^2 = \frac{2}{3} \frac{\varepsilon}{m}$ маємо

$$j_x = \left(e^2 E + e \beta \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\mu}{\beta} \right) \right) K_1 + \frac{e}{\beta} \frac{\partial \beta}{\partial x} K_2,\tag{1.40}$$

де K_n задано виразом

$$K_n = \frac{n_0}{m \mu_0^{3/2}} \int_0^\infty d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \varepsilon^{n+1/2} \tau.\tag{1.41}$$

Цю функцію можна подати так [105]:

$$K_n = \frac{n_0}{m\mu_0^{3/2}} \left(\mu^{n+1/2} \tau(\mu) + \frac{\pi^2}{6} \beta^2 \frac{d^2}{d\varepsilon^2} (\varepsilon^{n+1/2} \tau \varepsilon) |_{\varepsilon=\mu} \right). \quad (1.42)$$

При $T = 0$

$$K_n = \frac{n_0}{m} \mu_0^{n-1} \tau(\mu_0). \quad (1.43)$$

Якщо відсутні градієнт температури, тобто $\frac{\partial T}{\partial x} = 0$ то

$$j_x = e^2 E K_1 \quad (1.44)$$

і для $T = 0$ маємо

$$j_x = \frac{n_0 e^2 \tau(\mu_0)}{m} E. \quad (1.45)$$

Позначивши

$$\sigma_0 = \frac{n_0 e^2 \tau(\mu_0)}{m} \quad (1.46)$$

отримуємо вираз аналогічний до виразу для статичної провідності в моделі Друде, з врахуванням часу затухання τ на поверхні Фермі.

Наприкінці зауважимо, що вираз для динамічної провідності також буде співпадати із виразом одержаним у моделі Друде. Його можна отримати поклавши $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t}$ та $\mathbf{J} = \mathbf{J}_0 e^{-i\omega t}$ (див. наприклад [109, 110])

Квазікласичне наближення Томаса-Фермі

Наближення Томаса-Фермі [111] можна одержати, якщо розглянути реакцію системи електронів на статичний заряд q . Згідно апроксимації Томаса-Фермі, якщо просторово неоднорідне збурення обурення змінюється повільно на відстанях співмірних із міжатомними, енергію Фермі також можна розглядати як функцію, що повільно змінюється у просторі. Тому можна записати

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{r}) = -4\pi q \delta(\mathbf{r}) + 4\pi e \delta \rho(\mathbf{r}). \quad (1.47)$$

де $\phi(\mathbf{r})$ - повний потенціал у плазмі, $\delta \rho(\mathbf{r})$ - зміна концентрації електронів, спричинене внесенням точкового заряду q . В моделі Томаса - Фермі при просторово неоднорідному збуренні, що повільно змінюється на відстанях порядку міжатомних, енергію Фермі також можна розглядати як функцію

просторових координат, що повільно змінюється. Таким чином, можна записати

$$\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} = \varepsilon_F + e\phi(\mathbf{r}),$$

де ε_F - енергія Фермі при відсутності потенціалу $\phi(\mathbf{r})$. Якщо це рівняння використати для одержання у лінійному наближенні для $\delta\rho(\mathbf{r})$ та підставити знайдений вираз у рівняння (1.47), то його розв'язком буде [111]

$$\phi(r) = \frac{q}{r} e^{-k_{TF} r},$$

де

$$k_{TF} = \sqrt{\frac{6\pi n e^2}{\varepsilon_F}}$$

де k_{TF} - так званий хвильовий вектор Фермі. Отже поляризація, викликана зарядом, спричиняє екранування поля цього заряду на відстані близько $\lambda_{TF} = k_{TF}^{-1}$. Для концентрацій електронів, характерних для металів, величина λ_{TF} - співмірна із відстанню між частинками, тому екранування виявляється достатньо ефективним.

Метод Томаса-Фермі дає задовільні результати у випадку великих довжин хвиль, коли виконується умова про повільні зміни потенціалу та за умови $e^2/r_0 \ll \varepsilon_F$, тобто у випадку, коли істотними є зміни потенціальної енергії, яка має порядок e^2/r_0 , де r_0 - відстань між частинками.

При розгляді екранованого кулонівського потенціалу модель Томаса-Фермі приводить до виразу для діелектричної проникності [111]

$$\epsilon_{TF} = \frac{q^2 + k_{TF}^2}{q^2}.$$

1.3 Числові методи дослідження плазмонних хвиль

1.3.1 Метод Фур'є-мод

Поширеним методом чисельного моделювання поширення електромагнітних хвиль у середовищі є метод **Фур'є-мод** (англійською rigorous coupled-wave analysis, RCWA) [71–75]. Застосування перетворення Фур'є при розв'язуванні

диференціальних рівнянь пов'язане з тим, що воно змінює інтегральні згортки у звичайні добутки. Зокрема, інтегральна форма взаємозв'язку між індукцією та напруженістю електромагнітного поля [89, 90]

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) &= \int \epsilon(\mathbf{r}, t - t') \mathbf{E}(\mathbf{r}, t') dt', \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= \int \mu(\mathbf{r}, t - t') \mathbf{H}(\mathbf{r}, t') dt', \end{aligned} \quad (1.48)$$

при їх представленні з допомогою інтегрального перетворення Фур'є по часу

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) e^{i\omega t} d\omega, \\ \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) e^{i\omega t} d\omega, \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \mathbf{B}(\mathbf{r}, \omega) e^{i\omega t} d\omega, \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) e^{i\omega t} d\omega, \end{aligned} \quad (1.49)$$

набуває вигляду

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) &= \epsilon(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega), \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}, \omega) &= \mu(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega), \end{aligned} \quad (1.50)$$

де $\epsilon(\mathbf{r}, \omega)$ і $\mu(\mathbf{r}, \omega)$ – фур'є-образи діелектричної та магнітної проникностей

$$\begin{aligned} \epsilon(\mathbf{r}, \omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \epsilon(\mathbf{r}, t) e^{-i\omega t} dt, \\ \mu(\mathbf{r}, \omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \mu(\mathbf{r}, t) e^{-i\omega t} dt. \end{aligned} \quad (1.51)$$

Окрім частотної дисперсії, у подібний спосіб, можна розглянути випадок так званої просторової дисперсії, коли крім залежності від частоти фур'є-образи діелектричної та магнітної проникності є функцією і хвильового вектора $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$ і $\mu(\mathbf{k}, \omega)$.

Метод Фур'є-мод є ефективним чисельним методом розв'язання рівнянь Максвелла. Початково цей метод був розроблений для моделювання дифракції плоскої електромагнітної хвилі на періодичних дифракційних решітках [61,

62]. Пізніше було запропоновано ряд модифікацій методу, які розширюють сферу його використання, зокрема для розв'язування задач дифракції на неперіодичних структурах, включно із моделюванням дифракції хвилеводних мод пов'язаної із неоднорідностями хвилеводу [61, 62].

У методі Фур'є-мод компоненти електромагнітного поля і тензори діелектричної і магнітної проникностей структури записують у вигляді "обрізаних" рядів Фур'є. У цьому випадку розв'язок задачі дифракції зводиться до розв'язування задачі на власні значення і власні вектори в кожному з шарів структури. При цьому необхідно розв'язати систему лінійних алгебраїчних рівнянь, які описують граничні умови, пов'язані із неперервністю тангенціальних складових електромагнітного поля на межах шарів структури. З метою покращення збіжності та стійкості методу використовується різні методики, зокрема, покращений алгоритм для матриці проходження при моделюванні багат шарових структур, або факторизація рядів Фур'є. Вони дають змогу істотно прискорити збіжність для ТМ-поляризованого падаючого випромінювання при моделюванні структур, що містять перфоровані шари металу. Метод Фур'є-мод широко застосовують для вирішення завдань дифракції плоских хвиль на двомірних та тривимірних багат шарових періодичних структурах, а також для випадків неперіодичних структур [76].

1.3.2 Метод трансфер-матриці

Для розв'язування задач про поширення хвиль в плоскошаруватих структурах, або у середовищі, показник заломлення якого є неперервною функцією від координати, зручно використовувати методику трансфер-матриці [77]. Метод трансфер-матриць дає змогу за тангенціальними проекціями електричної напруженості і магнітної індукції поля на поверхні будь-якого шару одержати їх значення для будь-якої площини паралельної до межі поділу всередині цього шару, а також і на його другій межі. Оскільки хвилевід із неперервною залежністю показника заломлення від координати можна подати як велику кількість тонких шарів, в яких показник заломлення можна прийняти за константу, то метод трансфер-матриць можна застосувати

для вивчення характеристик режимів поширення у хвилеводах показник заломлення якого залежить від координат.

Рівняння, які описують поширення ТЕ чи ТМ хвиль у хвилеводі вдовж осі Ox зазвичай називають одновимірними скалярними рівняннями Гельмгольца режиму ТЕ та ТМ відповідно. Воно також відоме як одновимірне скалярне хвильове рівняння, яке можна застосовувати до різних ізотропних та немагнітних діелектричних планарних плівкових структур [90].

$$\frac{d^2\Psi_x}{dx^2} + (k_0n_i^2 - \beta^2)\Psi_x = 0, \quad (1.52)$$

де $\Psi_x = E_x$ - для ТЕ, або $\Psi_x = H_x$ - для ТМ хвиль, k_0 - хвильове число, що описує поширення хвиль вакуумі, а β - хвильове число i -го шару середовища, у якому вдовж осі Ox поширюється хвиля. Трансфер-матриця, яка пов'язує ТЕ хвилю у j -му шарі і її значенням у $j - 1$ -му шарі

$$\begin{pmatrix} \Psi_j(x_j) \\ \Psi'_j(x_j) \end{pmatrix} = \hat{M}_j \begin{pmatrix} \Psi_j(x_{j-1}) \\ \Psi'_j(x_{j-1}) \end{pmatrix}, \quad (1.53)$$

має вигляд

$$\hat{M}_j = \begin{pmatrix} \cos(k_j h_j) & \frac{1}{k_j} \sin(k_j h_j) \\ -k_j \sin(k_j h_j) & \cos(k_j h_j) \end{pmatrix} \quad (j = 1, 2, \dots, l). \quad (1.54)$$

Підставивши вираз для характеристики поля у j -му шарі у вираз для $j + 1$ -го шару послідовно для всіх шарів системи приходимо до такого матричного рівняння

$$\begin{pmatrix} \Psi_l(x_l) \\ \Psi'_l(x_l) \end{pmatrix} = \prod_{j=1}^{j=l} \hat{M}_j \begin{pmatrix} \Psi_1(x_0) \\ \Psi'_1(x_0) \end{pmatrix}, \quad (1.55)$$

яке дає змогу одержати значення функції Ψ та її похідної на одному краї скінченого проміжку за відомими їх значеннями на протилежному. Це рівняння зручне для чисельної реалізації, оскільки відшукання його розв'язку зводиться до перемножування матриць [78]. Існує і інша версія цього методу, що носить назву метод аналітичної трансфер-матриці, яка особливо стійка до числових обчислень, коли кількість шарів на які розбивають середовище із

змінним показником заломлення – дуже велика [79].

РОЗДІЛ 2

Математичне моделювання поширення плазмон-поляритонних хвиль в структурах діелектрик/метал/діелектрик

2.1 Результати експериментальних досліджень

Для розуміння механізмів збудження та поширення ППХ не тільки з теоретичної точки зору, але й з практичного погляду (експерименту), а також для підтвердження як правильності запропонованої моделі, так і зацікавленості наукової спільноти в такому дослідженні у роботі розглянуто джерела, які містять результати практичного (натурного) вивчення поширення ППХ.

З-поміж численних (напр. [25, 27, 87]) експериментальних досліджень розглянутих при написанні цієї роботи для введення в контекст необхідності побудови математичної моделі поширення ППХ в гетерогенних структурах *діелектрик/метал/діелектрик*, де у ролі металу виступає саме АТМП, а не довільної товщини зразки, у цьому пункті згадано результати трьох досліджень, проведених саме для тонких металевих прошарків.

Принципова схема проведення експериментальних досліджень поширення ППХ в структурах *діелектрик/АТМП/діелектрик* розглянутих у цій роботі є такою: на товсту (у співвідношенні із розмірами решти частин структури) діелектричну підкладку наносять тонку металеву плівку - зазвичай метал із великою кількістю вільних носіїв заряду *Al*, *Au*, *Ag*. Після чого на метал

наносять тонкий шар діелектрика. Збудження ППХ на границі середовищ *діелектрик/метал* відбувається шляхом впливу на поверхню металу вузького пучка монохроматичного світла - лазера.

Описана гетероструктура досліджена у роботі [87], а саме на діелектричну підкладку діоксиду силіцію SiO_2 нанесено золоту Au плівку товщиною $50nm$. Далі цю конструкцію покрили шаром полімеру товщиною $1150nm$. Для збудження ППХ на межі середовищ діелектрик/метал отриману структуру підсвітили лазером з довжиною хвилі $632.5nm$ та частотою пульсації $250fs$. У наведеному експерименті отримано результати для глибини проникнення ППХ l_{SPR} в золоту плівку.

Інший експеримент [25] був проведений над структурами в яких нарощували нанострічки АТМП $Ag(111)$ з контрольованим рівнем моношарів (МШ) на діелектричній підкладці $Si(111)$. На кожен зі нанострічок нанесено тонкий ($1.5nm$) шар двоокису кремнію (silica). Еліпсометрія [26] проводилася з допомогою системи SOPRA GES-5E для кутів падіння в межах $60 - 75^\circ$. Тут показано, що для плівок товщиною в $10 - 20$ моношарів отримані характеристики ППХ [1]: оптичне затухання, фактор ефективності (quality factor), енергія плазмона значною мірою варіюються із зміною кількістю моношарів. Отримані у статті експериментальні дані для спектру ППХ використано для порівняння з результатами симуляції проведеної у цій роботі.

У іншому дослідженні [27] проведено експеримент для таких цікавих гібридних структур як графен на кількешаровому благородному металі (напр. Au). У ній теж показано, що поведінка ППХ значною мірою залежить від кількості шарів металу, та пов'язують це із впливом різноманітних квантово-розмірних ефектів як-от затухання Ландау [28], тощо.

2.2 Постановка задачі поширення плазмон-поляритонних в структурах діелектрик/метал/діелектрик

Структура для якої будується математична модель складається з двох непровідних середовищ - діелектриків між якими “затиснуто” атомарно тонку

(розміром від кількох до кількох десятків нанометрів) металеву плівку (АТМП). Надалі ми використовуватимемо такі межі середовищ:

$$\Omega = \begin{cases} \Omega_1 & \text{якщо } z < -l/2, \\ \Omega_2 & \text{якщо } -l/2 \leq z \leq l/2, \\ \Omega_3 & \text{якщо } z > l/2, \end{cases} \quad (2.1)$$

де l - товщина АТМП.

Систему координат вибрано так, що метал лежить в площині XOY таким чином, що сама площина геометрично розділяє його на дві рівні частини. Поширення ППХ також буде відбуватися в площині XOY в напрямку додатніх значено x .

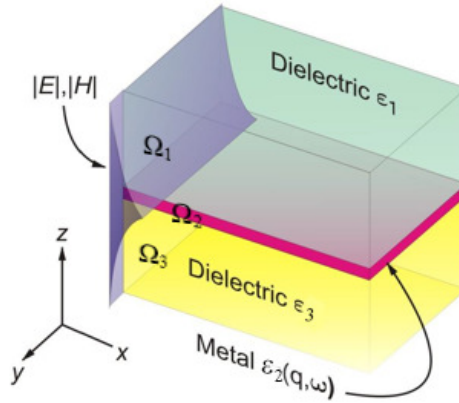


Рис. 2.1: Схематичне представлення структури діелектрик/метал/діелектрик.

Будемо вважати, що діелектричні функції непровідних середовищ Ω_1 та Ω_3 є функціями лише часової змінної t :

$$\epsilon_1 = \epsilon_1(t), \quad \epsilon_3 = \epsilon_3(t), \quad (2.2)$$

а діелектрична функція АТМП (середовище Ω_2) залежить як від часової змінної так і від просторових координат, тому її можна записати у такий спосіб

$$\epsilon_2 = \epsilon_2(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{r} = (x, y, z). \quad (2.3)$$

Провідність у діелектриків відсутня, а, отже

$$\sigma_1 = 0, \quad \sigma_3 = 0. \quad (2.4)$$

Для АТМП провідність також залежить від координат як і функція ϵ_2

$$\sigma_2 = \sigma_2(\mathbf{r}, t). \quad (2.5)$$

Як показує експеримент [1], поширення ППХ локалізоване у міжфазній області контакту накладки-діелектрика Ω_1 та АТМП Ω_2 .

Для математичного опису такого процесу використаємо [1, 89, 90] систему макроскопічних рівнянь Максвелла:

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{H} &= \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\ \nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho, \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \\ \mathbf{B} &= \mu_0 \mu \mathbf{H}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

з краєвими умовами на межах контакту двох середовищ [89, 132]:

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) &= 0, \\ \mathbf{n} \cdot (\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1) &= \rho, \\ \mathbf{n} \times (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) &= \mathbf{J}, \\ \mathbf{n} \cdot (\mathbf{B}_2 - \mathbf{B}_1) &= 0, \end{aligned} \quad (2.7)$$

де \mathbf{n} – одиничний вектор нормалі, напрямлений в площину $z > 0$. Перше рівняння - стверджує, що ротор вектора магнітної напруженості поля \mathbf{H} визначається як вектором густини електричного струму \mathbf{J} так і зміною вектора електричної напруженості поля. Друге рівняння - стверджує, що ротор вектора електричної напруженості поля \mathbf{E} створюється зміною вектора магнітної індукції \mathbf{B} . Третє рівняння виражає той факт, що джерелом вектора електричної індукції \mathbf{D} є вільні електричні заряди, густина яких ρ . Четверте стверджує, що магнітне поле є соленоїдальним і, як наслідок, магнітний потік через замкнуту поверхню завжди дорівнює нулю [89, 90]. Тут \cdot - скалярний добуток, \times - векторний добуток. Додатково надалі вважатимемо, що зовнішні заряди ρ в області контакту діелектриків та металу відсутні, тобто $\nabla \cdot \mathbf{D} = 0$ та розглядатимемо немагнітні середовища $\mu = 1$.

У випадку нестационарного процесу та неоднорідного середовища поширення ППХ, окрім часової дисперсії, процес характеризується також наявністю просторової дисперсії. А це, в свою чергу, означає, що взаємозв'язки між векторами \mathbf{E} та \mathbf{D} , \mathbf{E} та \mathbf{J} є нелокальним і мають наступну форму [89]:

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \int_V \int_{\tau} d\mathbf{r}' dt' \epsilon_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t') \mathbf{E}(\mathbf{r}', t'), \quad (2.8)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \int_V \int_{\tau} d\mathbf{r}' dt' \sigma_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t') \mathbf{E}(\mathbf{r}', t'), \quad (2.9)$$

$$i = 1, 2, 3,$$

де $\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t')$ - провідність АТМП, V - об'єм області в якій визначено функції $\epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t')$ та $\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t')$.

Оскільки в описаній моделі всі характеристики середовищ є однорідними по часовій змінній t , то систему рівнянь Максвела зручно записати через Фур'є-зображення векторів \mathbf{H} , \mathbf{E} , \mathbf{D} , \mathbf{B} .

Введемо часове Фур'є перетворення у такий спосіб

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \tilde{f}(\omega) e^{i\omega t}, \quad \tilde{f}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt f(t) e^{-i\omega t}, \quad (2.10)$$

Спочатку здійснимо Фур'є-перетворення для функцій діелектричної проникності та провідності, тобто запишемо

$$\begin{aligned} \epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t') &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) e^{i\omega(t-t')} \\ \sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t') &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) e^{i\omega(t-t')} \end{aligned} \quad (2.11)$$

Обчислимо значення виразів $\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$ та $\frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$. Для першого виразу маємо

(з властивостей перетворення Фур'є):

$$\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \mathbf{B}(\mathbf{r}, \omega) e^{i\omega t} = \frac{i\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \mathbf{B}(\mathbf{r}, \omega) e^{i\omega t} \quad (2.12)$$

Знаходження значення $\frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$ є дещо складнішим в зв'язку із наявністю $\epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t')$. Враховуючи (2.11), для $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ маємо, що

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_V \int_{\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{r}' dt' d\omega \epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) e^{i\omega(t-t')} \mathbf{E}(\mathbf{r}', t'). \quad (2.13)$$

Ввівши $\mathbf{E}(\mathbf{r}', \omega)$ як

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}', \omega) = \int_{\tau} dt' \mathbf{E}(\mathbf{r}', t') e^{-i\omega t'}, \quad (2.14)$$

остаточно отримуємо вираз для $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$:

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_V \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{r}' d\omega \epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}', \omega) e^{i\omega t}. \quad (2.15)$$

Зауважимо, що аналогічно можна подати вираз для $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$, а саме

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_V \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{r}' d\omega \sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}', \omega) e^{i\omega t}. \quad (2.16)$$

Використавши (2.15), маємо, що:

$$\frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{i\omega}{2\pi} \int_V \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{r}' d\omega \epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}', \omega) e^{i\omega t}. \quad (2.17)$$

Запишемо Фур'є-представлення першого рівняння Максвелла у для усіх

областей Ω . Для цього підставимо (2.15) та (2.16) у вираз для $\nabla \times \mathbf{H}$

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{H} &= \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \frac{1}{2\pi} \nabla \times \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) e^{i\omega t} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) e^{i\omega t} = \\ &= \frac{i\omega}{2\pi} \int_V \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{r}' d\omega \epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}', \omega) e^{i\omega t} + \frac{1}{2\pi} \int_V \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{r}' d\omega \sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}', \omega) e^{i\omega t}.\end{aligned}\quad (2.18)$$

або

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega \int_V d\mathbf{r}' \epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}', \omega) + \int_V d\mathbf{r}' \sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}', \omega). \quad (2.19)$$

Далі припустимо, що для АТМП (область Ω_2) можна знехтувати впливом краєвих ефектів у площині XOY . Це припущення є коректним, якщо площа поверхні є макроскопічно великою, тобто $S \rightarrow \infty$ [92]. Взявши це до уваги, ми будемо вважати, що $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_{\parallel}, z)$. Враховуючи це, можна записати вирази для функції діелектричної проникності та провідності середовищ так:

$$\begin{aligned}\epsilon_1(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}, z, z', t - t') &= \epsilon_0 \epsilon_1(t - t') \delta(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}) \delta(z - z'), \\ \epsilon_2(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}, z, z', t - t') &= \epsilon_0 \epsilon_2(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}, z, t - t') \delta(z - z'), \\ \epsilon_3(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}, z, z', t - t') &= \epsilon_0 \epsilon_3(t - t') \delta(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}) \delta(z - z'), \\ \sigma_2(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}, z, z', t - t') &= \sigma_0 \sigma_2(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}, z, t - t') \delta(z - z'),\end{aligned}\quad (2.20)$$

тут $\delta(z)$ – дельта функція Дірака [91]. Надалі у викладках опускатимемо діелектричну проникність вакууму ϵ_0 та статичну провідність σ_0 , використовуючи їх при потребі.

