

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В.ЛОМОНОСОВА

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА МАГНЕТИЗМА

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

**«ПЛАЗМОНЫ В ЦЕПОЧКАХ НАНОЧАСТИЦ
СЛОЖНОЙ ФОРМЫ»**

Выполнил студент
219М группы:
Пикалов А.М.

Научные
руководители:
Дорофеев А.В.
Грановский А.Б.

Допущен к защите 28.05.2017
Зав. кафедрой магнетизма
профессор Перов Н.С. _____

Москва
2017

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
Глава 1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ	5
1.1.Плазмоника, поверхностные плазмоны, локализованные плазмоны	5
1.2.Цепочки плазмонных наночастиц	10
1.3.Построение дисперсии в цепочках плазмонных частиц с учетом дальних взаимодействий	16
Глава 2. ЦЕПОЧКА СФЕРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ	19
Глава 3. ЦЕПОЧКА КОЛЬЦЕВЫХ РЕЗОНАТОРОВ	30
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	47
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	49
ПРИЛОЖЕНИЕ А	54
Благодарности.....	58

ВВЕДЕНИЕ

Одним из объектов современных интенсивных исследований в плазмонике являются цепочки плазмонных частиц. В первую очередь они интересны тем, что по ним могут распространяться плазмоны – электромагнитные волны с поперечным размером локализации, намного меньшим длины волны. Это свойство позволяет использовать плазмонные цепочки в качестве волноводов оптического излучения, что делает их перспективными для управления светом на субволновых масштабах и создания устройств интегрированной оптики.

Для осуществления целенаправленного поиска в области плазмонных волноводов необходимо уметь находить дисперсионные характеристики поддерживаемых ими волн. Однако, как оказалось, это представляет собой нетривиальную теоретическую задачу. В литературе можно найти большое количество приемов приближенного определения дисперсии, связанных с различного рода упрощениями исходной задачи – пренебрежением взаимодействием элементов на большом расстоянии, затуханием или запаздыванием. Для одного частного случая – цепочки сферических частиц в дипольном приближении – был найден способ точного расчета дисперсии. Универсальный метод нахождения точной дисперсии в цепочках плазмонных частиц сложной формы до сих пор не был представлен.

Целью данной работы является создание такого универсального метода. В его задачи входит, исходя из физических характеристик цепочки плазмонных частиц (таких как материал и форма частиц, расстояние между ними и их взаимная ориентация), предсказание решений, реализующихся в данной цепочке, а также их дисперсионных характеристик. В том числе, если в цепочке может одновременно существовать несколько решений, то необходимо иметь возможность разделять их, определяя характеристики и вклад каждого из них в общее решение.

Предлагаемый в данной работе метод является обобщением метода, разработанного для цепочек сферических частиц и позволяющего построить точную дисперсию, на случай цепочек частиц сложной формы. Основой метода является аппроксимация зависимости коэффициентов взаимодействия элементов от расстояния известной аналитической функцией с последующим использованием уже известного формализма.

Глава 1. СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ИССЛЕДОВАНИЙ ПЛАЗМОННЫХ ВОЛНОВОДОВ

1.1. Плазмоника, поверхностные плазмоны, локализованные плазмоны

Плазмоника – раздел физики, изучающий электромагнитные явления в присутствии проводников. Характерной особенностью проводников, обуславливающей их электромагнитные свойства, является наличие в них свободных электронов, которые могут перемещаться относительно неподвижной кристаллической решетки из положительно заряженных ионов. При взаимодействии проводника с внешней электромагнитной волной в нем возникают осцилляции свободных зарядов, часто описываемые моделью Друде. В этой модели возникновение осцилляций эффективно сводится к тому, что проводник, помещенный в переменное электромагнитное поле, приобретает диэлектрическую проницаемость, отличную от единицы и описываемую формулой:

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

где ω - циклическая частота электромагнитного поля, $\omega_p = \frac{ne^2}{\varepsilon_0 m}$ - так называемая частота (объемного) плазмонного резонанса, γ - параметр релаксации, равный частоте столкновений между электронами в металле, m , e , n - масса, заряд и объемная концентрация электронов в металле, соответственно, ε_0 - диэлектрическая постоянная.

Если говорить о применимости формулы Друде к диэлектрической проницаемости реальных проводников, то она хорошо описывает поведение благородных металлов в инфракрасной области, а в случае щелочных металлов, в силу отсутствия межзонных переходов, ее применимость простирается вплоть до ультрафиолета [1].