Як проміжний результат запишемо такі вирази для $\nabla \times \mathbf{H}$ в областях Ω_1 , Ω_2 , Ω_3 :

Ω_1 :

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega \epsilon_1(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega); \quad (2.21)$$

Ω_3 :

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = i\omega \epsilon_3(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega); \quad (2.22)$$

Ω_2 :

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) &= i\omega \int_{\Omega_2} d\mathbf{r}'_{\parallel} \epsilon(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}, z, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}'_{\parallel}, z, \omega) + \\ &+ \int_{\Omega_2} d\mathbf{r}'_{\parallel} \sigma(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}, z, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}'_{\parallel}, z, \omega). \end{aligned} \quad (2.23)$$

Спростимо отримане для області Ω_2 рівняння (2.22), застосувавши до $\epsilon(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}, z, \omega)$ перетворення Фур'є по змінній $\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}$:

$$\epsilon(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}, z, \omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{q} \epsilon_2(\mathbf{q}, z, \omega) e^{i(\mathbf{q}, \mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel})}, \quad (2.24)$$

де

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= (q_x, q_y), \quad d\mathbf{q} = (dq_x, dq_y), \\ (\mathbf{q}, \mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}) &= q_x(x - x') + q_y(y - y'). \end{aligned}$$

Маємо:

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega_2} d\mathbf{r}'_{\parallel} \epsilon(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}, z, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}'_{\parallel}, z, \omega) = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\Omega_2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{r}'_{\parallel} d\mathbf{q} \epsilon_2(\mathbf{q}, z, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}, z, \omega) e^{i(\mathbf{q}, \mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel})} = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{q} \epsilon_2(\mathbf{q}, z, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{q}, z, \omega) e^{i(\mathbf{q}, \mathbf{r}_{\parallel})}, \end{aligned}$$

тут

$$\mathbf{E}(\mathbf{q}, z, \omega) = \int_{\Omega_2} d\mathbf{r}'_{\parallel} \mathbf{E}(\mathbf{r}'_{\parallel}, z, \omega) e^{-i(\mathbf{q}, \mathbf{r}'_{\parallel})}.$$

Аналогічно перетворимо (2.16)

$$\int_{\Omega_2} d\mathbf{r}'_{\parallel} \sigma(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}, z, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}'_{\parallel}, z, \omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{q} \sigma_2(\mathbf{q}, z, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{q}, z, \omega) e^{i(\mathbf{q}, \mathbf{r}_{\parallel})}.$$

Остаточно маємо вираз для $\nabla \times \mathbf{H}$:

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) &= \frac{i\omega}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{q} \epsilon_2(\mathbf{q}, z, \omega) e^{(\mathbf{q}, \mathbf{r}'_{\parallel})} \mathbf{E}(\mathbf{q}, z, \omega) + \\ &+ \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{q} \sigma_2(\mathbf{q}, z, \omega) e^{(\mathbf{q}, \mathbf{r}'_{\parallel})} \mathbf{E}(\mathbf{q}, z, \omega). \end{aligned}$$

Запишемо тепер систему рівнянь (2.21)-(2.23) у (\mathbf{q}, z, ω) представленні;

у Ω_1 :

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, z, \omega) = i\omega \epsilon_1(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{q}, z, \omega); \quad (2.25)$$

у Ω_3 :

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, z, \omega) = i\omega \epsilon_3(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{q}, z, \omega); \quad (2.26)$$

у Ω_2 :

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) &= \frac{i\omega}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{q} \epsilon_2(\mathbf{q}, z, \omega) e^{(\mathbf{q}, \mathbf{r}'_{\parallel})} \mathbf{E}(\mathbf{q}, z, \omega) + \\ &+ \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{q} \sigma_2(\mathbf{q}, z, \omega) e^{(\mathbf{q}, \mathbf{r}'_{\parallel})} \mathbf{E}(\mathbf{q}, z, \omega). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Усі подальші викладки надалі стосуватимуться електромагнітних хвиль поляризованих в площині падіння, для яких вектор напруженості електричного поля \mathbf{E} паралельний площині падіння - ТМ (Transverse Magnetic)-хвиль [1]. Вектори \mathbf{E} та \mathbf{H} в цьому випадку є такими:

$$\mathbf{H} = (0, H_y, 0), \quad \mathbf{E} = (E_x, 0, E_z). \quad (2.28)$$

Проаналізуємо рівняння $\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0$ та $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$ для ТМ-хвиль.

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mu_0 \left(0, \frac{\partial H_y}{\partial y}, 0 \right) = 0 \Rightarrow \mu_0 \frac{\partial H_y}{\partial y} = 0.$$

Це означає, що H_y не залежить від координати y , і тому:

$$H_y = H_y(x, z, t). \quad (2.29)$$

Для знаходження особливостей \mathbf{E} у випадку ТМ-хвиль для початку запишемо значення для виразу $\nabla \times \mathbf{E}$.

$$\nabla \times \mathbf{E} = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_2 & \mathbf{e}_3 \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ E_x & 0 & E_z \end{vmatrix} = \mathbf{e}_1 \frac{\partial E_z}{\partial y} - \mathbf{e}_2 \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right) - \mathbf{e}_3 \frac{\partial E_x}{\partial y}. \quad (2.30)$$

Отримане співвідношення (2.30) разом із рівнянням $\nabla \times \mathbf{E} = -\partial \mathbf{B} / \partial t$ дають наступні співвідношення:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 \frac{\partial E_z}{\partial y} - \mathbf{e}_2 \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right) - \mathbf{e}_3 \frac{\partial E_x}{\partial y} &= -\mathbf{e}_2 \mu_0 \frac{\partial H_y}{\partial t}, \\ \frac{\partial E_z}{\partial y} &= 0, \\ \frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} &= \mu_0 \frac{\partial H_y}{\partial t}, \\ \frac{\partial E_x}{\partial y} &= 0. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Останнє вказує на те, що компоненти електричного поля, як і у випадку з H_y , не залежать від координати y , тобто

$$E_x = E_x(x, z, t), \quad E_z = E_z(x, z, t). \quad (2.32)$$

Розв'язок системи (2.25)-(2.27) шукатимемо для електричних полів, які є однорідними в напрямку осі OX у областях Ω_1 та Ω_3 :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{E}(x, z, \omega) = \mathbf{E}(z, \omega) e^{ik_x x}, \quad (2.33)$$

k_x - хвильовий вектор у напрямку поширення ППХ.

Враховуючи таку поведінку електричного поля $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$, знайдемо аналогічну залежність для магнітного поля $\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega)$.

Для початку обчислимо значення $\nabla \times \mathbf{H}$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_2 & \mathbf{e}_3 \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & H_y & 0 \end{vmatrix} = -\mathbf{e}_1 \frac{\partial H_y}{\partial z} + \mathbf{e}_3 \frac{\partial H_y}{\partial x}. \quad (2.34)$$

Оскільки у областях Ω_1 та Ω_3 є справедливим співвідношення (2.21) та (2.22), то останнє (2.34) можна подати у вигляді

$$\nabla \times \mathbf{H} = -\mathbf{e}_1 \frac{\partial H_y}{\partial z} + \mathbf{e}_3 \frac{\partial H_y}{\partial x} = i\omega\epsilon_i(\omega)e^{ik_x x}(\mathbf{e}_1 E_x - \mathbf{e}_3 E_z), \quad i = 1, 3,$$

що дає

$$\begin{aligned} \frac{\partial H_y(\mathbf{r})}{\partial z} &= -i\omega\epsilon_i(\omega)e^{ik_x x} E_x(z, \omega), \\ \frac{\partial H_y(\mathbf{r})}{\partial x} &= -i\omega\epsilon_i(\omega)e^{ik_x x} E_z(z, \omega), \end{aligned} \quad (2.35)$$

$$i = 1, 3.$$

У зв'язку зі схожістю рівнянь в областях Ω_1 та Ω_3 , природнім є припущення, що $H_y(x, z, \omega)$ має аналогічну із $E_{x,z}(x, z, \omega)$ форму

$$H_y(x, z, \omega) = H_y(z, \omega)e^{ik_x x}. \quad (2.36)$$

Наступним кроком знайдемо структуру $\mathbf{E}(\mathbf{q}, z, \omega)$ в області Ω_2 (АТМП).

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{q}, z, \omega) &= \int_{\Omega_2} d\mathbf{r}'_{\parallel} \mathbf{E}(\mathbf{r}'_{\parallel}, z, \omega) e^{-i(\mathbf{q}, \mathbf{r}'_{\parallel})} = \int \int dx dy \mathbf{E}(z, \omega) e^{ik_x x} e^{-i(q_x x + q_y y)} = \\ &= \int dx e^{i(k_x - q_x)x} \int dy \mathbf{E}(z, \omega) e^{-q_y y} = (2\pi)^2 \mathbf{E}(z, \omega) \delta(k_x - q_x) \delta(q_y). \end{aligned} \quad (2.37)$$

Зауважимо, що аналогічна тотожність справедлива і для $\mathbf{H}(\mathbf{q}, z, \omega)$ так як вирази для полів \mathbf{E} та \mathbf{H} мають подібну структуру. Тому

$$\mathbf{H}(\mathbf{q}, z, \omega) = (2\pi)^2 \mathbf{H}(z, \omega) \delta(k_x - q_x) \delta(q_y). \quad (2.38)$$

(2.37) та (2.38) разом із (2.27) дають:

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{q}, z, \omega) &= i\omega \int \int dq_x dq_y \epsilon_2(\mathbf{q}, z, \omega) \mathbf{E}(z, \omega) e^{i(q_x x + q_y y)} \delta(k_x - q_x) \delta(q_y) + \\ &+ \int \int dq_x dq_y \sigma_2(\mathbf{q}, z, \omega) \mathbf{E}(z, \omega) e^{i(q_x x + q_y y)} \delta(k_x - q_x) \delta(q_y) = \\ &= i\omega \epsilon_2(k_x, z, \omega) \mathbf{E}(k_x, z, \omega) + \sigma_2(k_x, z, \omega) \mathbf{E}(k_x, z, \omega),\end{aligned}\tag{2.39}$$

де

$$\mathbf{E}(k_x, z, \omega) = \mathbf{E}(z, \omega) e^{k_x x}.\tag{2.40}$$

У результаті система рівнянь (2.25)-(2.27) у (\mathbf{q}, z, ω) представлені для областей Ω_1 та Ω_3 є такою

$$\nabla \times \mathbf{H}(k_x, z, \omega) = i\omega \epsilon_i(\omega) \mathbf{E}(k_x, z, \omega), \quad i = 1, 3;\tag{2.41}$$

У Ω_2

$$\nabla \times \mathbf{H}(k_x, z, \omega) = i\omega \epsilon_2(k_x, z, \omega) \mathbf{E}(k_x, z, \omega) + \sigma_2(k_x, z, \omega) \mathbf{E}(k_x, z, \omega).\tag{2.42}$$

тут $\mathbf{E}(k_x, z, \omega) = \mathbf{E}(z, \omega) e^{k_x x}$, а $\mathbf{H}(k_x, z, \omega) = \mathbf{H}(z, \omega) e^{k_x x}$

Далі застосуємо оператор ротора $(\nabla \times)$ до отриманих рівнянь та використаємо відому з векторного аналізу тотожність [91]

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A}.\tag{2.43}$$

Маємо

$$\begin{aligned}-\nabla^2 \mathbf{H}(k_x, z, \omega) &= i\omega \epsilon_i(\omega) \nabla \times \mathbf{E}(k_x, z, \omega), \quad i = 1, 3; \\ -\nabla^2 \mathbf{H}(k_x, z, \omega) &= i\omega \epsilon_2(k_x, z, \omega) \nabla \times \mathbf{E}(k_x, z, \omega) + \sigma_2(k_x, z, \omega) \nabla \times \mathbf{E}(k_x, z, \omega).\end{aligned}\tag{2.44}$$

Тут використано те, що

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = \mu_0 \nabla \cdot \mathbf{H} = 0 \Rightarrow \nabla \cdot \mathbf{H} = 0.\tag{2.45}$$

Виразимо $\nabla \times \mathbf{E}$ через \mathbf{H} . Для цього скористаємось співвідношенням

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}_{\parallel}, z, \omega) = -i\omega \mathbf{B}(\mathbf{r}_{\parallel}, z, \omega) = -i\omega \mu_0 \mathbf{H}(\mathbf{r}_{\parallel}, z, \omega) \quad (2.46)$$

до якого застосуємо перетворення Фур'є по \mathbf{r}_{\parallel}

$$\nabla \times \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{q} \mathbf{E}(\mathbf{q}, z, \omega) e^{i(\mathbf{q}, \mathbf{r}_{\parallel})} = -i\omega \mu_0 \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{q} \mathbf{H}(\mathbf{q}, z, \omega) e^{i(\mathbf{q}, \mathbf{r}_{\parallel})} \quad (2.47)$$

та скористаємось виразами (2.37) та (2.38):

$$\begin{aligned} \nabla \times \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_x dq_y \mathbf{E}(z, \omega) \delta(k_x - q_x) \delta(q_y) e^{iq_x x} e^{iq_y y} = \\ = -i\omega \mu_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_x dq_y \mathbf{H}(z, \omega) \delta(k_x - q_x) \delta(q_y) e^{iq_x x} e^{iq_y y}, \\ \nabla \times \mathbf{E}(k_x, z, \omega) = -i\omega \mu_0 \mathbf{H}(k_x, z, \omega). \end{aligned} \quad (2.48)$$

Маємо

$$\begin{aligned} -\nabla^2 \mathbf{H}(k_x, z, \omega) &= \omega^2 \mu_0 \epsilon_i(\omega) \mathbf{H}(k_x, z, \omega), \quad i = 1, 3; \\ -\nabla^2 \mathbf{H}(k_x, z, \omega) &= \omega^2 \mu_0 \epsilon_2(k_x, z, \omega) \mathbf{H}(k_x, z, \omega) + \omega \mu_0 \sigma_2(k_x, z, \omega) \mathbf{H}(k_x, z, \omega). \end{aligned} \quad (2.49)$$

Тому в областях Ω_1 та Ω_3 (діелектрики) для $\nabla \times \mathbf{H}(k_x, z, \omega)$ отримуємо

$$\begin{aligned} -\nabla^2 \mathbf{H}(k_x, z, \omega) &= -\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) \mathbf{H}(z, \omega) e^{-ik_x x} = \\ &= -\left(\frac{d^2}{dz^2} - k_x^2 \right) \mathbf{H}(z, \omega). \end{aligned} \quad (2.50)$$

Остаточно в усіх областях маємо систему рівнянь

$$\frac{d^2 \mathbf{H}(z, \omega)}{dz^2} + (k_0^2 \epsilon_i(\omega) - k_x^2) \mathbf{H}(z, \omega) = 0, \quad i = 1, 3, \quad (2.51)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \mathbf{H}(z, \omega)}{dz^2} + (k_0^2 \gamma(k_x, z, \omega) - k_x^2) \mathbf{H}(z, \omega) &= 0, \\ \gamma(k_x, z, \omega) &= \epsilon_2(k_x, z, \omega) - \frac{\sigma_0}{i \epsilon_0 \omega} \sigma_2(k_x, z, \omega), \end{aligned} \quad (2.52)$$

тут $k_0^2 = \omega^2/c^2$.

Зауважимо, що у разі відсутності вимушеного поля $\mathbf{J} = 0$ і тому

$$\gamma(k_x, z, \omega) \equiv \epsilon_2(k_x, z, \omega), \quad (2.53)$$

а в цьому випадку рівняння в області АТМП є таким

$$\frac{d^2 \mathbf{H}(z, \omega)}{dz^2} + (k_0^2 \epsilon_2(k_x, z, \omega) - k_x^2) \mathbf{H}(z, \omega) = 0. \quad (2.54)$$

Крайові умовами в областях дотику середовищ (2.7) (умови зшивання) подамо так

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \times (\mathbf{E}_2(l/2, \omega) - \mathbf{E}_1(l/2, \omega)) &= 0, \\ \mathbf{n} \times (\mathbf{H}_2(l/2, \omega) - \mathbf{H}_1(l/2, \omega)) &= \mathbf{J}(k_x, l/2, \omega), \\ \mathbf{n} \cdot (\mathbf{B}_2(l/2, \omega) - \mathbf{B}_1(l/2, \omega)) &= 0, \\ \mathbf{n} \times (\mathbf{E}_3(-l/2, \omega) - \mathbf{E}_2(-l/2, \omega)) &= 0, \\ \mathbf{n} \times (\mathbf{H}_3(-l/2, \omega) - \mathbf{H}_2(-l/2, \omega)) &= \mathbf{J}(k_x, -l/2, \omega), \\ \mathbf{n} \cdot (\mathbf{B}_3(-l/2, \omega) - \mathbf{B}_2(-l/2, \omega)) &= 0. \end{aligned} \quad (2.55)$$

тут не наведено умови в яких фігурує густина $\rho(\mathbf{r}, \omega)$, оскільки вираз для неї є невідомим, тому надалі відповідна умова не буде використовуватися. У подальшому при розгляді умов (2.55) будемо використовувати умови затухання полів на нескінченості, а саме:

$$\{\mathbf{H}(z, \omega), \mathbf{E}(z, \omega)\}_{z \rightarrow \pm\infty} \rightarrow 0 \quad (2.56)$$

Система (2.51), (2.54)

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \mathbf{H}(z, \omega)}{dz^2} + (k_0^2 \epsilon_i(\omega) - k_x^2) \mathbf{H}(z, \omega) &= 0, \quad i = 1, 3, \\ \frac{d^2 \mathbf{H}(z, \omega)}{dz^2} + (k_0^2 \epsilon_2(k_x, z, \omega) - k_x^2) \mathbf{H}(z, \omega) &= 0, \end{aligned} \quad (2.57)$$

разом з умови зшивання (2.55) дають математичну модель поширення ППХ в структурі ДМД:

$$\begin{aligned}
\frac{d^2 \mathbf{H}(z, \omega)}{dz^2} + (k_0^2 \epsilon_i(\omega) - k_x^2) \mathbf{H}(z, \omega) &= 0, \quad i = 1, 3, \\
\frac{d^2 \mathbf{H}(z, \omega)}{dz^2} + (k_0^2 \epsilon_2(k_x, z, \omega) - k_x^2) \mathbf{H}(z, \omega) &= 0, \\
\mathbf{n} \times (\mathbf{E}_2(l/2, \omega) - \mathbf{E}_1(l/2, \omega)) &= 0, \\
\mathbf{n} \times (\mathbf{H}_2(l/2, \omega) - \mathbf{H}_1(l/2, \omega)) &= \mathbf{J}(k_x, l/2, \omega), \\
\mathbf{n} \cdot (\mathbf{B}_2(l/2, \omega) - \mathbf{B}_1(l/2, \omega)) &= 0, \\
\mathbf{n} \times (\mathbf{E}_3(-l/2, \omega) - \mathbf{E}_2(-l/2, \omega)) &= 0, \\
\mathbf{n} \times (\mathbf{H}_3(-l/2, \omega) - \mathbf{H}_2(-l/2, \omega)) &= \mathbf{J}(k_x, -l/2, \omega), \\
\mathbf{n} \cdot (\mathbf{B}_3(-l/2, \omega) - \mathbf{B}_2(-l/2, \omega)) &= 0.
\end{aligned} \tag{2.58}$$

2.3 Висновки

У цьому розділі викладено теоретичні засади побудови математичних моделей поширення ППХ в структурах ДМД. Розглянуто систему рівнянь Максвелла макроскопічної електродинаміки з нелокальними зв'язками між векторами \mathbf{D} і \mathbf{E} та \mathbf{J} і \mathbf{E} , тобто з врахуванням часової та просторової дисперсії та досліджено отримані співвідношення застосовуючи до них перетворення Фур'є по часу та пласкому вектору \mathbf{r}_{\parallel} в кожній області структури. Зокрема для металевого прошарку знайдено хвильове рівняння у разі, коли діелектрична функція ϵ залежить від координати z та для випадків відсутності та наявності вимушуючого поля. Побудовано та сформульовано краєву задачу моделювання поширення ППХ в структурах ДМД.

РОЗДІЛ 3

Квантові моделі поширення плазмон-поляритонних хвиль в шаруватих структурах

Макроскопічний розгляд електронної підсистеми металу має ту перевагу, що при достатньо низьких температурах і малих частотах та хвильових векторах він дає змогу одержати точний результат. Зазвичай його не можна вважати повним, оскільки він не може бути використаний для опису мікроскопічних явищ, коли суттєву роль відіграють короткі хвилі і високі частоти збуджень.

Квантову систему можна розглядати як модель поведінки електронів провідності у металах. Тоді у цій моделі вплив періодично розташованих іонів у металах наближено описують як однорідний позитивно заряджений фон. Також у цьому випадку важливими для однорідної електронної системи є колективні збудження електронів в цілому, або плазмові коливання. З огляду на це, впорядковані коливання в плазмі і екранування – нерозривно пов'язані явища. Коли електрони намагаючись екранувати розподіл заряду, вони пролітають рівноважне положення, а потім повертаються назад, знову пролітають точку рівноваги і т.д. Таким чином, виникають коливання поблизу стану рівноваги. Повертаючою силою, що спричиняє ці коливання, є середнє самоузгоджене поле всіх електронів.

3.1 Квантові методи опису діелектричної функції металевого прошарку в шаруватих структурах

Ліндгард [70] розрахував функцію діелектричної проникності в наближенні хаотичних фаз (RPA), застосувавши метод самоузгодженого поля та використавши для діелектричної сприйнятливості $\chi(q, \omega)$ [1, 90] її значення для невзаємодіючого електронного газу.

Послідовний квантовий та мікроскопічний підхід до виведення виразу для $\epsilon_{RPA}(q, \omega)$ реалізували Еренрайх і Коен [112]. Для виведення автори застосували метод рівнянь руху для матриці густини. Наближення RPA, у цьому підході, полягає у лінеаризації рівняння руху для $\chi(q, \omega)$. Це наближення виникло при вивченні процесів екранування і колективної поведінки електронної плазми і засноване на фізичному припущенні, що за певних умов сумою експонент, які хаотично змінюються можна знехтувати порівняно з кількістю електронів N в системі. Звідси походить і назва цього наближення. За цим наближенням для $\epsilon(q, \omega)$ на електрон діє не тільки зовнішнє поле, а й поле, створене усіма іншими електронами. Це наближення призводить до виразу для дійсної ϵ_R та уявної ϵ_I частини функції діелектричної проникності $\epsilon(q, \omega)$ Ліндгарда [70]

$$\epsilon_R(q, \omega) = 1 + \frac{q_{TF}^2}{q^2} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{p_F}{4q} \left[\left(\frac{(\omega + q^2/2m)^2}{(qv_F^0)^2} - 1 \right) \ln \left| \frac{\omega - qv_F^0 + q^2/2m}{\omega + qv_F^0 + q^2/2m} \right| \right] \right\} -$$

$$\left(\frac{(\omega - q^2/2m)^2}{(qv_F^0)^2} - 1 \right) \ln \left| \frac{\omega - qv_F^0 - q^2/2m}{\omega + qv_F^0 - q^2/2m} \right|,$$

$$\epsilon_I(q, \omega) = \frac{\pi q_{TF}^2 p_F}{2 q^2 q} \left\{ 1 - \frac{(\omega - q^2/2m)^2}{(qv_F^0)^2} \right\}, \quad -\frac{q^2}{2m} \leq \omega - qv_F^0 \leq \frac{q^2}{2m},$$

$$\epsilon_I(q, \omega) = \frac{\pi q_{TF}^2}{2 q^2} \frac{\omega}{qv_F^0}, \quad 0 \leq \omega \leq qv_F^0 - \frac{q^2}{2m},$$

$$\epsilon_I(q, \omega) = 0, \quad \omega \geq qv_F^0 + \frac{q^2}{2m},$$

де $v_F = \hbar k_F/m$, $k_F = \sqrt{2m\epsilon_F}/\hbar$.

У роботі [92] виконано самоузгоджений розрахунок реакції двовимірного

електронного газу, який дав такий самий вираз для поляризованості, як і у тривимірному випадку. Загальний вираз для поляризованості системи для електронів, що знаходяться у площині $z = 0$, має вигляд [81]

$$\chi(q, \omega) = \frac{e^2}{q^2 l^2} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \sum \frac{f_0 \varepsilon_k - f_0 \varepsilon_{k+q}}{\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k - \hbar\omega - i\hbar\alpha}.$$

де f_0 - функція розподілу Фермі - Дірака, l^2 - площа системи. Підсумовування слід проводити по всіх одноелектронних станах з хвильовим вектором k і енергією ε_k . Вираз для поляризованості ізотропного двовимірного електронного газу із квадратичним законом дисперсії $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ і хвильовим вектором Фермі k_F при температурі абсолютного нуля записаний у вигляді суми двох доданків $\chi = \chi_R + i\chi_I$, кожен з яких має такий вигляд [81]

$$\chi_R = G \left\{ \frac{q}{k_F} - C_- \left[\left(\frac{q}{2k_F} - \frac{m\omega}{\hbar k_F q} \right)^2 - 1 \right]^{\frac{1}{2}} - C_+ \left[\left(\frac{q}{2k_F} + \frac{m\omega}{\hbar k_F q} \right)^2 - 1 \right]^{\frac{1}{2}} \right\},$$

$$\chi_I = G \left\{ D_- \left[1 - \left(\frac{q}{2k_F} - \frac{m\omega}{\hbar k_F q} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} - D_+ \left[1 - \left(\frac{q}{2k_F} + \frac{m\omega}{\hbar k_F q} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right\},$$

де

$$G = \frac{2me^2 n_s}{\hbar^2 k_F q^3},$$

$$C_{\pm} = \text{sgn} \left(\frac{q}{2k_F} \pm \frac{m\omega}{\hbar k_F q} \right); \quad D_{\pm} = 0, \quad \left| \frac{q}{2k_F} \pm \frac{m\omega}{\hbar k_F q} \right| > 1,$$

$$C_{\pm} = 0; \quad D_{\pm} = 1, \quad \left| \frac{q}{2k_F} \pm \frac{m\omega}{\hbar k_F q} \right| < 1,$$

$$k_F = \frac{\sqrt{2m\varepsilon_F}}{\hbar}.$$

де n_s - поверхнева концентрація носіїв.

Для статичних полів вираз для діелектричної сприйнятливості набуває

вигляду

$$\chi(q, 0)|_{q \leq 2k_F} = \epsilon \left(1 + \frac{q_s}{q} \right),$$

$$\chi(q, 0)|_{q > 2k_F} = \epsilon \left[1 + \frac{q_s}{q} \left\{ 1 - \left(1 - \frac{4k_F^2}{q^2} \right)^{1/2} \right\} \right],$$

де χ - статична діелектрична проникність середовища.

Умови існування плазмових збуджень визначають із рівняння [81]

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = 0.$$

У випадку великих довжин хвиль це рівняння приводить до такого рівняння

$$q^2 - \frac{\epsilon\omega^2}{c^2} = \left(\frac{m\epsilon\omega^2}{2\pi n_s e^2} \right),$$

що для закону дисперсії дає

$$\omega \sim \frac{2n_s e^2 q}{m\epsilon} + \frac{3}{4} q^2 v_F^2.$$

Плазмони в двовимірних (2D) електронних системах відрізняються від об'ємних і поверхневих плазмонів. Унікальною особливістю 2D плазмонів є їх спектр при $\omega \rightarrow 0$ і $q \rightarrow 0$ [81]:

$$\omega_{2D}(q) = \sqrt{\frac{2\pi n_s e^2 q}{m\epsilon_{eff}(q)}}.$$

Тут $q = (q_x, q_y, 0)$ - хвильовий вектор в площині електронного шару, m - ефективна маса електронів, $\epsilon_{eff}(q)$ - ефективна діелектрична проникність навколишнього середовища.

3.2 Квантові моделі діелектричної функції металевого прошарку з врахуванням просторової дисперсії

Як уже згадувалося, що важливим моментом в нашій роботі є те, що усі наші викладки в попередньому розділі проводились з врахуванням просторової дисперсії (2.8)

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \int_V \int_{\tau} d\mathbf{r}' dt' \epsilon_{\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t') \mathbf{E}(\mathbf{r}', t'). \quad (3.1)$$

(2.8) вказує, що вектор індукції \mathbf{D} визначає вектор напруженості поля \mathbf{E} не в той же самий момент часу t , а із певною затримкою t' (часова або частотна дисперсія), та не в тій же самій точці простору \mathbf{r} , а зі зміщенням \mathbf{r}' , тобто при наявності просторової дисперсії. У більшості випадків навіть для провідних середовищ вплив просторової дисперсії є зниким та може бути знехтуваним на відміну від частотної дисперсії [95], яку слід враховувати у переважній більшості задач, що виникають при дослідженні ППХ. Проте, як уже зазначалось у огляді літератури, сучасний стан продукування плазмонних гетерогенних структур метал/діелектрик чи діелектрик/метал/діелектрик [25, 27] дозволяє виготовляти АТМП товщиною $5 < l < 100nm$. Для таких структур, окрім квантоворозмірних ефектів [100] значний вплив на заряджені частинки в області контакту діелектрик(вакуум)/метал, а, отже, й на ППХ [113–118] має наявність експонентного “хвоста” електронної густини, який “проникає” в діелектрик (так званий ефект квантового “проникнення” (quantum spill-out)) у зв’язку з тунелюванням крізь бар’єр [117]. Така характерна поведінка вказує на те, що для коректного знаходження характеристик та параметрів такого роду систем важливим є правильне врахування впливу просторової дисперсії діелектричної проникності АТМП.

Для початку розглянемо модель описану у [121]. У цій роботі дослідники розглянули екранування потенціального розсіювання для носіїв заряду у АТМП з потенціалом Пешля-Теллера [122]. Розгляд цього потенціалу дає змогу врахувати міжчастинкову взаємодію та, як наслідок, екранування електричного поля спричинене цією взаємодією [123] та отримати аналітичний

розв'язок рівняння Шредінґера для зарядженої частинки в потенціальній ямі [122].

Зазначається, що статичну діелектричну функцію провідної дисперсної системи можна виразити через матричний елемент потенціалу електрон-електронної взаємодії M_{ee} [124] та поляризаційний оператор $\Pi(0, q)$:

$$\epsilon(q) = 1 + M_{ee}\Pi(0, q), \quad (3.2)$$

$$M_{ee} = \int d\mathbf{r}d\mathbf{r}'\Psi^*(\mathbf{r})\Psi^*(\mathbf{r}')U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}'), \quad (3.3)$$

$$\Pi(0, q) = \int g(\epsilon)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon}\right)d\epsilon. \quad (3.4)$$

тут $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ – потенціал електрон-електронної взаємодії, f_0 , як і раніше, функція розподілу Фермі-Дірака, ϵ – енергія носія заряду.

Гамільтоніан H такої багаточастинкової системи має вигляд [98, 122]:

$$H = \sum_{i=1}^N H(\mathbf{r}_i) = -\sum_{i=1}^N \left(\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + U(\mathbf{r}_i) \right), \quad (3.5)$$

в якому $U(\mathbf{r}_i)$ – одночастинковий потенціал, а Δ_i – оператор Лапласа [91] i -ої частинки.

$$\Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$$

Надалі, допустивши обмеженість руху носіїв заряду в системі тільки по осі OZ , вважатимемо, що $U(\mathbf{r}_i) \equiv U(z)$ та змодельємо $U(z)$ модифікованим потенціалом Пешля-Теллера.

$$U(z) = -\frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 \frac{\lambda(\lambda - 1)}{\cosh^2(\alpha z)}. \quad (3.6)$$

Тут $\lambda > 1$, α – параметри потенціалу, пов'язані з глибиною та шириною ями відповідно. Спектр енергії та хвильова функція носіїв заряду для цього потенціалу є добре відомими [122, 123], тому тут ми просто скористаємося уже готовими формулами:

$$\epsilon_{\lambda, \nu} = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 \left(\lambda(\lambda + 1) - (\lambda - \nu)^2 \right), \quad (3.7)$$

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i(k_x x + k_y y)} \left(\frac{\alpha(\lambda - \nu)\Gamma(2\lambda - \nu + 1)}{\Gamma(\nu + 1)} \right) P_\lambda(z), \quad (3.8)$$

тут ν номер квантового стану для якого справедливо $\nu < \lambda$, S - площа системи в площині XOY , Γ - гама-функція [91], а $P_\lambda(z)$ - функція Лежандра [91]. Також додатково наведемо тут отриманий у [125] вираз для густини станів електронів $g(\varepsilon)$:

$$g(\varepsilon) = \frac{Sm}{\pi\hbar^2} \sum_{\nu=0}^{[\lambda]} \Theta(\varepsilon - \varepsilon_{\lambda,\nu}), \quad (3.9)$$

тут $\Theta(\cdot)$ - функція Хевісайда [91].

Використання наведених виразів для (3.7), (3.8), (3.9) дає змогу розрахувати вирази для M_{ee} в квантовій границі $\nu = 0$ та $\Pi(0, q)$ [121]:

$$M_{ee} = \frac{1}{S} \frac{\pi^3 e^2}{2\chi q} \left(\frac{q}{\alpha} \right)^2 \operatorname{cosec} \left(\frac{\pi q}{2\alpha} \right)^2, \quad (3.10)$$

$$\Pi(0, q) = \frac{Sm}{\pi\hbar^2} \sum_{\nu=0}^{[\lambda]} f_0(\varepsilon_{\lambda,\nu}). \quad (3.11)$$

Два останні вирази разом із (3.2) дають остаточний вираз для функції діелектричної проникності

$$\epsilon(0, q) = 1 + \frac{m\pi^2 e^2}{2\hbar^2 \chi q} f_0(\varepsilon_{0,1}) \left(\frac{q}{\alpha} \right)^2 \operatorname{cosec} \left(\frac{\pi q}{2\alpha} \right)^2. \quad (3.12)$$

Відмітимо також ще один важливий момент, який полягає у тому, що у випадку, коли хвильовий вектор q є значно менший від параметру α , котрий відповідає за ширину потенціальної ями ($q \ll \alpha$) справедливим є твердження, що

$$\operatorname{cosec} \left(\frac{\pi q}{2\alpha} \right)^2 \approx \left(\frac{\pi q}{2\alpha} \right)^2$$

застосування якого, в свою чергу, дає

$$\epsilon(0, q) = 1 + \frac{2me^2}{2\hbar^2 \chi q} f_0(\varepsilon_{0,1}). \quad (3.13)$$

Ще одна варта уваги модель розглянута Скіолструпом [134] і опис у цій моделі тісно пов'язаний із вищезгаданим ефектом квантового "проникнення".

Цей ефект має значний вплив на оптичні властивості нанорозмірних металевих структур до яких можна віднести й АТМП, та дозволяє згладити різкі стрибки діелектричної функції в околі поверхонь поділу середовищ [113]. У ній “проникнення” густини електронів в область діелектрика розрахований з використанням методу функціоналу густини (DFT) в моделі “желе” [117, 118, 137]

Тензор діелектричної проникності $\epsilon(z, z', \omega)$ складається з локальної L та нелокальних NL компонент, хоча й самими авторами зазначається, що такий опис є доволі “грубим”.

$$\epsilon(z, z', \omega) = \epsilon_L(z, z', \omega) - \epsilon_{NL}(z, z', \omega) \quad (3.14)$$

L -компонента є ізотропною та описується класичною моделлю Друде.

$$\epsilon_L(z, z', \omega) = \left(1 - \frac{e^2 n(z)}{m\epsilon_0(\omega^2 + i\gamma\omega)}\right) \delta(z - z') \mathbf{I}, \quad (3.15)$$

тут \mathbf{I} – одинична матриця, а $n(z)$ – просторово залежна функція електронної густини розрахована використовуючи DFT [117]:

$$n(z) = \frac{1}{\pi^2} \int_0^{k_F} dk (k_F^2 - k^2) |\Psi_k(z)|^2 \quad (3.16)$$

в якій $\Psi_k(z)$ – хвильова функція, що описує поведінку електрона у металевій плівці, а відповідна просторово залежна плазмонна частота є такою:

$$\omega_p(z) = \frac{e^2 n(z)}{m\epsilon_0}. \quad (3.17)$$

Щодо NL -компоненти, то вона відповідає за анізотропію в системі та отримується і тензора провідності металевого прошарку отриманої Келером [119] на основі методу хаотичних фаз та має таку форму:

$$\epsilon_{NL}(z, z', \omega) = \frac{1}{2\pi^2 \epsilon_0 \hbar \omega^2} \sum_{n,m} \int f_{m,n}(\mathbf{q}) \frac{\mathbf{j}_{n,m}(\mathbf{q}, z) \mathbf{j}_{m,n}(\mathbf{q}, z')}{\omega + i\gamma + \omega_m - \omega_n} d\mathbf{q}. \quad (3.18)$$

У цьому рівнянні $f_{m,n}(\mathbf{q})$ виражає різницю рівнів Фермі між двома станами

з енергіями $\varepsilon_m = \hbar\omega_m$ та $\varepsilon_n = \hbar\omega_n$ відповідно, а $\mathbf{j}_{n,m}$ – матричний елемент поверхневого струму, який залежить від вигляду хвильової функції Ψ_n , що відповідає стану з енергією $\varepsilon_n = \hbar\omega_n$.

$$\mathbf{j}_{n,m} = -\frac{e\hbar}{2mi}(2i\mathbf{q}A_{n,m}(z) + e_z B_{n,m}(z)) \quad (3.19)$$

тут

$$\begin{aligned} A_{n,m} &= \Psi_n(z)\Psi_m^*(z), \\ B_{n,m} &= \Psi_m^*(z)\frac{\partial\Psi_n(z)}{\partial z} - \Psi_n(z)\frac{\partial\Psi_m^*(z)}{\partial z}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Як зазначається в самій роботі анізотропну частину проникності усереднено, що дає в результаті ступінчасту функцію відгуку і ефект “проникнення” входить тільки в L -компоненту, а ефект міжзонного переходу в області діелектриків буде описано через дещо “штучну” модифікацію цієї ж компоненти. З цією метою введено функцію відгуку електронів металу, які є цілком локалізовані в межах металу-“желе”:

$$\epsilon_{bound} = \epsilon_{metal}(\omega) - \epsilon_{bulk}(\omega). \quad (3.21)$$

Об’ємна функція відгуку $\epsilon_{bulk}(\omega)$, яка включає в себе об’ємну плазмову частоту $\omega_p = \sqrt{ne^2/m\epsilon_0}$, фактично є класичною моделлю Друде

$$\epsilon_{bulk}(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega}, \quad (3.22)$$

а $\epsilon_{metal}(\omega)$ – експериментально отримана функція відгуку металу (для значень для багатьох благородних металів див. наприклад [120]). Врешті результуючий вираз для L -компоненти можна подати у такій формі [134]:

$$\epsilon_L(z, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2(z)}{\omega^2 + i\gamma\omega} + (\epsilon_s(z) - 1)\Theta(|z| - l/2) + \epsilon_{bound}(\omega)\Theta(l/2 - |z|), \quad (3.23)$$

де доданок $(\epsilon_s(z) - 1)\Theta(|z| - l/2)$ відповідає за вплив стінок-діелектриків.

Вираз (3.18), який відповідає за анізотропію в металі теж діє в області

$\Theta(|z| - l/2)$ та має такий остаточний вигляд:

$$\begin{aligned}\epsilon_{NL} &= \frac{e^2}{\pi d \epsilon_0 \hbar^2 (\omega + i\gamma)^2} \sum_{m,n} g_{mn} \frac{\epsilon_{mn}^2 (\epsilon_F - \epsilon_n) \Theta(\epsilon_F - \epsilon_n)}{\epsilon_{mn}^2 - \hbar^2 (\omega + i\gamma)^2}, \\ \epsilon_{mn} &= \epsilon_m - \epsilon_n, \\ g_{mn} &= \frac{2m}{\hbar^2} |\langle \Psi_m | z | \Psi_n \rangle|^2 \epsilon_{mn}.\end{aligned}\tag{3.24}$$

Наостанок зауважимо, що отримана модель дає змогу отримати діелектричний тензор записаний у діагональному вигляді в якому компоненти описуються наведеними тут локальною та нелокальною компонентами

$$\epsilon(z, \omega) = \begin{pmatrix} \epsilon_L & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_L & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_P \end{pmatrix},\tag{3.25}$$

$$\epsilon_P = \epsilon_L + \epsilon_{NL} \Theta(|z| - l/2).$$

Останньою розглянемо модель діелектричного тензора у низькорозмірних системах [94]. У ній в рамках формалізму матриці густини розглянуто вплив вимушеного гармонічного векторного електромагнітного потенціала $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$ на електронну систему розраховується використовуючи квантову теорію збурень [97, 98] для гамільтоніана системи

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_0 + \delta\hat{H}, \\ \hat{H}_0 &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \\ \delta\hat{H} &= -\frac{e}{2mc}(\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}})\end{aligned}\tag{3.26}$$

матриці густини

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &= \hat{\rho}_0 + \delta\hat{\rho}, \\ \delta\hat{\rho} &= \hat{\rho}e^{-i\omega t}\end{aligned}\tag{3.27}$$

та матриці поверхневих струмів

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{j}} &= \hat{\mathbf{j}}_0 + \delta\hat{\mathbf{j}}, \\ \delta\hat{\mathbf{j}} &= -\frac{e^2}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}', t) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}).\end{aligned}\tag{3.28}$$

У цих виразах $\hat{\mathbf{p}}$ – оператор імпульсу, а $\hat{\rho}_0$ та $\hat{\mathbf{j}}_0$ густина зарядів та оператор струмів за умови відсутності вимушуючого (збурюючого) поля, а потенціал $V(\mathbf{r})$ моделює вплив діелектричних поверхонь.

Відомо [126], що тензор діелектричної провідності можна подати так:

$$\epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})\delta_{\mu\nu} + \frac{4\pi i}{\omega}\sigma_{\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (3.29)$$

де $\sigma_{\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ – тензор провідності металевого прошарку [94, 127, 128]:

$$\begin{aligned} \sigma_{\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \frac{ie^2}{m\omega} \sum_{\alpha} f_{\alpha} |\Psi_{\alpha}(\mathbf{r}')|^2 \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \delta_{\mu\nu} + \\ &+ \frac{ie^2}{4m^2\omega} \sum_{\alpha\beta} \frac{f_{\alpha} - f_{\beta}}{\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\beta}} \frac{\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\beta} - i\hbar\gamma}{\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\beta} - \hbar\omega - i\hbar\gamma} \times \end{aligned} \quad (3.30)$$

$$\times (\Psi_{\beta}^*(\mathbf{r}) \hat{p}_{\mu} \Psi_{\alpha}(\mathbf{r}) - \Psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \hat{p}_{\mu} \Psi_{\beta}^*(\mathbf{r})) (\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}') \hat{p}'_{\nu} \Psi_{\beta}(\mathbf{r}') - \Psi_{\beta}(\mathbf{r}') \hat{p}'_{\nu} \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}'))$$

тут Ψ_{α} є хвильовою функцією електрона в електронному газі, який обмежений в потенціальною ямою $V(\mathbf{r})$ з квантовим числом α . Разом два останні рівняння і застосування оператора імпульсу дають загальний вираз для компонент $\mu, \nu = \{x, y, z\}$ діелектричного тензора:

$$\begin{aligned} \epsilon_{\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \epsilon_{\mu\nu}^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \epsilon_{\mu\nu}^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \\ \epsilon_{\mu\nu}^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \left(1 - \frac{V\omega_p^2}{N\omega^2} \sum_{\alpha} f_{\alpha} |\Psi_{\alpha}(\mathbf{r}')|^2 \right) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \delta_{\mu\nu} \\ \epsilon_{\mu\nu}^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \frac{\hbar^2 V \omega_p^2}{4mN\omega^2} \sum_{\alpha\beta} \frac{f_{\alpha} - f_{\beta}}{\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\beta}} \frac{\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\beta} - i\hbar\gamma}{\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\beta} - \hbar\omega - i\hbar\gamma} \times \\ &\times (\Psi_{\beta}^*(\mathbf{r}) \nabla_{\mu} \Psi_{\alpha}(\mathbf{r}) - \Psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \nabla_{\mu} \Psi_{\beta}^*(\mathbf{r})) \times \\ &\times (\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}') \nabla'_{\nu} \Psi_{\beta}(\mathbf{r}') - \Psi_{\beta}(\mathbf{r}') \nabla'_{\nu} \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}')) \end{aligned} \quad (3.31)$$

Оскільки надалі нас в роботі цікавитиме тільки компонента zz , то тут наведемо вирази, які отримані саме для неї. Наприклад у випадку, коли коли потенціал $V(\mathbf{r})$ відповідає потенціалу нескінченно глибокої потенціальної ями,

i [98]

$$\Psi_{k_x, k_y, k_n} = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{V}} e^{ik_x} e^{ik_y} \sin k_n z & \text{if } 0 < z < l, \\ 0 & \text{if } z \leq 0, z \geq l, \end{cases} \quad (3.32)$$

$$k_n = \frac{\pi n}{l},$$

то отримуємо, що

$$\begin{aligned} \epsilon_{zz}^{(1)}(z, z') &= \left(1 - \frac{V\omega_p^2}{N\omega^2} \sum_{n=1}^{n_F} (k_F^2 - k_n^2) \sin^2 k_n z' \right) \delta(z' - z) \\ \epsilon_{zz}^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \frac{2V\omega_p^2}{\pi n l^2 \omega^2} \sum_{n=1}^{n_F} \sum_{m=1, n \neq m}^{\infty} \frac{k_F^2 - k_n^2}{k_m^2 - k_n^2} \left(1 + \frac{k_\omega^2 (k_\omega^2 + ik_\gamma^2)}{(k_n^2 - k_m^2)^2 - (k_\omega^2 + ik_\gamma^2)^2} \right) \times \\ &\quad \times (k_n \sin k_m z \cos k_n z - k_m \sin k_n z \cos k_m z) \times \\ &\quad \times (k_n \sin k_m z' \cos k_n z' - k_m \sin k_n z' \cos k_m z') \end{aligned} \quad (3.33)$$

де n_F – максимальна кількість рівнів розмірного квантування

$$n_F = \left\lceil \frac{lk_F}{\pi} \right\rceil, \quad k_\omega^2 = \frac{2m\omega}{\hbar} k_\gamma^2 = \frac{2m\gamma}{\hbar}.$$

Додатково зауважимо, що в цьому випадку $\epsilon_{zz}^{(1)} = \epsilon_{xx}^{(1)} = \epsilon_{yy}^{(1)}$.

Також важливо насамкінець відмітити, що за умови однорідної металевієї плівки, тобто, коли справджується співвідношення

$$|k_n^2 - k_m^2| \ll k_\omega^2, k_\gamma^2.$$

розглянута модель співпадає із класичною моделлю Друде.

3.3 Дослідження впливу умови електронейтральності та кулонівських кореляцій на спектр плазмон-поляритонних хвиль

Більшість попередньо розглянутих моделей трактують поверхні поділу середовищ, як такі, на яких впливи фізичних характеристик середовищ змінюються стрибкоподібно. Тобто, вплив на поведінку ППХ окремо взятого

середовища, обмежується його геометричною межею. Насправді, такий підхід не є цілком коректним, особливо, коли ми намагаємось точніше описати поведінку ППХ на поверхні АТМП, для яких вплив розмірних та квантово розмірних ефектів, як уже зазначалось, є значною мірою суттєвим. Надалі у цьому підпункті ми розглянемо яким чином в околі границь поділу областей можна врахувати крайові ефекти, описуючи їх через умову електронейтральності й кулонівські міжелектронні кореляції та вираховуючи вплив цих явищ на спектр ППХ.

3.3.1 Умова електронейтральності

Розгляду умови електронейтральності в (над)тонких металевих плівках присвячено чимало робіт, як дещо давніших [140] так й більш сучасних [100, 141, 142] у яких плівка розглядається як система невзаємодіючих електронів. У роботі [100] доведено та наочно показано, що загальноприйнятий підхід до врахування умови електронейтральності для металевих плівок, у основі якого лежить припущення, що ширина потенціальної ями є рівною геометричній ширині плівки, є некоректним і веде до результатів, які не узгоджуються з відомими. Хоча, для повноти картини, варто зазначити, що до цієї роботи також були опубліковані праці [143, 144] в яких було враховано й цей момент, але у них було взято некоректні значення для відстаней між стінками металу та межею потенціальної ями. Проте, незважаючи на цей факт, результати отримані для хімічного потенціалу μ в цих роботах доволі добре узгоджуються із вже відомими в літературі результатами.

Як було сказано раніше, коректне врахування умови електронейтральності дає коректні значення для хімічного потенціалу μ та його поведінку в залежності від товщини та матеріалу АТМП. Для цієї роботи та моделей, побудованих у ній, це є важливим, оскільки хімічний потенціал має безпосередній вплив на значення хвильового вектора Фермі k_F . А саме через нього ми визначаємо кількість рівнів розмірного квантування у сумі для моделі діелектричної проникності АТМП (3.33) розглянутої в попередньому розділі, та яку надалі ми будемо використовувати при проведенні математичного моделювання.

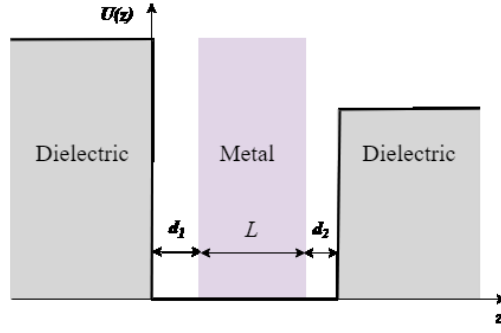


Рис. 3.1: Потенціальна яма.

Тут ми будемо моделювати систему невзаємодіючих електронів у асиметричній прямокутній потенціальній ямі скінченної глибини (рис. 3.1). Додатково ми тільки враховуватимемо тут просторову дисперсію вздовж осі Z нехтуючи нею в площині XOY , а тому маємо, що $\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel} = 0$. Таке припущення є допустимим в умовах розглядуваної геометрії задачі в якій площину XOY можна вважати нескінченно великою в порівнянні з товщиною плівки.

У цьому випадку як функцію діелектричної проникності $\epsilon_2(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel}, z, z', \omega)$ ми використаємо $\epsilon_{zz}^{(1)}$ компоненту діелектричного тензора (3.33)

$$\epsilon_2(0, z, z', \omega) = \epsilon_2(z, \omega) \delta(z - z') = \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\pi n_e \omega^2} \sum_{n=1}^{n_{max}} (k_F^2 - \alpha_n^2) |\phi_n(z)|^2 \right) \delta(z - z'). \quad (3.34)$$

Стінки ями моделюємо тут асиметричним потенціалом

$$U(z) = \begin{cases} U_1 & \text{якщо } z \leq 0, \\ 0 & \text{якщо } 0 < z < l_w, \\ U_2 & \text{якщо } z \geq l_w. \end{cases} \quad (3.35)$$

Тут l_w – ширина потенціальної ями, тут U_i – робота виходу електрона для діелектриків між якими затиснуто АТМП [80]. Функція

$$\Psi_n(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2}{S}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\parallel})} \phi_n(z). \quad (3.36)$$

є хвильовою функцією електрона у АТМП оточеної потенціальними стінками,

а $\phi_n(z)$ – розв’язок стаціонарного рівняння Шредінгера.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} \phi_n(z) + U(z)\phi_n(z) = W\phi_n(z), \quad (3.37)$$

з однорідними крайовими умовами Діріхле на краях ями

$$\Psi_n(\mathbf{r})|_{z=0} = \Psi_n(\mathbf{r})|_{z=l_w} = 0, \quad (3.38)$$

тут W – повна енергія, яка менша глибини потенціальної ями.

Розв’язуючи (3.37) з потенціалом (3.35) та враховуючи умови (3.38) отримуємо, що (див. напр. [101]):

$$\phi_n(z) = C(\alpha) \begin{cases} \frac{\alpha}{s_1} e^{\sqrt{s_1^2 - \alpha^2} z} & \text{якщо } z \leq 0, \\ \sin(\alpha z + \arcsin \frac{\alpha}{s_1}) & \text{якщо } 0 < z < l_w, \\ \sin(\alpha l_w + \arcsin \frac{\alpha}{s_1}) e^{-\sqrt{s_2^2 - \alpha^2}(z - l_w)} & \text{якщо } z \geq l_w; \end{cases} \quad (3.39)$$

$$s_i = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} U_i}, \quad i = 1, 2.$$

Тут $C(\alpha)$ – нормалізуюча стала, яку отримуємо з умови нормування

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi_n(z)|^2 dz = 1, \quad (3.40)$$

і задається виразом:

$$C(\alpha) = \sqrt{\frac{2}{l_w + \frac{(\alpha/s_1)^2}{\sqrt{s_1^2 - \alpha^2}} + \frac{(\alpha/s_2)^2}{\sqrt{s_2^2 - \alpha^2}} - \frac{1}{\alpha} \sin(\alpha l_w) \cos(\alpha l_w + 2 \arcsin \frac{\alpha}{s_1})}}. \quad (3.41)$$

Далі застосували умови гладкості функції $\phi_n(z)$ на межах ями $z = 0$ та $z = l_w$

$$\begin{aligned} \phi_n(-0) &= \phi_n(+0), \quad \phi_n(-l) = \phi_n(+l), \\ \frac{d\phi_n(-0)}{dz} &= \frac{d\phi_n(+0)}{dz}, \quad \frac{d\phi_n(-l)}{dz} = \frac{d\phi_n(+l)}{dz} \end{aligned} \quad (3.42)$$

і умови нормування (3.40). отримуємо трансцендентне алгебраїчне рівняння

для знаходження зв'язаних квантових станів α_n :

$$\alpha_n l_w = \pi n - \arcsin \frac{\alpha_n}{s_1} + \arcsin \frac{\alpha_n}{s_2}. \quad (3.43)$$

Максимальне число зв'язаних станів n_{max} знаходимо розглянувши точки дотику сімейства кривих, які визначаються правою частиною рівняння та прямої $y = l_w \alpha$. Як результат одержуємо вираз, який визначає n_{max} :

$$n_{max} = \left[\frac{1}{\pi} \left(l_w \min(s_1, s_2) + \arcsin \frac{\min(s_1, s_2)}{s_1} + \arcsin \frac{\min(s_1, s_2)}{s_2} \right) \right], \quad (3.44)$$

де квадратні дужки позначають взяття цілої частини. Оскільки, як уже зазначалось, ширина потенціальної ями є більшою за товщину АТМП, то для врахування умови електронейтральності покладемо [100, 102]

$$l_w = l + d_1 + d_2, \quad (3.45)$$

де d_i , $i = 1, 2$ позначають глибину проникнення електронів в діелектричні середовища (див. рис. 3.1)

Вирази для d_i було отримано у [102]:

$$d_i = \frac{3\pi}{8k_F} + \frac{\pi^2}{8k_F^2 l_w} - \frac{3}{4k_F} \left(\sqrt{\frac{s_i^2}{k_F^2} - 1} + \left(2 - \frac{s_i^2}{k_F^2} \right) \arcsin \frac{k_F}{s_i} \right), \quad i = 1, 2. \quad (3.46)$$

У останньому рівнянні хвильовий вектор Фермі $k_F = \sqrt{2m\mu}/\hbar$ є невідомим та повинен бути визначений із умови електронейтральності.

Умова електонейтральності для нашої системи має такий вигляд [100]:

$$\rho_0 S l = e n_e. \quad (3.47)$$

З цього виразу, якщо взяти вираз для концентрації електронів n_e у невзаємодіючому електронному газі при низьких температурах

$$n_e = \sum_{\mathbf{q}, \alpha} \Theta(k_F^2 - \mathbf{q}^2 - \alpha^2) = \frac{S}{2\pi} \sum_{n=1}^{n_{max}} (k_F^2 - \alpha_n^2)$$

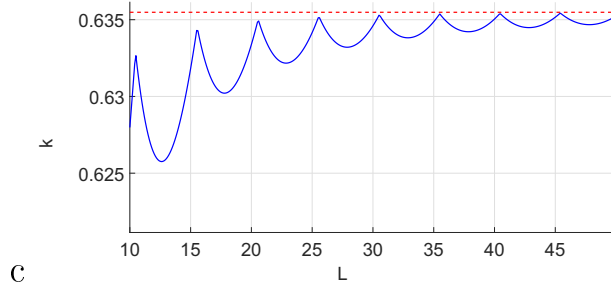


Рис. 3.2: Хвильовий вектор Фермі. Червоні штрихові лінії - (а) $k_F = k_{F,bulk}$; Сині суцільні лінії - (b) $l_w = l + d_1 + d_2$

та припустивши, що концентрація позитивного заряду є такою [100]

$$\rho_0 = \frac{3e}{4\pi r_s^3}$$

то остаточно отримуємо, що для виконання умови електронейтральності (3.47), слід вважати:

$$\frac{2}{3r_s^3} = \frac{1}{l} \sum_{n=1}^{n_{max}} (k_F^2 - \alpha_n^2), \quad (3.48)$$

Розрахунок хвильового вектора Фермі за формулою (3.48) та порівняння з класичним підходом для різних товщин АТМП показує, що із збільшенням товщини АТМП значення хвильового вектора Фермі знизу наближається до його об'ємного значення, при цьому спостерігається характерна осциляційна картина, яка породжена дискретизацією рівнів розмірного квантування у потенціальній ямі (рис. 3.2).

Для знаходження частотного спектру ППХ, як уже зазначалося, потрібно розглянути рівняння Максвелла (2.54) для АТМП зі змодельованою функцією діелектричної проникності. Щоб отримати аналітичний розв'язок рівняння (2.54) з діелектричною функцією (3.34) представимо (3.34) таким чином:

$$\epsilon_2(z, z', \omega) = (\epsilon_2(l, \omega) + \alpha \Delta \epsilon_2(z, \omega)) \delta(z - z'), \quad (3.49)$$

де

$$\epsilon_2(l, \omega) = \frac{1}{l} \int_0^l \epsilon_2(z, \omega) dz = 1 - \frac{\omega_p^2}{2\pi n_e \omega^2} \sum_{n=1}^{n_{max}} (k_F^2 - k_n^2) |\overline{\phi_n(z)}|^2, \quad (3.50)$$

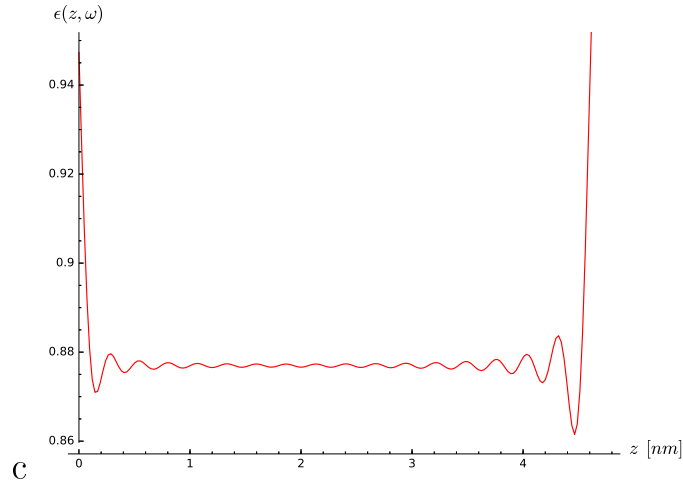


Рис. 3.3: Діелектрична проникність металевої плівки $l = 5nm$ при частоті $\frac{\omega}{\omega_p} = 4$.

а

$$\begin{aligned} \overline{|\phi_n(z)|^2} &= \frac{1}{l} \int_0^l |\phi_n(z)|^2 dz = \\ &= |A|^2 \left(\frac{1}{2} \left(\frac{\chi_1^2}{k^2} + 1 \right) + \frac{\chi_1}{2k^2 l} \left(1 - \cos(2kl) \right) + \frac{1}{4l} \left(\frac{1}{k} - \frac{\chi_1^2}{k^3} \right) \sin(2kl) \right). \end{aligned} \quad (3.51)$$

Зауважимо тут, що усереднення (3.50) є допустимим, оскільки діелектрична функція (3.34) значно відхиляється від константного значення тільки на краях ями (рис. 3.3).

Підставимо (3.50) у (2.54) і отримуємо

$$\frac{\partial^2 H_y(z)}{\partial z^2} + (k_0^2(\epsilon_2(l, \omega) + \alpha \Delta \epsilon_2(z, \omega)) - k_x^2) H_y(z) = 0. \quad (3.52)$$

Розв'язок рівняння (3.52) для $H_y(z, \omega)$ можна шукати у вигляді ряду по степенях η , прийнявши його за малий параметр, тому

$$H_y(z, \omega) = \sum_{m=0}^{\infty} \eta^m H_m(z, \omega). \quad (3.53)$$

Підставивши (3.53) у (3.52) отримаємо систему диференціальних рівнянь

$$\begin{aligned}
 \eta^0 &: \frac{\partial^2 H_0(z)}{\partial z^2} + (k_0^2 \epsilon(l, \omega) - k_x^2) H_0(z) = 0, \\
 \eta^1 &: \frac{\partial^2 H_1(z)}{\partial z^2} + (k_0^2 \epsilon(l, \omega) - k_x^2) H_1(z) = -k_0^2 \eta \Delta \epsilon(z, \omega) H_0(z), \\
 &\dots \\
 \eta^i &: \frac{\partial^2 H_i(z)}{\partial z^2} + (k_0^2 \epsilon(l, \omega) - k_x^2) H_i(z) = -k_0^2 \eta \Delta \epsilon(z, \omega) H_{i-1}(z).
 \end{aligned} \tag{3.54}$$

Для моделювання впливу умови електронейтральності АТМП на спектр ППХ ми розглянемо нульове наближення $H_y(z, \omega) \approx H_0(z, \omega)$.

У цьому випадку дисперсійне рівняння для знаходження спектру має вигляд

$$e^{-4k_1 l/2} = \frac{k_1/\epsilon_1 + k_2/\epsilon_2}{k_1/\epsilon_1 + k_2/\epsilon_2} \frac{k_3/\epsilon_1 + k_3/\epsilon_2}{k_3/\epsilon_3 + k_2/\epsilon_2}, \tag{3.55}$$

$$k_i^2 = k_x^2 - k_0^2 \epsilon_i, \quad i = 1, 2, 3, \tag{3.56}$$

що співпадає із результатами отриманими в [1, 133]. Тут $\epsilon_1 = \epsilon(\omega)$, $\epsilon_2 = \epsilon(l, \omega)$, $\epsilon_3 = \epsilon(\omega)$.

Для отриманої моделі (3.55) проведено ряд комп'ютерних симуляцій для структур з параметрами шарів, які відповідають таким реальним плазмонним структурам: *Vacuum/Ag/Al₂O₃*, *SiO₂/Ag/Al₂O₃*, *Vacuum/Ag/Si*. Дані для симуляції подано у таб. 3.1. Усі параметри для *Ag* розміщеного на *Si* підкладці взято з [138, 139] та [25].

Структура	ϵ_1	ϵ_2	$U_1(eV)$	$U_2(eV)$
<i>Vacuum/Ag/Al₂O₃</i>	1	9	9.855	8.505
<i>SiO₂/Ag/Al₂O₃</i>	4	9	8.755	8.505
<i>Vacuum/Ag/Si</i>	1	13	9.855	5.805

Табл. 3.1: Параметри структур, використані в комп'ютерних симуляціях.

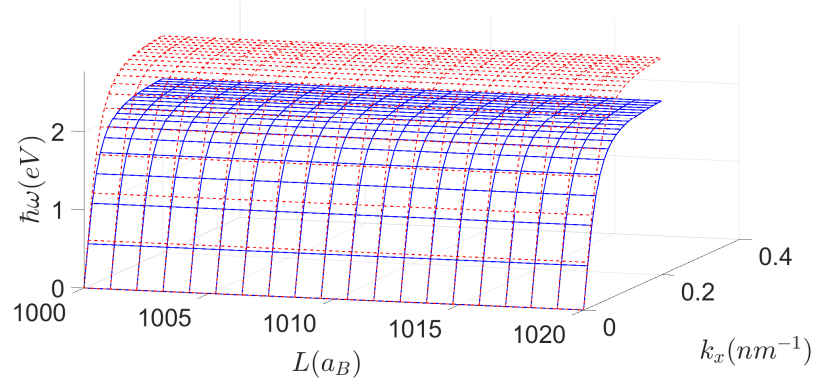


Рис. 3.4: Залежність частотного спектру ППХ від товщини АТМП для *Vacuum/Ag/Al₂O₃*. Червоні лінії - модель Друде ($\epsilon_D(\omega)$), сині лінії - $\epsilon_2(l_w, \omega)$.

На рис. 3.4 показано результати симуляції для “доволі великих” товщин АТМП в контексті цієї моделі – 1000 ÷ 1020 борівських радіусів та порівняно отримані результати з аналогічними даними одержаними для моделі Друде в якій знехтувано затушенням [1] для *Vacuum/Ag/Al₂O₃*.

$$\epsilon(\omega, l_w) = \epsilon_D(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega} \quad (3.57)$$

Бачимо, що навіть для таких товщин спостерігається значна різниця між значеннями розрахованими для частотного спектру, проте сосстерігається плавне наближення знизу до значень розрахованих для моделі Друде.

На рис. 3.7, 3.5 та 3.6 показано результати комп’ютерної симуляції поширення ППХ в структурах *Vacuum/Ag/Al₂O₃*, *SiO₂/Ag/Al₂O₃* and *Vacuum/Ag/Si* для АТМП товщиною $\sim 10 \div 50$ борівських радіусів.

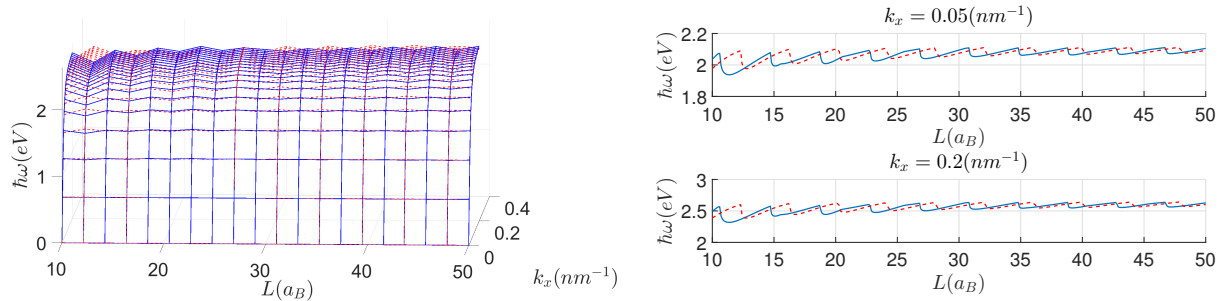


Рис. 3.5: Залежність частотного спектру ППХ від товщини АТМП для *SiO₂/Ag/Al₂O₃*. Червоні лінії - (а) $k_F = k_{F,bulk}$; сині лінії - (б) $l_w = l + d_1 + d_2$

У таб. 3.2 наведено результати порівняння симульованих даних з експериментом [25] для структури *Vacuum/Ag/Si* товщина якої складає

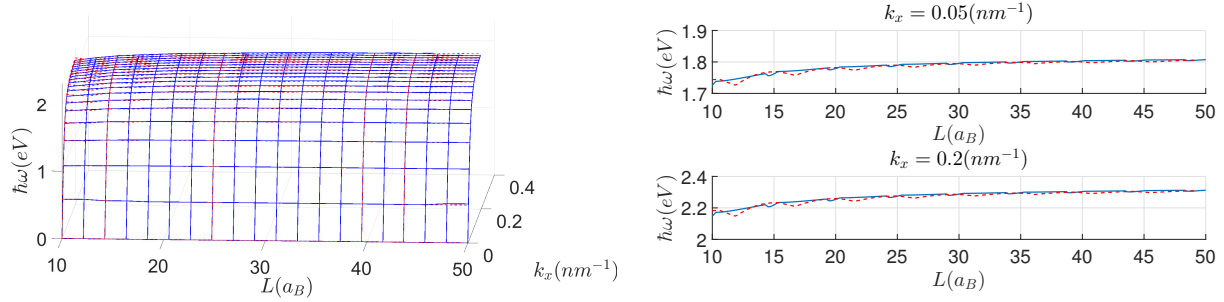


Рис. 3.6: Залежність частотного спектру ППХ від товщини АТМП для *Vacuum/Ag/Si*. Червоні лінії - (а) $k_F = k_{F,bulk}$; сині лінії - (б) $l_w = l + d_1 + d_2$

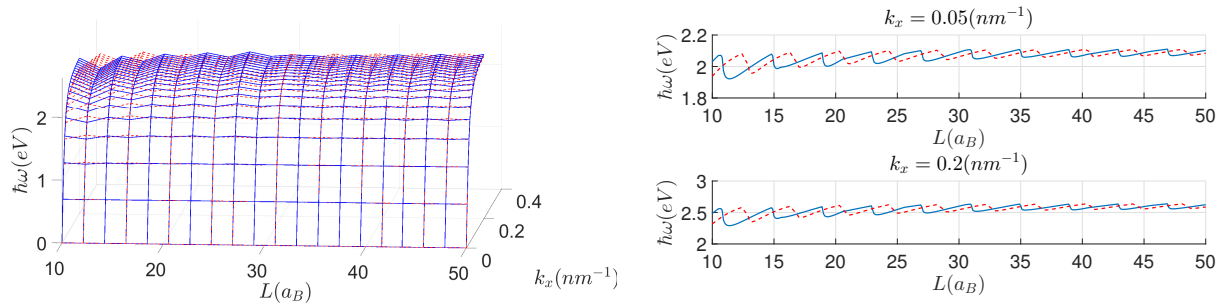


Рис. 3.7: Залежність частотного спектру ППХ від товщини АТМП *Vacuum/Ag/Al₂O₃*. Червоні лінії - (а) $k_F = k_{F,bulk}$; сині лінії - (б) $l_w = l + d_1 + d_2$

$l \approx 2.4\text{nm}$ або ≈ 43.54 борівських радіуси. На жаль, у праці [25] представлено дані тільки для малих значень хвильових векторів ($k_x \lesssim 0.1\text{nm}^{-1}$). Тим не менш, ми можемо бачити, що зі зростанням значень хвильового вектора k_x розходження між симульованими та експериментальними даними також зростає. Зазначимо тут також, що хоча й для структури *Vacuum/Ag/Si* різниця між моделлю Друде та моделлю використаною в симуляції практично відсутня ми наводимо й ці дані для формування повноти картини.

3.3.2 Кулонівські кореляції

Незначна різниця між значенням вектора Фермі розрахована для об'ємного матеріалу та значеннями отриманими для АТМП з врахуванням умови електронейтральності спричинила також, як свідчать результати моделювання, зміну поведінки частотного спектру ППХ та дещо краще узгодження з експериментальними даними у порівнянні з класичною моделлю Друде, хоча й не дуже значне. Тому логічно нашим подальшим кроком буде спроба покращити нашу математичну модель, щоб досягнути кращого співпадіння з експериментом. З цією метою як і в попередньому випадку ми розглядатимемо

$k_x \approx 0.028nm^{-1}$				$k_x \approx 0.049nm^{-1}$			
k_x	(a)	(b)	(e)	k_x	(a)	(b)	(e)
0.02731	1.272	1.272	0.62	0.04824	1.774	1.776	0.8
0.02753	1.279	1.280	0.62	0.04847	1.778	1.780	0.8
0.02776	1.287	1.288	0.62	0.04870	1.781	1.784	0.8
0.02799	1.294	1.295	0.62	0.04892	1.785	1.787	0.8
0.02822	1.302	1.303	0.62	0.04915	1.789	1.791	0.8
0.02844	1.309	1.310	0.62	0.04938	1.792	1.795	0.8
0.02867	1.316	1.317	0.62	0.04961	1.796	1.798	0.8

Табл. 3.2: Порівняння з експериментом для структури *Vacuum/Ag/Si*, товщиною $l \approx 2.4nm$. (a) - $k_F = k_{F,bulk}$, (b) - $l_w = l + d_1 + d_2$, (e) - експериментальні дані. a_0 - борівський радіус.

проникнення експонентного “хвоста” в діелектрик в рамках моделі “желе”, але враховуючи кулонівські кореляції [99, 129].

Поверхневий потенціал змодельємо прямокутною потенціальною ямою безкінечної глибини та з шириною l_w

$$U(z) = \begin{cases} \infty & \text{якщо } z \leq 0, z \geq l_w, \\ 0 & \text{якщо } 0 < z < l_w; \end{cases} \quad (3.58)$$

Як уже зазначалось такий потенціал допускає аналітичний розв’язок рівняння Шредінгера для електрона

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} \Psi_n(\mathbf{r}) + U(z) \Psi_n(\mathbf{r}) = W_n \Psi_n(\mathbf{r}), \quad (3.59)$$

$$\mathbf{r} = (\mathbf{r}_{\parallel}, z),$$

з однорідними граничними умовами Діріхле на краях ями

$$\Psi_n(\mathbf{r})|_{z=0} = \Psi_n(\mathbf{r})|_{z=l_w} = 0, \quad (3.60)$$

$$\Psi_n(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2}{S}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\parallel})} \phi_n(z). \quad (3.61)$$

$\phi_n(z)$ для потенціалу (3.58) має добре відому форму:

$$\phi_n(z) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{l_w}} \sin(\alpha z) & \text{якщо } 0 < z < l_w, \\ 0 & \text{якщо } z \leq 0 \text{ } z \geq l_w. \end{cases} \quad (3.62)$$

Квантові числа α_n і максимальна кількість зв'язних станів n_{max} задається такими співвідношеннями [98, 99]:

$$\alpha_n = \frac{\pi n}{l_w}, \quad n_{max} = \left[\frac{l_w k_F}{\pi} \right], \quad (3.63)$$

Як і у випадку з умовою електронейтральності ширина потенціальної ями l_w є більшою від ширини металевієї плівки l на певну величину. У цьому випадку вона відрізнятиметься на залежну від хвильового вектора Фермі величину d з обох боків плівки.

$$\begin{aligned} l_w &= l + 2d, \\ d(k_F) &= \frac{3\pi}{8k_F} + \frac{\pi^2}{8k_F^2 l_w}, \end{aligned} \quad (3.64)$$

тобто величина d є функцією невідомої k_F та геометричної ширини металу l . Остаточно [99]

$$l_w(k_F) = \frac{l}{2} + \frac{3\pi}{8k_F} + \frac{\sqrt{16k_F^2 l^2 + 24\pi k_F l + 25\pi^2}}{8k_F}. \quad (3.65)$$

У цій моделі пропонується врахувати кулонівські кореляції через їхній вплив на хімічний потенціал μ і, як наслідок, на число рівнів розмірного квантування n_{max} тільки на діелектричну функцію, нехтуючи їх впливом на решту складових системи.

Моделювати діелектричну функцію $\epsilon_2(0, z, z', \omega)$ будемо як і в попередньому випадку.

Комп'ютерна симуляція отриманої моделі проводилася для структур з параметрами, які відповідають реальним плазмонним структурам *Vacuum/Ag/Al₂O₃*, *Vacuum/Ag/Si*, *SiO₂/Ag/Si* (Таб. 3.3). Аналогічно до попереднього пункту усі параметри взято з робіт [25, 138, 139].

Структура	ϵ_1	ϵ_2
<i>Vacuum/Ag/Al₂O₃</i>	1	9
<i>Vacuum/Ag/Si</i>	1	12
<i>SiO₂/Ag/Si</i>	2.4	12

Табл. 3.3: Параметри структур, використані в комп'ютерних симуляціях.

$k_x \approx 0.028nm^{-1}$			$k_x \approx 0.049nm^{-1}$		
(a)	(b)	(e)	(a)	(b)	(e)
0.696	1.288	0.62	0.889	1.784	0.8

Табл. 3.4: Порівняння з експериментом для структури *SiO₂/Ag/Si* у випадку плівки товщиною $l = 43.5a_0$ борівських радіуси. (a) - з врахуванням кулонівських кореляцій, (b) - з повним врахуванням умови електронейтральності.

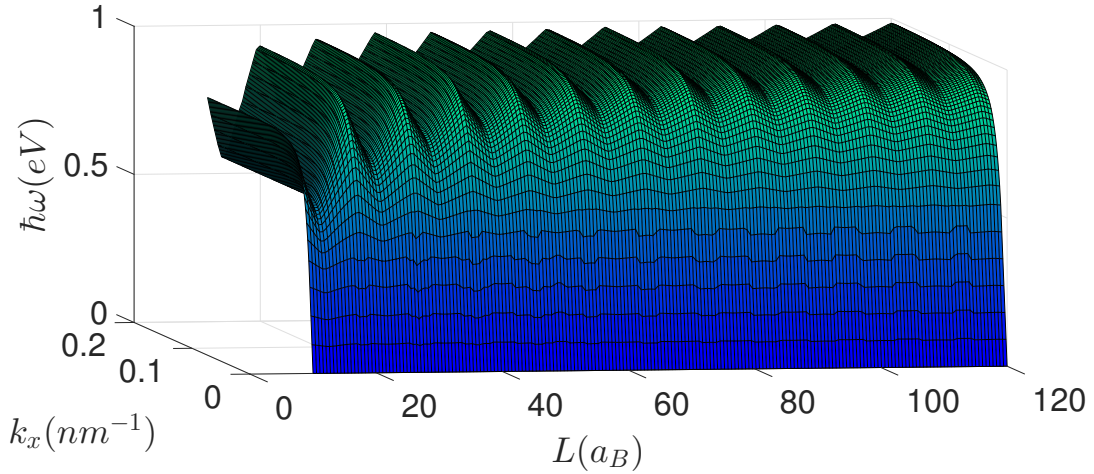


Рис. 3.8: Залежність частотного спектру від товщини АТМП для структури *SiO₂/Ag/Si* з врахуванням кулонівських кореляцій.

Результати комп'ютерної симуляції для знаходження частотного спектру $\omega(k_x)$ для структури *SiO₂/Ag/Si* з врахуванням кулонівських кореляцій зображено на рис. 3.8. Тут чітко помітні осциляції спричинені як квантово розмірними ефектами так і флуктаціями електронної густини на границі діелектрик/метал стику середовищ. Також варто відзначити, що амплітуда осциляцій зменшується зі зростанням товщини плівки, тобто, зменшується вплив зазначених ефектів.

Порівняння з отриманими даними для плазмонних структур *Vacuum/Ag/Si* and *Al₂O₃/Ag/Si* без врахування кулонівських кореляцій та з показують значний вплив кореляцій на частотний спектр ППХ $\omega(k_x)$ для АТМП (рис. 3.9 та рис. 3.10). Порівняння ж з результатами експерименту [25] для структури *SiO₂/Ag/Si* [25] (Таб. 3.4) свідчить про те, що врахування кулонівських дають для частотного спектру значно краще узгодження з експериментальними даними.

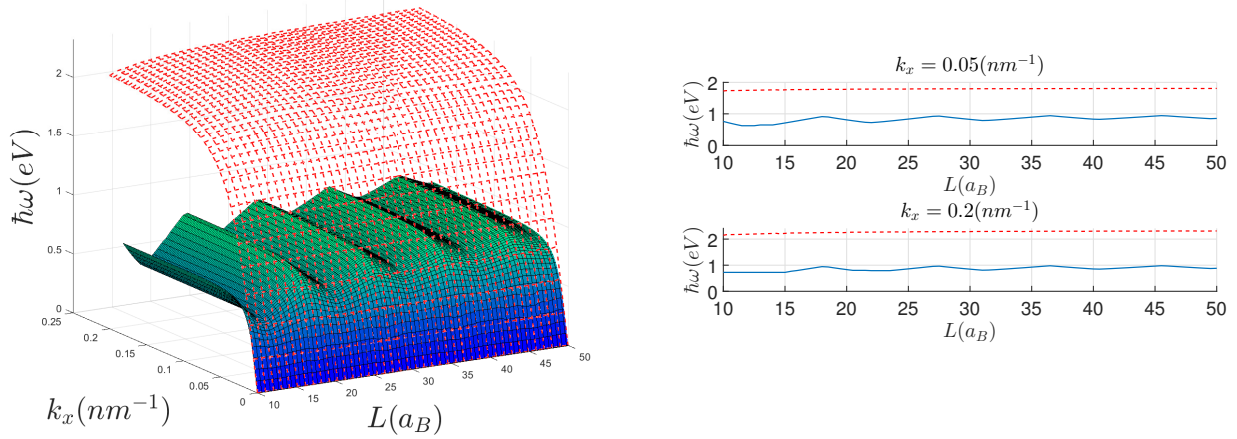


Рис. 3.9: Порівняння залежності частотного спектру від товщини АТМП для структури $SiO_2/Ag/Si$. Червоні лінії - умова електронейтральності; сині - кулонівські кореляції.

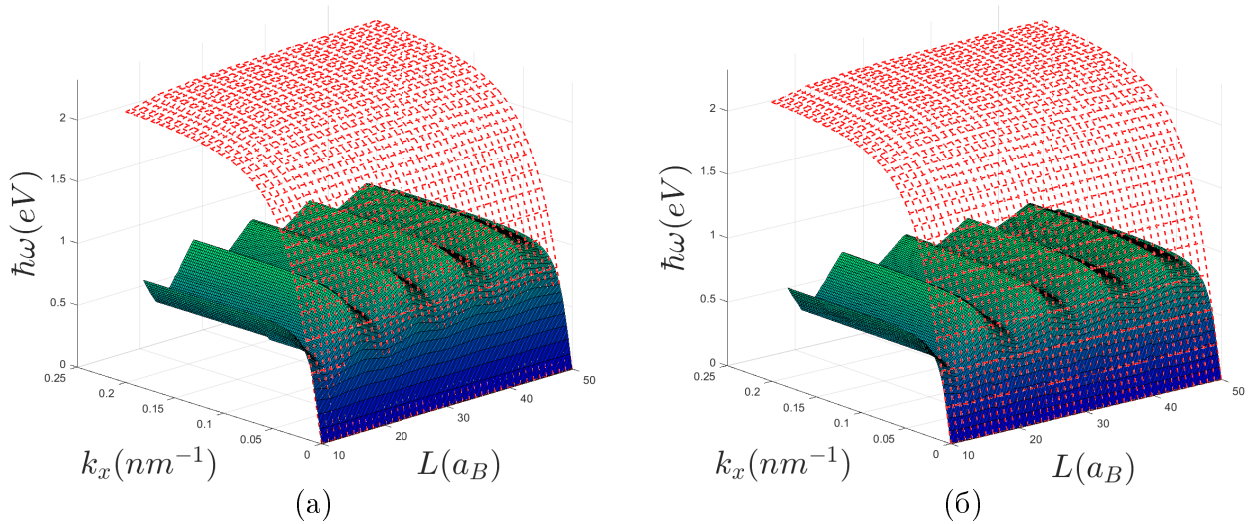


Рис. 3.10: Порівняння залежності частотного спектру від товщини АТМП для структур *a* - $Vacuum/Ag/Si$ та *b* - $Al_2O_3/Ag/Si$. Червоні лінії - умова електронейтральності; сині - кулонівські кореляції.

Розрахунок для асиметричної прямокутної потенціальної ями з врахуванням кулонівських кореляцій вимагає побудови складнішої моделі. Тому спочатку оцінимо вплив асиметричних стінок на кулонівські кореляції ввівши модельний коефіцієнт K , який задається співвідношенням між хвильовим вектором Фермі у безкінечно глибокій ямі без поправки на кулонівські кореляції $k_{F,inf}$, до значень цього ж вектора з врахуванням цих поправок $k_{F,inf}^C$:

$$K = \frac{k_{F,inf}^C}{k_{F,inf}} \quad (3.66)$$

$k_{F,inf}$ знаходимо із співвідношення [130]

$$\frac{3}{2r_s^3} = \frac{n_{max,inf}}{l} \left(k_{F,inf}^2 - \frac{\pi^2}{l_{w,inf}} (n_{max,inf} + 1)(2n_{max,inf} + 1) \right), \quad (3.67)$$

у якому $l_{w,inf}$ – ширина потенціальної ями залежна від $k_{F,inf}$.

У такій моделі ми пропонуємо шукати значення фермі-вектора k_F^C в асиметричній потенціальній ямі з врахуванням впливу кореляцій як добуток введеного модельного коефіцієнта K на k_F порахований в такій же ямі без поправки на кореляції, тобто покладаємо:

$$k_F^C = K k_F. \quad (3.68)$$

Так як, окрім k_F^C , нас також цікавлять відповідні квантові числа α^C , їхня максимальна кількість n_{max}^C та ширина потенціальної ями $l_w^C(k_F^C)$ ми скористаємося для знаходження цих величин відповідними виразами отриманими для АТМП з врахуванням електронейтральності, а саме:

$$\alpha_n l_w^C = \pi n - \arcsin \frac{\alpha_n}{s_1} + \arcsin \frac{\alpha_n}{s_2},$$

$$n_{max}^C = \left[\frac{1}{\pi} \left(l_w^C \min(s_1, s_2) + \arcsin \frac{\min(s_1, s_2)}{s_1} + \arcsin \frac{\min(s_1, s_2)}{s_2} \right) \right], \quad (3.69)$$

$$l_w^C = l + d_1 + d_2,$$

$$s_i = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} U_i}, \quad i = 1, 2.$$

Результати розрахунків подано в таблиці 3.5. Обчислення проводилися для товщин плівки $l = 10 \div 50$ борівських радіуса (a_0). Як бачимо з отриманих результатів різниця між результатами незначна – в переважній більшості у третьому знаку після коми. Кількість випадків, коли значення спектру $\omega(k_F)$ із кулонівською взаємодією менша від значень без такого врахування переважаюча (приблизно вдвічі більше - 3616 до 1969 з 5585 проведених обчислень).

Підсумовуючи ми можемо сказати, що хоча різниця між двома моделями наявна, але навіть це доволі “грубе” припущення дає змогу стверджувати, що асиметрію можна не враховувати.

k_x	$\omega(k_F)$	$\omega(k_F^C)$	Δ
$l = 10a_0$			
0.0091022	0.4176192	0.4159653	0.0016539252
0.0159288	0.5721606	0.5678336	0.0043270311
0.0250309	0.659788	0.6531173	0.0066707077
0.0341331	0.6962631	0.6884192	0.0078438605
$l = 25a_0$			
0.0091022	0.4296499	0.4351148	-0.005464896
0.0159288	0.6051573	0.621113	-0.015955668
0.0250309	0.7125119	0.7392965	-0.026784623
0.0341331	0.7593011	0.7920886	-0.032787524
$l = 43a_0$			
0.0091022	0.43597	0.5823444	-0.46374432
0.0159288	0.6236694	0.7122253	-0.088555882
0.0250309	0.7436734	0.7978894	-0.054215925
0.0341331	0.7974989	0.8392481	-0.041749187

Табл. 3.5: Результати симуляції для врахування впливу асиметрії. Перший стовпець — значення хвильового вектора у $1/nm$, другий — значення частотного спектру у випадку нескінченно глибокої потенціальної ями, третій — значення частотного спектру з врахуванням модельного коефіцієнту, четвертий — різниця між значеннями в третьому та четвертому стовпцях.

3.4 Висновки

У цьому розділі акцентується увага на тому, що розгляд металевого прошарку/АТМП як квантової плазми є загалом доцільніший, оскільки в частині випадків такий підхід дає точні результати. З огляду на це, початково розглянуто та проаналізовано модель хаотичних фаз, яка базується на ефектах екранування та колективної поведінки електронної плазми. Побудовано графіки функції діелектричної проникності “різних” металевих прошарків та порівняно з моделлю Друде.

Далі розглянуто моделі діелектричної проникності, які дозволяють дослідити вплив просторової дисперсії на АТМП. Спочатку описано просту модель провідної дисперсної системи в якій для того, щоб врахувати міжчастинкову взаємодію застосовано потенціал Пешля-Теллера та матричний елемент потенціалу електрон-електронної взаємодії.

Цікавіша модель з точки зору як і моделювання так і точності

опису поведінки діелектричної функції на границях дотику середовищ побудована на ефекті квантового “проникнення” експонентного хвоста електронів в діелектрик. Показано, що використовуючи DFT можна описати це проникнення через розгляд функції густини електронів як залежної від просторової координати z . Відмічено, що врахування зазначених ефектів дозволяє згладити різкий стрибок функції діелектричної проникності на границях середовищ.

Розгляд діелектричного тензора побудованого в рамках формалізму матриці густини та застосовуючи теорію збурень по малому параметру дав в результаті вираз для діагональної zz компоненти тензора. Отриманий вираз застосовано при врахуванні умови електронейтральності в моделі поширення ППХ в структурі ДАД. У цій металевий прошарок розглянуто в межах моделі “желе” як електронну систему поміщену в асиметричну потенціальну яку скінченної глибини. Результати моделювання показують, що в порівнянні з класичними підходами коректне врахування умови електронейтральності дає результати для частотного спектру, які краще узгоджуються з експериментом для структури $SiO_2/Ag/Si$. Також для цієї та інших змодельованих структур ДАД проявляється характерна осциляційна картина невеликої амплітуди як функція товщини металу, яка на пряму залежить від поведінки хімічного потенціалу розрахованого в таких же фізичних умовах.

З метою покращити отримані при розгляді впливу умови електронейтральності результати, а саме, одержати краще узгодження з експериментальними даними в цьому розділі розглянуто вплив кулонівських кореляцій на частотний спектр ППХ. Проведений аналіз свідчить, що для АТМП товщиною $\sim 10 \div 20$ МШ ($1\text{МШ} \approx 2.4\text{нм}$), їхній вплив є значним. Залежність частотного спектру ППХ від товщини АТМП також характеризується осциляційною картиною для плазмонних структур $Vacuum/Ag/Si$, $Vacuum/Ag/Al_2O_3$, $SiO_2/Ag/Al_2O_3$ з поступовим зменшенням амплітуди осциляцій зі зростанням товщини. Проте, які у випадку врахування умови електронейтральності $Vacuum/Ag/Si$ амплітуда осциляцій є менш помітною чим для інших структур. Найважливішим результатом, проте, є значно краще узгодження з експериментальними даними чим для інших розглянутих в цій роботі моделей, що говорить про значний вплив кулонівських кореляцій на

характеристики ППХ для АТМП.

У цілому, значення, отримані при симуляції побудованих в цьому розділі моделей показують, що врахування дискретної природи хвильового вектора Фермі в залежності від рівнів розмірного квантування в АТМП та проникнення електронної густини в площину діелектрика для ультратонких плівок мають значний вплив на частотний спектр ППХ і для характерних плазмонних структур повинні бути враховані при аналізі експериментальних даних.

РОЗДІЛ 4

Математичне моделювання поширення плазмон-поляритонних хвиль в реальних структурах діелектрик/метал/діелектрик

4.1 Плазмон-поляритонні хвилі для випадку надтонких металевих прошарків

Отримані у розділі 2 для системи рівнянь Максвелла відповідні хвильові рівняння (2.51) та (2.52) можна розв'язати забезпечивши необхідні для такої процедури крайові умови, які можна ввести використавши умови неперервності векторів наруженості \mathbf{H} та \mathbf{E} [89, 132] на геометричній границі поділу середовищ в площинах $z = +l/2$ та $z = -l/2$. Проте, тут ми дещо спростимо завдання допустивши модельне прищення в межах якого розглядатимемо АТМП як двовимірну електронну систему, для якої виконується умова $2k_F \approx 1$.

Розпочнемо з того, що знайдемо розв'язок для рівнянь (2.51) в областях діелектриків.

$$H_y^{(i)}(\omega, z) = C_1^{(i)} e^{k_i z} + C_2^{(i)} e^{-k_i z}, \quad (4.1)$$
$$k_i = \sqrt{k_x^2 + k_0^2 \epsilon_i}, \quad i = 1, 3.$$

Умови загасання ЕМ полів на безкінечності

$$\{\mathbf{H}, \mathbf{E}\}_{z \rightarrow \pm\infty} \rightarrow 0$$

визначають форму розв'язку у кожній з областей. Тому в області Ω_1 $C_1^{(1)} = 0$ і

$$H_y^{(1)} = Ae^{-k_1 z}, \quad A = C_2^{(1)}, \quad (4.2)$$

а в області Ω_2 $C_2^{(3)} = 0$ і

$$H_y^{(1)} = Be^{k_3 z}, \quad B = C_1^{(3)}. \quad (4.3)$$

У системах в яких просторова дисперсія відсутня або є зникомою зв'язок полів \mathbf{H} та \mathbf{E} для ТМ хвиль є таким (див. (2.35) або [1, 133]):

$$\begin{aligned} E_x^{(i)} &= -i \frac{1}{\omega \epsilon_0 \epsilon_i} \frac{\partial H_y}{\partial z}, \\ E_z^{(i)} &= -\frac{k_x}{\omega \epsilon_0 \epsilon_i} H_y. \end{aligned} \quad (4.4)$$

або

$$\begin{aligned} E_x^{(1)} &= i \frac{k_1}{\omega \epsilon_0 \epsilon_1} A e^{-k_1 z}, \\ E_z^{(1)} &= -\frac{k_x}{\omega \epsilon_0 \epsilon_1} A e^{-k_1 z}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned} E_x^{(3)} &= -i \frac{k_3}{\omega \epsilon_0 \epsilon_3} B e^{-k_3 z}, \\ E_z^{(3)} &= -\frac{k_x}{\omega \epsilon_0 \epsilon_3} B e^{-k_3 z}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Як зазначалось вище розгляд АТМП як двовимірної електронної системи дозволяє дещо спростити умови неперевності полів, які в цьому випадку потрібно “зшити” в площині $z = 0$. Умови зшивання в мають вигляд наведених у (2.55)

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \times (\mathbf{H}_3(-0, \omega) - \mathbf{H}_1(+0, \omega)) &= \mathbf{J}(k_x, z, \omega), \\ \mathbf{n} \cdot (\mathbf{B}_3(-0, \omega) - \mathbf{B}_1(+0, \omega)) &= 0. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Поверхневий струм \mathbf{J} в області дотику має вигляд виразу

$$\mathbf{J} = J_s(k_x, z = 0, \omega) = J_x(k_x, z = 0, \omega) = \sigma_0 \sigma(k_x, \omega) E_x(k_x, 0, \omega), \quad (4.8)$$

у якому E_x – напруженість електричного поля в площині $z = 0$.

Підставивши отримані результати для компонент ЕМ поля \mathbf{H} та \mathbf{E} в умови

зшивання (4.7) та задавши нормаль $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$ маємо

$$\begin{aligned} H_y^{(1)}(+0, \omega) - H_y^{(3)}(-0, \omega) &= -J_s(k_x, 0, \omega), \\ E_x^{(1)}(+0, \omega) &= E_x^{(3)}(-0, \omega). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Сталі A та B отримуємо з системи рівнянь

$$\begin{aligned} A - B &= A\sigma_0\sigma(k_x, \omega)\frac{k_1}{i\omega\epsilon_0\epsilon_1}, \\ A\frac{k_1}{\epsilon_1} &= -B\frac{k_3}{\epsilon_3}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Ненульовий розв'язок (4.10) існує, якщо визначник відповідної системи $\Delta = 0$:

$$\frac{k_3}{\epsilon_3} \left(1 + i\frac{k_1}{\omega\epsilon_0\epsilon_1}\sigma_0\sigma \right) + \frac{k_1}{\epsilon_1} = 0, \quad (4.11)$$

що у висліді дає дисперсійне співвідношення для нашої моделі

$$\frac{\epsilon_1(\omega)}{k_1} + \frac{\epsilon_3(\omega)}{k_3} = -\frac{\sigma_0\sigma(k_x, \omega)}{i\omega\epsilon_0}. \quad (4.12)$$

Тут важливо зауважити, що такий же ж вираз було отримано у роботі [11] для аналогічної гетерогенної плазмонної структури, тільки у ролі АТМП було взято графен, який є цілком двовимірною структурою.

Для подальшого дослідження моделі та отримання значень плазмонного спектру ППХ ми повинні задати значення для діелектричних проникностей ϵ_1 та ϵ_3 та задати модельний вираз для провідності металу $\sigma(k_x, \omega)$. Діелектричні проникності тут ми братимемо у так званому високочастотному наближенні для якого $\epsilon(-\infty) = const$, а для провідності тут використаємо згадані уже нами моделі Друде та RPA.

Провідність у моделі Друде має вигляд

$$\sigma_0\sigma(k_x = 0, \omega) = \frac{e^2 E_F}{\pi\hbar} \frac{i}{\omega + i\tau^{-1}}. \quad (4.13)$$

Ввівши безрозмірні змінні

$$q^* = \frac{k_x}{k_F}, \quad \omega^* = \frac{\hbar\omega}{E_F} \quad (4.14)$$

отримаємо знерозмірене дисперсійне співвідношення (4.12) для моделі (4.13)

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon_1}{k_1^*} + \frac{\epsilon_3}{k_3^*} &= \frac{8}{\omega^*(k_F a_0)} \frac{1}{\omega^* + i\tau^{-1*}}, \\ k_i^* &= \sqrt{q^{*2} + \lambda^* \epsilon_i(\omega^*) \omega^{*2}}, \\ \lambda^* &= \frac{E_F}{2mc^2}, \quad \tau^{-1*} = \frac{\hbar\tau^{-1}}{E_F}, \end{aligned} \quad (4.15)$$

тут a_0 – радіус Бора.

Також, надалі ми виражатимемо добуток $k_F a_0$ через параметр Гелл-Манн-Бракнера r_s [136, 137], який виражає концентрацію електронів в АТМП:

$$k_F a_0 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{2/3} r_s. \quad (4.16)$$

Провівши процедуру знерозмірення для моделі RPA ми отримуємо

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon_1}{k_1^*} + \frac{\epsilon_3}{k_3^*} &= -(\chi_1(q^*, \omega^*) + i\chi_2(q^*, \omega^*)), \\ \chi_1(q^*, \omega^*) &= G^* \left(q^* - C_- \left(\frac{1}{4} \left(q^* - \frac{\omega^*}{q^*} \right)^2 - 1 \right)^{\frac{1}{2}} - C_+ \left(\frac{1}{4} \left(q^* + \frac{\omega^*}{q^*} \right)^2 - 1 \right)^{\frac{1}{2}} \right), \\ \chi_2(q^*, \omega^*) &= G^* \left(q^* - D_- \left(1 - \frac{1}{4} \left(q^* - \frac{\omega^*}{q^*} \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} - D_+ \left(1 - \frac{1}{4} \left(q^* + \frac{\omega^*}{q^*} \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \right), \\ G^* &= \frac{2}{q^{3*}(k_F a_0)}, \\ C_{\pm} &= \frac{\left(q^* \pm \frac{\omega^*}{q^*} \right)}{\left| q^* \pm \frac{\omega^*}{q^*} \right|}, \quad D_{\pm} = 0 \quad \left| q^* \pm \frac{\omega^*}{q^*} \right| > 2, \\ C_{\pm} &= 0, \quad D_{\pm} = 1 \quad \left| q^* \pm \frac{\omega^*}{q^*} \right| < 2 \end{aligned} \quad (4.17)$$

4.2 Врахування товщини металевого прошарку на спектр плазмон-поляритонних хвиль

Примітно, що переважна більшість розглянутих класичних, квазікласичних та квантових моделей діелектричних проникностей та провідностей АТМП не містять в собі залежностей від просторових координат, що в певній мірі накладає обмеження на дослідження впливу на спектр ППХ розмірних ефектів, просторової дисперсії чи інших характерних нелокальностей, пов'язаних із просторовими координатами. Серед робіт, у яких були описані вищезгадані функції, як функції залежні від просторових координат варто відмітити уже згадані нами вище [94, 134, 135]

Подальший розвиток моделі у нашій роботі ми матимемо безпосередньо з моделі розробленої Курбацьким [94], оскільки вона найбільше надається до аналітичного опису поширення ППХ у випадку, якщо діелектрики, які оточують АТМП володіють кардинально різними фізичними характеристиками та ми беремо до уваги товщину АТМП.

Виведення моделі, розпочнемо з того, що для опису функції $\epsilon(\mathbf{q}, z, \omega)$ ми використовуватимемо лишень діагональну компоненту тезора діелектричної проникності

$$\epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \left(1 - \frac{\omega_p^2}{n_e \omega^2} \sum_n f_n |\Psi_n(\mathbf{r}')|^2 \right) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (4.18)$$

У (4.18) $\omega_p = \sqrt{4\pi n_e e^2 / m_e}$ - плазмова частота [1, 80], n_e - концентрація електронів в металевому прошарку, $f_n = \Theta(\epsilon_n - \epsilon_F)$ - функція Фермі-Дірака [94, 96], $\Theta(x)$ - функція Хевісайда [96], ϵ_F - енергія Фермі [80, 96], $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_{||}, z)$.

Функція

$$\Psi_n(x, y, z) = \sqrt{\frac{2}{S}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \phi_n(z) \quad (4.19)$$

хвильова функція [98] електрона в металевому прошарку, а $\phi_n(z)$ є розв'язком рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} \phi_n(z) + U(z) \phi_n(z) = W \phi_n(z), \quad (4.20)$$

яке є рівнянням Шредінґера, що описує поведінку електрона в металевій

плівці [98]. Поверхневий потенціал $U(z)$ моделює наявність поверхонь, які обмежують плівку:

$$U(z) = \begin{cases} U_1 & \text{якщо } z \leq 0, \\ 0 & \text{якщо } 0 < z < l, \\ U_2 & \text{якщо } z \geq l. \end{cases} \quad (4.21)$$

де l - товщина металевої плівки. Розв'язок рівняння (4.20), який задовольняє умови $\phi(z \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$ можна подати так

$$\phi_n(z) = \begin{cases} Ae^{\chi_1 z}, \chi_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_1 - W)} & \text{if } z \leq 0, \\ C_1 e^{i\alpha z} + C_2 e^{-i\alpha z}, k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}W} & \text{if } 0 < z < l, \\ Be^{-\chi_2 z}, \chi_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_2 - W)} & \text{if } z \geq l. \end{cases} \quad (4.22)$$

Сталі A, C_1, C_2, B визначимо із умов неперервності $\phi_n(z)$ та гладкості (диференційовності) $\frac{d\phi_n(z)}{dz}$ хвильової функції на межах $z = 0$ та $z = l$

$$\begin{aligned} \phi_n(-0) &= \phi_n(+0), \quad \phi_n(-l) = \phi_n(+l), \\ \frac{d\phi_n(-0)}{dz} &= \frac{d\phi_n(+0)}{dz}, \quad \frac{d\phi_n(-l)}{dz} = \frac{d\phi_n(+l)}{dz} \end{aligned} \quad (4.23)$$

і умови нормування

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi_n(z)|^2 dz = 1, \quad (4.24)$$

з якої і випливає, що $\phi(z \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$.

Маємо

$$C_1 = A \left(\frac{1}{2} - \frac{i\chi_1}{2\alpha} \right) \quad C_2 = A \left(\frac{1}{2} + \frac{i\chi_1}{2\alpha} \right). \quad (4.25)$$

$$B = A \left(\cos(\alpha l) + \frac{\chi_1}{\alpha} \sin(\alpha l) \right) e^{\chi_2 l} \quad (4.26)$$

$$\begin{aligned} |A|^2 &= \left(\frac{1}{2\chi_1} + \frac{1}{2\chi_2} \left(\cos(\alpha l) + \frac{\chi_1}{\alpha} \sin(\alpha l) \right) \right)^2 + \\ &+ \frac{l}{2} \left(\frac{\chi_1^2}{\alpha^2} + 1 \right) + \frac{\chi_1}{2\alpha^2} \left(1 - \cos(2\alpha l) \right) + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\alpha} - \frac{\chi_1^2}{\alpha^3} \right) \sin(2\alpha l) \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Далі, з тих же умов неперервності та гладкості отримуємо трансцендентне алгебраїчне рівняння для знаходження рівнів розмірного квантування α (див.

напр. [97, 99])

$$\alpha l = \pi n - \left(\arcsin \left(\frac{\alpha \hbar}{\sqrt{2mU_1}} \right) + \arcsin \left(\frac{\alpha \hbar}{\sqrt{2mU_2}} \right) \right), \quad (4.28)$$

корені (4.28) визначатимуть величину

$$W_n = \frac{\hbar^2 \alpha_n^2}{2m} \quad (4.29)$$

яка є дискретною.

Максимальну кількість енергетичних рівнів n_{max} визначимо із умови

$$n_{max} = \left[\frac{1}{\pi} \left(l \min(S_1, S_2) + \arcsin \frac{\min(S_1, S_2)}{S_1} + \arcsin \frac{\min(S_1, S_2)}{S_2} \right) \right], \quad (4.30)$$

$$S_i = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} U_i}, \quad i = 1, 2.$$

У цьому виразі квадратні дужки позначають взяття цілої частини.

Знайдемо $\epsilon(\mathbf{q}, z, z', \omega)$, яке (2.8) задається для моделі (4.18). У висліді отримуємо (деталі розрахунку наведено в [94]):

$$\epsilon_2(0, z, z', \omega) = \epsilon_2(z, \omega) \delta(z - z') = \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\pi n_e \omega^2} \sum_{n=1}^{n_{max}} (k_F^2 - k_n^2) |\phi_n(z)|^2 \right) \delta(z - z'). \quad (4.31)$$

Для моделювання впливу товщини l металевої плівки на спектр ППХ тут як і в попередніх випадках $H_y(z, \omega) \approx H_0(z, \omega)$.

Для числового моделювання для верхнього шару взято поліетилен із діелектричною проникністю $\epsilon_1 = 2.3$ та роботою виходу електрона $U_1 = 4.2 \text{ eV}$. У якості нижньої діелектричної підкладки взято SiO_2 із діелектричною проникністю $\epsilon_1 = 4$ та роботою виходу електрона $U_1 = 5 \text{ eV}$. Діелектрична функція металевого прошарку (золото) описується функцією (4.19)

$$\epsilon_2(l, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{2\pi n_e \omega^2} \sum_{n=1}^{n_{max}} (k_F^2 - k_n^2) |\overline{\phi_n(z)}|^2. \quad (4.32)$$

На Рис.4.1 подано результати обчислення спектру отримані з (3.55) з

використанням (3.50), (3.51), які порівняно із значеннями отриманими для класичної незатухаючої моделі Друде [1].

$$\epsilon(\omega, l) = \epsilon_D(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (4.33)$$

в якій плазмонний спектр не залежить від товщини l металевого шару.

У Таб. 4.1 наведено результати чисельних розрахунків для залежності

$$\text{частоти } \omega^* = \frac{\omega}{\omega_p}, \text{ хвильового вектора } k_x^* = \frac{k_x c}{\omega_p} \quad (4.34)$$

від кількості рівнів розміреного квантування n_{max} .

Із таблиці даних бачимо, що різниця між спектрами $\omega(k_x)$ для обох моделей зростає із збільшенням значень хвильового вектора k_x . Також, варто зауважити, що при збільшенні l значення $\omega(k_x)$ повільно прямують знизу до значень отриманих для моделі Друде.

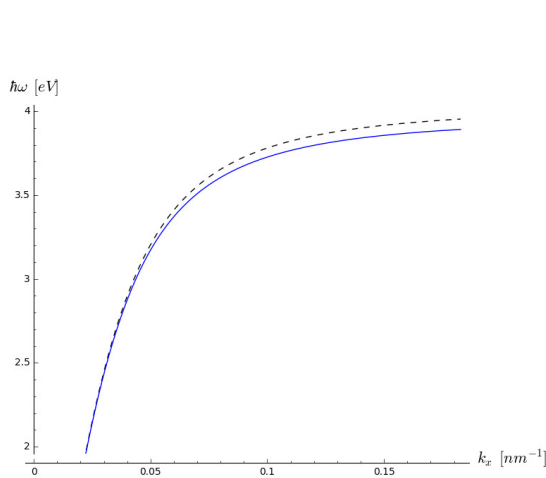


Рис. 4.1: Штрихова лінія - модель Друде ($\epsilon_D(\omega)$), суцільна - $\epsilon_2(l, \omega)$.

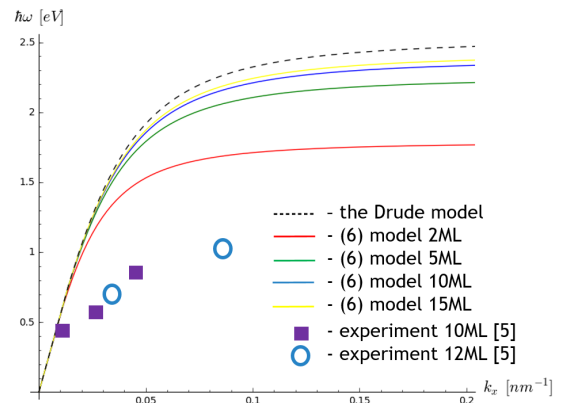


Рис. 4.2: Штрихова лінія - модель Друде ($\epsilon_D(\omega)$), суцільна ($\epsilon_2(l, \omega)$); червона - 2МШ; зелена - 5МШ; синя - 10МШ; жовта - 15МШ, 1МШ $\sim 0.24\text{nm}$

На рис. 4.2 показано результати аналогічних обчислень для структури "Si-срібло-SiO₂" із такими параметрами для діелектриків: $U_1 = 5\text{eV}$, $\epsilon_1 = 2.4$ та $U_1 = 4.8\text{eV}$, $\epsilon_1 = 11.7$ для Si та SiO₂ відповідно. На цьому ж рисунку подано результати експерименту для структури "Si-срібло-SiO₂" отримані в [25]. Ці результати показують, що спектр плазмонів "відчуває" товщину металевого прошарку для $l \sim 50\text{МШ}$.

Як видно з рис. 4.2 запропонований підхід дає змогу якісно пояснити вплив товщини металевого прошарку на спектр ППХ.

Зауважимо, що експериментальні результати для спектру ППХ, які складаються з 2-3 моношарів атомів і тому моделювання $\epsilon_2(\mathbf{q}, \omega, z)$ слід проводити саме для таких товщин. У таких металевих структурах стають суттєвими квантові ефекти [99, 100] і їх варто враховувати при моделюванні поширення ППХ в структурах ДАД.

	$\epsilon_2(l, \omega^*)$	$\epsilon_D(\omega^*)$	
$l(\text{нм})$	ω^*	ω^*	n_{max}
	$k_x^* = 1$		
100	0.33992328	0.34237082	335
1000	0.34016832	0.34237082	3357
5000	0.34019295	0.34237082	16789
10000	0.34019603	0.34237082	33579
30000	0.34019749	0.34237082	100737
	$k_x^* = 2$		
100	0.40974355	0.41421356	335
1000	0.41021317	0.41421356	3357
5000	0.41025793	0.41421356	16789
10000	0.41026353	0.41421356	33579
30000	0.41026618	0.41421356	100737
	$k_x^* = 3$		
100	0.42679347	0.43187178	335
1000	0.42732626	0.43187178	3357
5000	0.42737706	0.43187178	16789
10000	0.42738341	0.43187178	33579
30000	0.42738642	0.43187178	100737
	$k_x^* = 4$		
100	0.43313236	0.43844718	335
1000	0.43368968	0.43844718	3357
5000	0.43374282	0.43844718	16789
10000	0.43374947	0.43844718	33579
30000	0.43375261	0.43844718	100737

Табл. 4.1

4.3 Висновки

У першому пункті цього розділу розраховано частотний спектр ППХ в рамках модельного припущення, що АТМП можна розглянути як 2D провідну структуру з певною функцією металевої провідності на її поверхні. Із загальних умов непервності полів на стику двох середовищ отримано умови зшивання для ТМ-поляризованих хвиль. Як моделі провідності металевого прошарку розглянуто моделі Друде та RPA. Відзначено, що отримане дисперсійне рівняння аналогічне отриманому в інших працях для чисто двовимірного матеріалу – графену.

Далі здійснено спробу оцінити вплив товщини металевого прошарку на частотний спектр ППХ, взявши за модель діелектричної проникності компоненту zz тензора діелектричної проникності, та не враховуючи дискретності хвильового вектора Фермі, але враховуючи кількість рівнів розмірного квантування. Розгляд АТМП як 2D електронного газу поміщеного в асиметричній потенціальній ямі скінченної глибини дало змогу грубо врахувати наявність різних діелектричних середовищ на краях АТМП. Симуляція побудованої моделі показала, що така модель дає змогу якісно оцінити вплив товщини металу. Отримані результати для різної кількості МШ показують, що така залежність є і вагомо впливає на частотний спектр ППХ. Також, отримано краще узгодження з експериментальними даними.

Висновки

У дисертаційній роботі вирішено актуальне наукове завдання – побудова та дослідження математичних моделей поширення ППХ з використанням класичних, квазікласичних та квантових підходів до розгляду металевого прошарку (АТМП).

При цьому отримано такі наукові та практичні результати:

- для системи рівнянь Максвелла макроскопічної електродинаміки отримано аналітичні вирази для напруженості полів у кожній області структури ДМД у випадку, коли діелектрична проникність та провідність АТМП характеризуються просторовою нелокальністю (дисперсією) – конкретно в цьому випадку розглядається тільки дисперсія по координаті z , а АТМП в площині XOY вважається безкінечно великим у порівнянні з товщиною.
- показано, що АТМП можна розглядати 2D провідну площину (по аналогії з графеном) з ненульовою провідністю металу на цій площині. Для перевірки коректності отриманої моделі розглянуто моделі провідності Друде та RPA, яка також частково дає змогу врахувати кулонівські кореляції. Отримані результати показали допустимість такого підходу до моделювання поширення ППХ в структурах ДМД. Розраховано значення для частотного спектру ППХ та довжини поширення плазмонної хвилі;
- досліджено вплив товщини металевого прошарку у структурі ДМД на частотний спектр ППХ, коли за модель діелектричної проникності металу взято компоненту zz тензора діелектричної проникності. У цьому випадку враховано квантування енергетичних рівнів в АТМП в межах моделі електронного газу, помішеного в потенціальну яму. Показано, що

для АТМП товщиною до 25 МШ залежність від товщини наявна та вона суттєво впливає на поведінку частотного спектру ППХ. Із збільшенням товщини АТМП залежність стає менш помітною, а отримані значення частотного спектру ППХ прямують знизу до моделі Друде.

- розглянуто вплив умови електронейтральності на частотний спектр ППХ. Для цього АТМП досліджено в рамках моделі “желе” як невзаємодіючу систему електронів в асиметричній потенціальній ямі скінченної глибини. За модель діелектричної проникності АТМП взято компоненту zz тензора діелектричної проникності з врахуванням дискретності хвильового вектора Фермі. Показано, що частотний спектр ППХ в цій моделі характеризується осциляційною залежністю від товщини АТМП, що, в свою чергу, спричинене дискретною природою вектора хвильового вектора Фермі. Отримані результати краще корелюються з експериментальними даними.
- Вперше у цій роботі вивчено вплив кулонівських кореляцій на частотний спектр ППХ. У цьому випадку в межах все тієї ж моделі “желе” ми розглянули електронний газ поміщений в потенціальну яму безкінечної глибини. Показано, що значний вплив на частотний спектр ППХ в цій моделі мають дискретний характер хвильового вектора Фермі та проникнення “хвоста” електронної густини в шар діелектрика. Спектр також має осциляційну залежність від товщини АТМП, але більш помітну чим у випадку просто врахування умови електронейтральності. Отримані результати найкраще узгоджуються з експериментальними даними у порівнянні з іншими розглянутими моделями.

Наукова цінність результатів дисертаційної роботи полягає у тому, що в ній розроблено математичну модель поширення ППХ на поверхні ультратонких металевих прошарків та її поясненню використовуючи як класичні підходи та методи, так і застосовано моделіч квантової механіки для вивчення впливу провідного середовища на поведінку характеристик ППХ. Отримані результати, на думку автора, доповнюють уявлення про природу виникнення та поширення ППХ у структурах ДМД та показують взаємозв'язок цього явища з іншими фізичними явищами.

Математичні моделі розроблені та розвинуті в дисертаційному дослідженні можуть бути використанні при побудові високоточних оптичних приладів, дія яких заснована на явищі плазмонного резонансу, в яких в ролі провідного середовища використовується атомно-тонкі металеві плівки. Також, варто зазначити, що отримані результати можуть бути введені в освітні курси пов'язані з математичним моделюванням складних фізичних систем чи електродинамікою суцільних середовищ.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- [1] Maier S. A. Plasmonics: Fundamentals and Application. Springer - Verlag (2007).
- [2] Sommerfeld A. Ueber die Fortpflanzung elektrodynamischen Wellen längs eines Drahtes. Annalen der Physik, Volume 303, Issue 2, pp.233-492 (1899).
- [3] Zennek J. Über die Fortpflanzung ebener elektromagnetischer Wellen längs einer ebenen Leiterfläche und ihre Beziehung zur drahtlosen Telegraphie. Annalen der Physik, Volume 328, Issue 10, pp.846-866 (1907).
- [4] Wood R. W. On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum. Philosophical Magazine Series 6, 4, pp.396-402 (1902).
- [5] Masaaki Ono, Hideaki Taniyama, Eiichi Kuramochi, Kengo Nozaki, and Masaya Notomi Toward Application of Plasmonic Waveguides to Optical Devices. NTT Technical Review Vol. 16 No. 7, pp.14-19 (2018).
- [6] Mejía-Salazar, J. R., Oliveira, Osvaldo N. Plasmonic Biosensing. American Chemical - Chemical Reviews, Society Vol. 118 No. (2018).
- [7] Liu, Juanjuan and Jalali, Mahsa and Mahshid, Sara and Wachsmann-Hogiu, Sebastian Are plasmonic optical biosensors ready for use in point-of-need applications? Analyst - The Royal Society of Chemistry Vol. 145 No. 2, pp.364-384 (2020).
- [8] Hana Šípová, Shile Zhang, Aimée M. Dudley, David Galas, Kai Wang, and Jiří Homola Surface Plasmon Resonance Biosensor for Rapid Label-Free Detection of Microribonucleic Acid at Subfemtomole Level. Anal. Chem. 2010, 82, 24, pp.10110–10115 (2010).

- [9] Nico J. de Mol, Marcel J. E. Fischer Surface Plasmon Resonance. Volume 627, ISBN: 978-1-60761-669-6 (2010).
- [10] Chen Che, Mohr Daniel A, Choi Han-Kyu, Yoo Daehan, Li Mo, Oh Sang-Hyun Waveguide-Integrated Compact Plasmonic Resonators for On-Chip Mid-Infrared Laser Spectroscopy. American Chemical Society - Nano Letter, Vol. 12, No. 12, pp.7601-7608 (2018).
- [11] Marinko Jablan, Hrvoje Buljan, and Marin Soljačić Plasmonics in graphene at infrared frequencies. Phys. Rev. B 80, 245435 (2009).
- [12] D. C. Pedrelli and B. S. C. Alexandre and N. M. R. Peres Excitation of SPPs in graphene by a waveguide mode. EPL 126 27001 (2019).
- [13] Xiaoguang Luo, Teng Qiu, Weibing Lu, Zhenhua Ni Plasmons in graphene: Recent progress and applications. Materials Science and Engineering: R: Reports, Volume 74, Issue 11, pp.351-376 (2013).
- [14] Alessandro Principi, Matteo Carrega, Mark B. Lundeberg, Achim Woessner, Frank H. L. Koppens, Giovanni Vignale, and Marco Polini Plasmon losses due to electron-phonon scattering: The case of graphene encapsulated in hexagonal boron nitride. Phys. Rev. B 90, 165408 (2014).
- [15] Lu, H., Zeng, C., Zhang, Q. et al. Graphene-based active slow surface plasmon polaritons. Sci Rep 5, 8443 (2015).
- [16] K.I. Bolotin, K.J. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, P. Kim, H.L. Stormer Ultrahigh electron mobility in suspended graphene. Solid State Communications, Volume 146, Issues 9–10, pp.351-355 (2008)
- [17] Svetlana V. Boriskina, Thomas Alan Cooper, Lingping Zeng, George Ni, Jonathan K. Tong, Yoichiro Tsurimaki, Yi Huang, Laureen Meroueh, G Losses in plasmonics: from mitigating energy dissipation to embracing loss-enabled functionalities. Advances in Optics and Photonics Vol. 9, Issue 4, pp. 775-827 (2017).
- [18] Narimanov, Evgenii E. Hyperbolic modes of a conductor-dielectric interface Phys. Rev. A 99, 023827 (2019)

- [19] D. Ziemkiewicz, K. Słowik, and S. Zielińska-Raczyńska Ultraslow long-living plasmons with electromagnetically induced transparency. *Opt. Lett.* 43, 490-493 (2018)
- [20] Qi Zhang, Chaohua Tan, Chao Hang, and Guoxiang Huang Low-loss Airy surface plasmon polaritons. *Chin. Opt. Lett.* 13, 082401 (2015)
- [21] S. Ali Hassani Gangaraj and Francesco Monticone Do truly unidirectional surface plasmon-polaritons exist? *Optica* 6, 1158-1165 (2019)
- [22] Tomohiro Tamaya et al Surface plasmon polaritons in thin-film Weyl semimetals. *J. Phys.: Condens. Matter* 31 305001 (2019)
- [23] Andrea Marini, Dmitry V. Skryabin, and Boris Malomed Surface plasmon polaritons in thin-film Weyl semimetals. Stable spatial plasmon solitons in a dielectric-metal-dielectric geometry with gain and loss *Opt. Express* 19, 6616-6622 (2011)
- [24] Venu Gopal Achanta Surface waves at metal-dielectric interfaces: Material science perspective. Stable spatial plasmon solitons in a dielectric-metal-dielectric geometry with gain and loss *Reviews in Physics*, Volume 5, p.100041 (2020)
- [25] M. Abd El-Fattah, Zakaria & Mkhitarian, Vahagn & Brede, et al. (2019) Plasmonics in Atomically-Thin Crystalline Silver Films.
- [26] Gupta, Yashika, and P. Arun First Step to Ellipsometry. *International Journal of Physics* 3.1 (2015): 8-11.
- [27] A. Rodriguez Echarri, Joel D. Cox, F. Javier Garcia de Abajo Quantum Effects in the Acoustic Plasmons of Atomically-Thin Heterostructures [arXiv:1901.07098v3] (2019)
- [28] Landau, L On the vibration of the electronic plasma. *J. Phys. USSR* 10 (1946), 25. English translation in *JETP* 16, 574.

- [29] Zheng L, Zywiets U, Evlyukhin A, Roth B, Overmeyer L, Reinhardt C. SPP tomography experiments with surface plasmon polariton standing waves. *Sensors (Basel)* 19(21):4633 (2019)
- [30] L. Grave de Peralta, D. Domínguez Experimental Demonstration of Surface Plasmon Polaritons Reflection and Transmission Effects. *Optics Communications*, Volume 286, pp.151-155 (2013)
- [31] L. Grave de Peralta, D. Domínguez Manipulation of Near Field Propagation and Far Field Radiation of Surface Plasmon Polariton. *Springer Theses* (2017)
- [32] Gao, Xi and Cui, Tie Jun Spoof surface plasmon polaritons supported by ultrathin corrugated metal strip and their applications. *Nanotechnology Reviews*, vol. 4, no. 3, pp. 239-258 (2015)
- [33] Kostobij P., Polovyi V., Pavlysh V., Nevinskyi D. SPP waves in “dielectric-metal-dielectric” structures: influence of exchange correlations. *Math. Model. Comput.* 2018. Vol. 4, no. 2, P. 148-155.
- [34] Kostobij P., Polovyi V. Surface plasmon polaritons in dielectric/metal/dielectric structures: metal layer thickness influence. *Math. Model. Comput.* 2019. Vol.6, no.1, P. 109-115.
- [35] Kostobij P., Markovych B., Polovyi V. Influence of the electroneutrality of a metal layer on the plasmon spectrum in dielectric-metal-dielectric structures. *Math. Model. Comput.* 2019. Vol.6, no.2, P. 297-303.
- [36] Kostobij P., Markovych B., Polovyi V. Frequency spectrum of surface plasmon-polariton waves: influence of Coulomb correlations. *Math. Model. Comput.* 2020. Vol.7, no.1, P. 140-145.
- [37] Kostobij P., Polovyi V. Plasmon-polariton waves in the structures “dielectric-metal-dielectric”: Experiment and modeling. XIth International Scientific and Technical Conference Computer Sciences and Information Technologies (CSIT), 2016, P. 208-211.

- [38] Костробій П. П., Польовий В. Є. Поширення плазмон-поляритонних хвиль в структурах діелектрик-метал-діелектрик. Сучасні проблеми математичного моделювання, обчислювальних методів та інформаційних технологій, 2-4 березня 2018 року, Рівне, Україна, 2018, С. 57-58.
- [39] Kostobij P., Polovyi V. Influence of the thickness of a metal nanofilm on the spectrum of surface plasmons. IEEE 15th International Conference on the Experience of Designing and Application of CAD Systems (CADSM), 26 Feb.-2 March 2019, Polyana, Ukraine, 2019, P. 1-4.
- [40] Kostobij P., Polovyi V. The influence of the electroneutrality of the metal layer on the plasmon spectrum in "dielectric-metal-dielectric" structures. Modeling, Control and Information Technologies: Proceedings of International Scientific and Practical Conference, (3), 14-16 November, Rivne, Ukraine, 2019, P. 141-144.
- [41] Kostobij P., Polovyi V. The behaviour of the surface plasmon spectrum in heterogeneous structures depending on the thickness of the metal layer. Nanotechnology and nanomaterials (NANO-2019) : international research and practice conference, 27–30 August 2019, Lviv, Ukraine : book of abstracts, 2019, P. 533.
- [42] Kostobij P., Polovyi V. The influence of Coulomb interaction on the frequency spectrum of surface plasmons in dielectric/metal/dielectric structures. Nanotechnology and nanomaterials (NANO-2020) : international research and practice conference, 26–29 August 2020, Lviv, Ukraine : book of abstracts, 2020, P. 501.
- [43] Костробій П. П., Маркович Б. М., Польовий В. Є. Частотний спектр плазмон-поляритонних хвиль: вплив кулонівських кореляції. 16-та Відкрита наукова конференція Інституту прикладної математики та фундаментальних наук (ІМФН) : збірник матеріалів конференції, 6–7 лютого, Львів, 2020 р, 2020, С. 85–86.
- [44] Kostobij P., Polovyi V. Markovych B. Modeling of a Surface Plasmons Frequency Spectrum in Dielectric/metal/dielectric Structures: the Influence of

- the Coulomb Correlations. IEEE 15th International Conference on Computer Sciences and Information Technologies (CSIT), 23-26 Sept. 2020, Zbarazh, Ukraine, 2020, P. 1-4.
- [45] Kostrobij P., Markovych B., Polovyi V Frequency spectrum of surface plasmon-polariton waves: influence of Coulomb correlations. XXII International Seminar on Physics and Chemistry of Solids, June 17-19, 2020 Lviv, Ukraine, P. 23.
- [46] Kostrobij P., Markovych B., Polovyi V Study of SSPs Waves Frequency Spectrum in Atomically-Thin Films: Case of Electron-Electron Interaction. IEEE 11th International Conference “Nanomaterials: Applications & Properties” (IEEE NAP – 2021), September 5-11, 2021 Odesa, Ukraine.
- [47] Schumann W. O. Wellen längs homogener Plasmaschichten // Sitzungsberichte der Bayerische Akademie der Wissenschaften, Math.-naturwiss. Klasse. – 1948. – No. 5a. – P. 255-279.
- [48] Пятигорский Л. М. Теория плазменного волновода. 1. Медленные волны // Труды физического отделения физико-математического факультета Харьковского государственного университета им. А. М. Горького. - 1953. - №4. - С. 39-51.
- [49] Пятигорский Л. М. Теория плазменного волновода. 2. Быстрые волны. Труды физического отделения физико-математического факультета Харьковского государственного университета им. А. М. Горького. - 1953. - №4. - С. 53-65.
- [50] Bohm, David; Pines, David. Coulomb Interactions in a Degenerate Electron Gas. Physical Review. — 1953. — 1 November (iss. 92). — P. 609–625. — doi:10.1103/physrev.92.609.
- [51] Pines D. Collective Energy Losses in Solids. // Rev. Mod. Phys. – 1956. – Vol. 28. – P. 184-198.
- [52] Pines D. Collective Energy Losses in Solids // Rev. Mod. Phys. - 1956. - Vol. 28. - P. 184-198.

- [53] Wood R. W. On a remarkable case of uneven distribution of light in diffraction grating spectrum // *Phil. Mag.* – 1902. – Vol.4. – P. 396.
- [54] J. C. Maxwell – Garnett. Colours in metal glasses and in metallic films *Philos. Trans. R. Soc. London.* – 1904. – Vol .203. – P. 385.
- [55] Fano U. The Theory of Anomalous Diffraction Gratings and of Quasi Stationary Waves on Metallic Surfaces (Sommerfeld's Waves) // *J. Opt.Soc. Am.* – 1941. – Vol. 31. – P. 213–222.
- [56] Толпыго К. Б. Физические свойства решетки типа каменной соли, построенной из деформируемых ионов. - *ЖЭТФ*, 1950, т. 20, вып. 6, с. 497-509.
- [57] Hang K. On the interaction between the radiation field and ionic crystals. *Proceedings of the Royal Society of London V.208, Issue 1094, 1951*
- [58] Ritchie R. H. Plasma Losses by Fast Electrons in Thin Films // *Phys. Rev.* – 1957. –Vol. 106. – P. 874.
- [59] Yi.J-M. Cuche A., de Leon-Perez F., Degiron A., Laux E., Devatix E., Genet C., Alegret J., Martin-Moreno L., Ebbesen T.IV. Diffraction Regimes of Single Holes // *Physical Review Letters.*-2012.-Vol. 109. - P. 023901.
- [60] Гиппиус Н.А., Тиходеев С.Г., Крист А., Куль Й., Гиссен Х. Плазмонно-волноводные поляритоны в металло-диэлектрических фотонно-кристаллических слоях. // *Физика твердого тела*, -2005, - Т . 47, вып. 1. - С . 139-143.
- [61] Garsia-Vidal F. J., Martin-Moreno L, Ebbesen T.W., Kuipers L. Light passing through subwavelength apertures // *Rev. Mod. Phys.* - 2010. - Vol. 82. - Pp. 729-787.
- [62] While J.S., Veronis G, Yu Z., Barnard E.S., Chandran A., Fan S., Brongersma M.L. Extraordinary optical absorption through subwavelength slits. *Optics Letters.* - 2009. - Vol. 34. - pp. 686-688.

- [63] Otto A. Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection // Z. Phys. - 1968. - Vol. 216. - P. 398.
- [64] E.Kretschmann, H. Raether Radiative decay of non-radiative surface plasmons excited by light // Naturforschung. - 1968. - Vol.123. - P.2135- 2136.
- [65] Zeenneck J. Über die Fortpflanzung ebener elektromagnetischer Wellen langs einer ebenen Leiterfleche und ihre Beziehung zur drahtlosen Telegraphie // Ann. der Physik. - 1907. - V. 328. - P. 846-866.
- [66] Etchegoin P.G., Le Ru E.C., Meyer M. An analytic model for the optical properties of gold // J. Chem. Phys. - 2007. - Vol.127. - 189901.
- [67] Jeong Su Yang, Seung Gol Lee, Se-Geun Park, El-Hang Lee and Beom-Hoan O Drude Model for the Optical Properties of a Nano-Scale Thin Metal Film Revisted // Journal of the Korean Physical Society . - 2009. - Vol. 55, №. 6. - . P. 2552-2555.
- [68] R. Brendel, D. Borman An infrared dielectric function model for amorphous solids // . Jornal of Applied Phisics. - 1992. - Vol. 71, №1. - P. 1-6.
- [69] Kittel C. Quantum Theory of Solids. — 1963
- [70] Lindhard, J. On the properties of a gas of charge particles. K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd. 28 (8), 1 -57. (1954)
- [71] M G. Moharam, T.K. Gaylord Diffraction analysis of dielectric surface-relief gratings. // J. Opt. Soc. Am. - 1982. - Vol. 72. - P. 1385-1392.
- [72] M.G. Moharam, D.A. Pommet, E.B. Grann, T.K. Gaylord Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach // J. Opt. Soc. Am. A. - 1995. - Vol. 12. - P. 1077-1086.
- [73] X. Ni, Z. Liu, F. Gu, M.G. Pacheco, J. Borneman, A.V. Kildishev. PhotonicsSHA-2D: Modeling of singleperiod multilayer optical gratings and metamaterials.

- [74] Li L. Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures. // Journal of the Optical Society of America A. - 1996. - Vol. 13. - P. 1870-1876.
- [75] E. Silberstein, P. Lalanne, J.-P. Hugonin and Q. Cao Silberstein, E. Use of grating theories in integrated optics // Journal of the Optical Society of America A. - 2001. - Vol. 18. - P. 2865-2875.
- [76] Под ред. В.А. Соифера. Дифракционная оптика и нанофотоника. -М.: ФИЗМАТЛИТ, 2014. - 608 с.
- [77] Борн М., Вольф Е. Основы оптики. - М.: Наука, 1970. - 855с.
- [78] М. Ю. Видил, С. Л. Просвирнин, Н. В. Сидорчук. Электромагнитные волны планарной слоистой металлodieлектрической структуры. Радиофизика и радиоастрономия, 2010, т. 15, №2, с. 183-192.
- [79] Cao et al. Exact analytical method for planar optical waveguides with arbitrary index profile Vol. 16, No. 9/September 1999/J. Opt. Soc. Am. A 2209.
- [80] Ashcroft N. W, Mermin N. D. Solid State Physics Cornell University. Harcourt (1976).
- [81] Ando T., Fowler A. B., Stern F. Electronic properties of two-dimensional systems. Rev. Mod. Phys. 54 (2), 437–672 (1982).
- [82] R. H. Landau, M. J. Paez, and C. C. Bordeianu A Survey of Computational Physics. (Princeton U.P., Princeton, NJ, 2008).
- [83] Chen R., Xu Z., Sun L. Finite-difference scheme to solve Schrödinger equations. Phys. Rev. E, 1993, v.47, №5, p.3799 - 3802.
- [84] А.В. Дышлюк, А.А. Богданов, О.Б. Витрик. Возбуждение поверхностных плазмон-поляритонов наноантенной: простое аналитическое решение и его численная верификация. Компьютерная оптика, 2020, том 44, №6, с. 893-900.
- [85] Электронный ресурс <https://www.lumerical.com/products/fdtd/>

- [86] Электронний ресурс <https://www.comsol.com/>
- [87] Kostrobij P., Pavlysh V., Nevinskyi D., Polovyi V. SPP waves in “dielectric–metal–dielectric” structures: influence of exchange correlations. *Math. Model. Comput.* Vol. 18 No. 12, pp.148-155 (2017).
- [88] Landau, L. On the vibration of the electronic plasma. *J. Phys. USSR* 10, 25. English translation in *JETP* 16, 574. (1946).
- [89] Jackson J. D. *Classical Electrodynamics*. John Wiley & Sons (2007).
- [90] Stratton J. A. *Electromagnetic Theory*. New York: McGraw-Hill, 1st ed. (1941). J. A. Stratton, *Electromagnetic Theory*. New York: McGraw-Hill, 1st ed. (1941).
- [91] Korn G. A., Korn T. M. *Mathematical Handbook for Scientists and Engineers: Definitions, Theorems, and Formulas for Reference and Review*. General Publishing Company 1151 (2000)
- [92] Stern F. Polarizability of a two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. Lett.* B80 (1967)
- [93] Wood D. M, Ashcroft N. W. Quantum size effects in the optical properties of small metallic particles. *Phys. Rev. B.* 25, 6255 (1982).
- [94] Курбацкий В. П. Диэлектрический тензор низкоразмерных металлических систем. *ЖЭТФ*, 152, 177 (2017).
- [95] Landau L. D., Bell J. S., Kearsley M. J, Pitaevskii L. P, Lifshitz E. M., Sykes J. B. *Electrodynamics of Continuous Media*. Elsevier, Vol. 8 (2013).
- [96] Landau L. D., Lifshitz E. M. *Statistical Physics*. Elsevier, Vol. 5 (2013).
- [97] Landau L. D., Lifshitz E. M. *Quantum mechanics: non-relativistic theory*. Pergamon Press, Vol. 3, pp. 616 (2013).
- [98] Вакарчук І. О. *Квантова механіка*. ЛНУ ім. І. Франка (2007).
- [99] Kostrobij P. P., Markovych B. M. Effect of Coulomb interaction on chemical potential of metal film.

- [100] Kostrobij P. P., Markovych B. M. The chemical potential and the work function of a metal film on a dielectric substrate. *Philosophical Magazine Letters* (2019).
- [101] Zhuangqi Cao, Cheng Yin *Advances in One-Dimensional Wave Mechanics – Towards A Unified Classical View*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2014).
- [102] J. E. van Himbergen, R. Silbey Exact solution of metal surface properties in square barrier and linear one-electron potential models. *Phys.Rev. B* 18 (6) (1978) 2674–2682.
- [103] Kostrobij P. P., Polovyi V. Y. Influence of the Thickness of a Metal Nanofilm on the Spectrum of Surface Plasmons. 15th International Conference on the Experience of Designing and Application of CAD Systems (CADSM) (2019)
- [104] Suzuki, Masatsugu & Suzuki, Itsuko Understanding of physics on electrical resistivity in metals; Drude-Sommerfeld-Kubo. 10.13140/RG.2.2.13608.93448 (2020)
- [105] Quinn, John J. and Yi, Kyung-Soo *Free Electron Theory of Metals*. Springer Berlin Heidelberg, ISBN-978-3-540-92231-5, pp.79-107 (2009)
- [106] Pauli, W. Über den Zusammenhang des Abschlusses der Elektronengruppen im Atom mit der Komplexstruktur der Spektren. *Z. Physik* 31, pp.765–783 (1925)
- [107] Fermi, E. Zur Quantelung des idealen einatomigen Gases. *Z. Physik* 36, pp.902–912 (1926)
- [108] Dirac Paul Adrien Maurice On the theory of quantum mechanics. *Proc. R. Soc. Lond. A* 112: pp.661–677 (1926)
- [109] S. Caprara Notes on the semiclassical theory of transport phenomena in metals.
- [110] Gale Fair Exact semiclassical theory for galvanomagnetic effects in metals. NASA technical note (1967).

- [111] N. H. March Theory of the Inhomogeneous Electron Gas. Springer US (1983).
- [112] Ehrenreich, H., and M. H. Cohen Self-consistent field approach to the many-electron problem. Phys. Rev. 115, 786-790. (1959)
- [113] Taghizadeh A., Pedersen T. G. Plasmons in Ultra-Thin Gold Slabs With Quantum Spill-Out: Fourier Modal Method, Perturbative Approach, and Analytical Model Optics Express. Vol. 27, Issue 25, pp. 36941-36952 (2019).
- [114] Skjølstrup E. J. H., Sondergaard T., Pedersen T. G. Quantum spill-out in few-nanometer metal gaps: Effect on gap plasmons and reflectance from ultrasharp groove arrays Phys. Rev. B 97, 115429 (2018).
- [115] Skjølstrup E. J. H., Sondergaard T., Pedersen T. G. Quantum spill-out in nanometer-thin gold slabs: Effect on the plasmon mode index and the plasmonic absorption Phys. Rev. B 99, 155427 (2019).
- [116] Hohenberg P. Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas Phys. Rev. B, 136, p. 864-871 (1964)
- [117] N. D. Lang and W. Kohn Theory of Metal Surfaces: Charge Density and Surface Energy Phys. Rev. B, 1, p. 4555-4568 (1970)
- [118] N. D. Lang and W. Kohn Theory of Metal Surfaces: Work Function Phys. Rev. B, 3, p. 1215-1223 (1971)
- [119] O. Keller Optical Constants of the Noble Metals Phys. Rev. B 33, 990 (1986)
- [120] P. B. Johnson and R. W. Christy Random-phase-approximation study of the response function describing optical second-harmonic generation from a metal seldge Phys. Rev. B 6, 4370 (1972)
- [121] Kh. A. Gasanov, J. I. Guseinov, I. I. Abbasov, D. J. Askerov, Kh. O. Sadig Electron-Phonon Scattering in Quantum-Sized Films with the Hyperbolic Pöschl–Teller Potential Ukrainian Journal of Physics, 64(4), 336 (2019)
- [122] Flügge, Siegfried Practical Quantum Mechanics. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, pp. 279 (1999)

- [123] S.S. Sokolov, N. Studart Plasmon spectrum in lowdimensional electron systems over insulating cryogenic films: Screening, quantum degeneracy, and multisubband effects. *Phys. Rev. B* 68,195403 (2003)
- [124] Ferdi Aryasetiawan Effective Electron-Electron Interaction in Many-Electron Systems. Autumn School on Correlated Electrons, 17-21 September 2018, Forschungszentrum Jülich
- [125] V.F. Gantmakher, Y.B. Levinson Carrier Scattering in Metals and Semiconductors. North-Holland, (1987).
- [126] V.P. Silin, A.A. Ruhadze Electromagnetic properties of plasmas and plasma-like media. [in Russian]. Gosatomizdat, Moscow, 1961.
- [127] R. Kubo A GENERAL EXPRESSION FOR THE CONDUCTIVITY TENSOR. *Canadian Journal of Physics*. 34(12A): 1274-1277. <https://doi.org/10.1139/p56-140>
- [128] E. Verboven On the quantum theory of electrical conductivity: The conductivity tensor to zeroth order *Physica*, Volume 26, Issue 12, 1960, Pages 1091-1116, ISSN 0031-8914, [https://doi.org/10.1016/0031-8914\(60\)90143-9](https://doi.org/10.1016/0031-8914(60)90143-9).
- [129] Vavrukh M. V., Slobodyan S. B. Electron-plasmon Model In The Electron Liquid Theory. *Condensed Matter Physics*. Vol. 8, No. 3(43), pp. 453–472 (2005)
- [130] Маркович Богдан Квантово-статистичний опис рівноважних характеристик та дифузійних процесів у просторово обмежених металевих системах. Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України (2019)
- [131] Weiguo Yang and Michael A. Fiddy Surface Plasmon Polaritons Excited By Electromagnetic Waves Under General Boundary Conditions. arXiv:1409.4295v1 (2014)
- [132] David M. Pozar *Microwave Engineering*. John Wiley & Sons, 4th ed. (2012)
- [133] Anatoly V. Zayatsa, Igor I. Smolyaninov, Alexei A. Maradudin Nano-optics of surface plasmon polaritons. *Physics Reports* 408 pp.131–314 (2005)

- [134] Skjølstrup, E. J. H., Søndergaard, T., & Pedersen, T. G. Quantum spill-out in nanometer-thin gold slabs: Effect on the plasmon mode index and the plasmonic absorption. *Physical Review B*, 99(15) (2019)
- [135] Mariana Dalarsson and Sven Nordebo TE-wave propagation in a graded waveguide structure. *OSA Continuum* 3, 67-76 (2020)
- [136] David Pines, Philippe Nozières *The Theory of Quantum Liquids*. W.A. Benjamin, pp.355 (1966)
- [137] Макріян Ваврух, Петро Костробій, Богдан Маркович Базисний підхід в теорії багатоелектронних систем. *Растр-7*, pp.510 (2017)
- [138] A.V. Korotun Size Oscillations of the Work Function of a Metal Film on a Dielectric Substrate. *Phys. Solid State* 57, p.391 (2015).
- [139] V. V. Pogosov, A. V. Babich, and P. V. Vakula On the Influence of the Band Structure of Insulators and Image Forces on the Spectral Characteristics of Metal-Insulator Film Systems. *Phys. Solid State* 55, p.2120 (2013).
- [140] C. Thompson, J. Blatt Shape resonances in superconductors – ii simplified theory. *Physics Letters* 5 (1) (1963) 6–9
- [141] A. Paskin, A. D. Singh Boundary conditions and quantum effects in thin superconducting films. *Phys. Rev.* 140 (6A) (1965) A1965–A1967.
- [142] B. Wu, Z. Zhang Stability of metallic thin films studied with a free electron model. *Phys. Rev. B* 77 (3) (2008) 035410.
- [143] F. K. Schulte Energies and Fermi level of electrons in thin size-quantized metal films. *Physica Status Solidi (B)* 79 (1) (1977) 149–153.
- [144] Y. Han, D.-J. Liu Quantum size effects in metal nanofilms: Comparison of an electron-gas model and density functional theory calculations. *Phys. Rev. B* 80 (15) (2009) 155404

Додаток А

Тексти комп'ютерних програм

А.1 Розрахунок моделі Друде та RPA для 2D металевого прошарку

```
with(plots);
ab := 5.29177211*10^(-11);
c := 299792458;
rs := 2.9;
hh := 1.054571800*10^(-34);
m := 9.11093826*10^(-31);
e := -1.602176*10^(-19);
epsilon1 := 2.3;
epsilon2 := 4;
kfab := evalf((3/(4*Pi))^(2/3)*rs);
Lambda := evalf(kfab^2*hh^2/(4*m^2*c^2*ab^2));
tau := evalf((2*m*ab^2)*1.3*10^13/(kfab^2*hh));

absQ := sqrt(Re(q)^2 + Im(q)^2);
requation := (epsilon1/sqrt(-Lambda*w^2*epsilon1 + q^2) +
  epsilon2/sqrt(-Lambda*w^2*epsilon2 + q^2))*kfab/8;
requation1 := (epsilon1 + epsilon2)*kfab/8/q;
ReKhi := 1/(tau^2 + w^2);
ImKhi := -tau/(w*(tau^2 + w^2));
Khi := 1/(w*(w + tau*I));

points := [0];
ImQs := [];
ReQs := [];
ImQs1 := [];
ReQs1 := [];
for wi from 0.1 by 0.05 to 2 do
  w := wi;
  r1 := fsolve(requation - Khi, q);
  if type(r1, complex) or type(r1, float) then
    r11 := fsolve(requation - Khi, q, avoid = {q = r1});
    printf("r10=%Zg\n", r1);
    if type(r11, complex) or type(r11, float) then
      if 0 < Re(r11) then printf("r10=%Zg\n", r1);
      r1 := r11;
```

```

        end if;
    end if;
    ReQs := [op(ReQs), [Re(r1), w]];
    ImQs := [op(ImQs), [Im(r1), w]];
end if;
end do;

```

A.2 Розрахунок з врахуванням товщини АТМП

```

with(plots);
Digits := 20;
a__0 := 5.291772109217172*10^(-11);
c := 299792458;
q__e := -1.602176620898989*10^(-19);
M := 9.109383561111111*10^(-31);
hh := 1.054571800131313*10^(-34);
Ad := 1.602176620898989*10^(-19);
hhev := 6.58211951440404040404*10^(-16);
varepsilon__0 := 8.854187816*10^(-12);
r__s := 3.01;
n__ag := 5.90*10^28;
omega[p] := sqrt(n__ag*q__e^2/(varepsilon__0*M));
bm := omega[p]*10^(-9)/c;
W := U -> 2*Ad*M*'#msub(mi("a"),mn("0"))'^2*U/hh^2
W1 := 4; W2 := 4.24;
L[s] := 1 -> 1/1000000000*1/a__0
LL := L[s](30000)
kmax := a__0*sqrt(2*Ad*M*W1/hh^2);

ab := 5.3*10^(-11);
r__s := 3.01;
n__au := 5.90*10^28*ab^3;
K[F] := evalf((3*Pi^2*n__au)^(1/3));
l__0 := 1 -> 1/2*1 + 3/8*Pi/K[F] +
1/8*(16*K[F]^2*1^2 + 24*Pi*K[F]*1 + 25*Pi^2)^(1/2)/K[F];

L0 := evalf(l__0(LL));

r__s := 3.01;
n := trunc(1/2 + (W(W1)^(1/2)*LL +
arcsin((W(W1)/W(W2))^(1/2)))/evalf(Pi)) - 1;
vk := [];
for nIt to n do
    rk := fsolve(
        k*LL = Pi*nIt + (
            -arcsin(sqrt(Ad*W(W1))*k) +
            arcsin(sqrt(Ad*W(W2))*k)
        ), k = 0 .. kmax);
    vk := [op(vk), rk];
end do;
h1 := index -> sqrt(W(W1) - vk[index]^2);
h2 := index -> sqrt(W(W2) - vk[index]^2);

```

```

T2 := index -> 1/2*LL*(1 + h1(index)^2/vk[index]^2) +
1/2*h1(index)*(1 - cos(2*vk[index]*LL))/vk[index]^2 +
1/4*(1/vk[index] - h1(index)^2/vk[index]^3)*sin(2*vk[index]*LL);
A1 := index -> 1/(1/2*1/h1(index) + 1/2*(cos(vk[index]*LL) +
h1(index)*sin(vk[index]*LL)/vk[index]))^2/h2(index) + T2(index));

varepsilon__1 := 2.3;
varepsilon__3 := 4;
varepsilon__2 := 1/(2*Pi*LL*n__au)*sum((K[F]^2 -
vk[index]^2)*A1(index)*T2(index), index = 1 .. n);

k__1 := (q, omega) -> sqrt(q^2 - omega^2*varepsilon__1);
k__2 := (q, omega, L) -> sqrt(q^2 - omega^2 + varepsilon__2);
k__3 := (q, omega) -> sqrt(q^2 - omega^2*varepsilon__3);

metalHeights := [10^(-9), 10*10^(-9), 50*10^(-9), 100*10^(-9)];
plotPointsSets := [];
colors := ["Yellow", "Red", "Blue", "Green"];
loopIterator := 1;
points := [[0, 0]];
for it from 0.01 by 0.01 to 4 do
    q := it;
    coef := (q, omega, L) -> k__2(q, omega, L)*omega^2/(omega^2 - varepsilon__2);
    omega__r := fsolve(exp(-(4*k__2(q, omega, LL))*0.5*LL) =
    (coef(q, omega, LL) + k__1(q, omega)/varepsilon__1)*
    (coef(q, omega, LL) + k__3(q, omega)/varepsilon__3)/
    ((coef(q, omega, LL) - k__1(q, omega)/varepsilon__1)*
    (coef(q, omega, LL) - k__3(q, omega)/varepsilon__3)),
    omega = 0 .. 1, maxsols = 1, fulldigits);

    if type(omega__r, 'numeric') then
        print(q, omega__r);
        points := [op(points), [q*bm, Re(omega__r)*hhev*omega[p]]];
    else
        print(q, "noroots");
    end if;
end do;

```

A.3 Розрахунок з врахуванням квантових ефектів

```

Digits := 20;

a__0 := 5.291772109217172*10^(-11);
c := 299792458;
q__e := -1.602176620898989*10^(-19);
M := 9.109383561111111*10^(-31);
hh := 1.054571800131313*10^(-34);
Ad := 1.602176620898989*10^(-19);
hhev := 6.582119514404040404*10^(-16);
varepsilon__0 := 8.854187816*10^(-12);
r__s := 3.02;
n__ag := 5.86*10^28;
na := evalf(3.0/(4.0*Pi*r__s^3));
omega[p] := sqrt(na*q__e^2/('#msub(mi("a"),mn("0"))'^3*varepsilon__0*M));

```

```

bm := omega[p]*10^(-9)/c;
hhev*omega[p];
accuracy := 0.1*10^(-8);
'M&Pi;' := evalf(4*arctan(1));
K[F0] := evalf(9.0/4.0*Pi)^(1/3)/r__s;
E[F0] := hhev^2*K[F0]^2/'#msub(mi("a"),mn("0"))'^2/(2*M)*Ad;
W0 := 4.36;

W := U -> 2*Ad*M*'#msub(mi("a"),mn("0"))'^2*U/hh^2;
Ry := 13.60569300985;
U0 := 15.813;
WF := w -> w/Ry;
aa := 2*Ad*M*'#msub(mi("a"),mn("0"))'^2/hh^2;

W1Ev := E[F0] + W0;
W2Ev := E[F0] + W0 - 4.05;
W1 := sqrt(WF(W1Ev));
W2 := sqrt(WF(W2Ev));
MinW := min(W1, W2);
MinWQ := min(WF(W1Ev), WF(W2Ev));

deltaD := (Kf, W) -> sqrt(W^2/Kf^2 - 1) + (2 - W^2/Kf^2)*arcsin(Kf/W);
LB := (Lslab, Kf) -> 1/2*Lslab + 3/8*'M&Pi;'/Kf - 3/8*(deltaD(Kf, W1) + deltaD(Kf, W2));
L := (Lslab, Kf) -> LB(Lslab, Kf) + sqrt(LB(Lslab, Kf)^2 + 1/4*'M&Pi;'^2/Kf^2);

MAXIT := 40

solveLProc:=proc(Fn,x1::float,x2::float,xeps::float,n::integer,L::float)::float
  local fmid,f,y,dx,xmid,it;
  fmid:=Fn(n,L,x2): f:=Fn(n,L,x1):
  if (fmid*f>0) then print("Error :LP"); end if:
  y:=0:
  dx:=0:
  if f<0
    then y:=x1:
    dx:=x2-x1:
  else
    y:=x2:
    dx:=x1-x2:
  end if:
  for it from 0 to MAXIT do
    dx:=dx*0.5:
    xmid:=y+dx:
    fmid:=Fn(n,L,xmid):
    if fmid <=0 then y:=xmid end if:
    if abs(dx)<xeps or fmid=0 then break: end if:
  end do:
  return y:
end proc;

solveKfProc:=proc(Fn,x1::float,x2::float,xeps::float,Lslab::float)::float
  local fmid,f,y,dx,xmid,it;
  fmid:=Fn(Lslab,x2):
  f:=Fn(Lslab,x1):
  if (fmid*f>0) then print("Error :KF"); end if:
  print(f,fmid,x1,x2);

```

```

y:=0;
dx:=0;
if f<0 then
  y:=x1:dx:=x2-x1:
else
  y:=x2: dx:=x1-x2:
end if:
for it from 0 to MAXIT do
  dx:=dx*0.5:
  xmid:=y+dx:
  fmid:=Fn(Lslab,xmid):
  if fmid <=0 then y:=xmid end if:
  if abs(dx)<xeps or fmid=0 then break: end if:
end do:
return y:
end proc;

alphaNum := (n, L, alpha) -> alpha*L - 'M&Pi;'*n + arcsin(alpha/W1) + arcsin(alpha/W2)

RetreiveAlphas := proc(L::float)
  local nMax, alpha, it, y; alpha := [];
  nMax := floor((L*MinW + arcsin(MinW/W1) + arcsin(MinW/W2))/Pi);
  for it to nMax do
    y := solveLProc(alphaNum, 0., MinW, accuracy, it, L);
    alpha := [op(alpha), y];
  end do;
  return alpha, nMax;
end proc;

lastAlphaVec := [];
lastNMax := 0;
lastL := 0;
CalcKf := proc(Lslab::float, Kf::float)
  local alphaVec, nMax, y, it, Lval;
  global lastAlphaVec, lastNMax, lastL;
  Lval := L(Lslab, Kf);
  alphaVec, nMax := RetreiveAlphas(Lval);
  y := 0.;
  for it to nMax do
    if alphaVec[it] < Kf then
      y := y + Kf^2 - alphaVec[it]^2;
    end if;
  end do;
  y := 3.0*Lslab + (-1)*2.0*r__s^3*y;
  lastAlphaVec := alphaVec;
  lastNMax := nMax;
  lastL := Lval;
  return y;
end proc;

La := 1 -> 1/10000000000*1/a__0;
plotPointsSets := [];
LSMIN := 10.0;
points := [];
points005 := [];
points01 := [];

```

```

points02 := [];
pointsExperiment := [];
kfs := [];
for LS from 0.1 to 43.6 by 0.1 do
  LL:=LS;#La(LS);
  kf :=solveKfProc(CalcKf,0.001,MinW,accuracy,LL):
  LL:=lastL;
  K[F]:= kf;
  'nd__ag' := 'n__ag'*a[0]^(3);
  nmax:=lastNMax:
  vk:=lastAlphaVec:
  iterator:=1:
  kfs := [op(kfs), [LS, kf]];
  h1 := index -> sqrt(-vk[index]^2 + W1);
  h2 := index -> sqrt(-vk[index]^2 + W2);
  Ca := index -> 2/(LL + vk[index]^2/(W1^2*sqrt(W1^2 - vk[index]^2)) +
    vk[index]^2/(W2^2*sqrt(W2^2 - vk[index]^2)) -
    sin(vk[index]*LL)*cos(vk[index]*LL +
    2*arcsin(vk[index]/W1))/vk[index]);
  Fn := index -> 1/4*(sin(2*vk[index]*LL -
    2*arccos(vk[index]/W1)) + 2*vk[index]*LL +
    sin(2*arccos(vk[index]/W1)))/vk[index];
  varepsilon__1 := 1;
  varepsilon__3 := 13;
  varepsilon2 := 1/(2*Pi*LL*na)*sum((K[F]^2 - vk[index]^2)*Ca(index)*Fn(index), index);
  k__1 := (q, omega) -> sqrt(q^2 - omega^2*varepsilon__1);
  k__2 := (q, omega, L) -> sqrt(q^2 - omega^2 + varepsilon2);
  k__3 := (q, omega) -> sqrt(q^2 - omega^2*varepsilon__3);
  colors := ["Yellow", "Red", "Blue", "Green"];
  loopIterator := 1;
  points:=[op(points), [LS,0,0 ]]:
  for it from 0.01 to 0.05 by 0.0005 do
    q := it
    coef := (q, omega, L) -> k__2(q, omega, L)*omega^2/(omega^2 - varepsilon2):
    omega__r := fsolve(
      exp(-(4*k__2(q, omega, LL))*0.5*LL) =
      (coef(q, omega, LL) + k__1(q, omega)/varepsilon__1)*(coef(q, omega, LL) +
      k__3(q, omega)/varepsilon__3)/((coef(q, omega, LL) -
      k__1(q, omega)/varepsilon__1)*(coef(q, omega, LL) - k__3(q, omega)/varepsilon__3)
      omega = 0 .. 1, maxsols = 1, fulldigits):
    if type(omega__r, 'numeric') then
      if (q=1.1) then
        points005:= [
          op(points005),
          [LS,Re(omega__r)*hhev*omega[p]]
        ]:
      end if:
      if (q=2.2) then
        points01:= [
          op(points01),
          [LS,Re(omega__r)*hhev*omega[p]]
        ]:
      end if:
      if (q=4.2) then
        points02:= [
          op(points02),

```



```

        [LS,Re(omega__r)*hhev*omega[p]]
    ]:
end if:
points:=[op(points),[LS,q*bm,Re(omega__r)*hhev*omega[p]]]:
if (abs(q*bm-0.0488735)<0.005) then
    pointsExperiment:=[
        op(pointsExperiment),
        [LS,q*bm,Re(omega__r)*hhev*omega[p],0.62]
    ]:
end:
else
    print'(q, "noroots");
end:
end do:
loopIterator := loopIterator + 1
end do:

```