Существенная особенность диэлектрической проницаемости металлов, отличающая их от диэлектриков, может быть видна из формулы (1): существует частотный диапазон $\omega < \omega_p$, в котором она отрицательна. Это ключевое свойство приводит к тому, что на границах раздела «металл-диэлектрик» в этом частотном диапазоне диэлектрическая проницаемость меняет знак. Это приводит к возможности возникновения так называемых поверхностных волн или поверхностных плазмон-поляритонов.

Поверхностный плазмон-поляритон представляет собой электромагнитную волну, существующую на границе раздела двух сред с разными знаками диэлектрической проницаемости, распространяющуюся вдоль границы и имеющую экспоненциальное ослабевание при удалении от нее. Эта волна сопровождается коллективными осцилляциями свободных электронов в металле, также имеющими вид волны с той же групповой скоростью и волновым числом. Этот гибридный характер волны выражается словом «поляритон» в названии.

Дисперсионное уравнение поверхностного плазмона на плоской границе раздела «металл-диэлектрик» имеет следующий вид (подробный вывод данного уравнения, а также более детальное описание свойств поверхностных плазмонов можно найти в [1]):

$$k = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}} . \quad (2)$$

Здесь ε_1 и ε_2 - диэлектрические проницаемости металла и диэлектрика соответственно, c - скорость света в вакууме.

Как видно из этого уравнения, в отсутствие омических потерь в металле поверхностный плазмон может распространяться без затухания, если его диэлектрическая проницаемость по модулю превышает диэлектрическую проницаемость диэлектрика.

Однако, реальные металлы, как правило, сильно диссипативны, поэтому длина затухания поверхностных плазмонов в таких системах обычно составляет от нескольких десятков до нескольких сотен микрометров [2]. Тем не менее, было показано [3], что использование усиливающих сред вместо обычного диэлектрика способно скомпенсировать омическое затухание поверхностных плазмонов.

Отметим, что из формулы (2) видно, что при выполнении условия $\varepsilon_1 = -\varepsilon_2$ волновое число плазмона стремится к бесконечности, при этом его групповая скорость стремится к нулю. Такой режим поверхностного плазмона называется электростатическим. Применяя формулу Друде для диэлектрической проницаемости проводника, получим частоту, на которой это происходит:

$$\omega_{sp} = \frac{\omega_p}{\sqrt{1 + \varepsilon_2}}.$$

В частности для случая границы «металл-вакуум»:

$$\omega_{sp} = \frac{\omega_p}{\sqrt{2}}. \quad (3)$$

Эта частота называется частотой поверхностного плазмонного резонанса.

Скорость распространения поверхностных плазмонов может быть значительно ниже скорости света, что обеспечивает малую длину волны при оптических частотах. Это свойство позволяет решить проблему сопряжения сигналов между полупроводниковыми вычислительными устройствами и оптическими волокнами, между которыми существует значительный разрыв в геометрических масштабах [4].

Поверхностные плазмоны могут существовать не только на плоских границах, но и на искривленных. Примером таких искривленных границ могут служить различного рода приповерхностные наноструктуры, выполняющие функцию плазмонных волноводов [5-8]. Обычно они имеют

вид наноразмерных канавок на поверхности металла. Было показано, что дисперсионные и прочие характеристики плазмонов, распространяющихся в таких волноводах, отличаются от характеристик плазмонов на плоской границе [9]. Другим примером является возбуждение плазмона на серебряном нанопроводе [10].

Предельным случаем искривленной границы «металл-диэлектрик» является, пожалуй, поверхность металлической наночастицы, либо, напротив, диэлектрического включения в проводящей среде (отверстия, нанопоры, частицы вида «core-shell»). Плазмоны, живущие на поверхности таких частиц, называются локализованным поверхностными плазмонами.

Свойства локализованных поверхностных плазмонов удобно рассмотреть на примере наночастиц, имеющих сферическую форму. В квазиэлектростатическом случае, то есть для частиц, чей размер оказывается намного меньше длины волны света в свободном пространстве, такая наночастица имеет серию резонансных мод, частоты которых определяются формулой [11]:

$$\omega_l = \omega_p \sqrt{\frac{l}{2l+1}},$$

где $l = 1, 2, 3, \dots$ – номер моды. Каждая мода имеет характерное распределение электромагнитного поля в пространстве внутри и вне частицы. Каждая мода описывается сферической гармоникой, что соответствует мультиполю порядка l . Так, например, частота $\omega_1 = \omega_p / \sqrt{3}$ соответствует возбуждению в частице электродипольного колебания, $\omega_2 = \omega_p \sqrt{2/5}$ - электроквадрупольного, и так далее. При этом распределение потенциала вокруг частицы, характерное для каждой моды, имеет вид, сходный с распределением электронной плотности в атоме водорода. Поэтому металлические наночастицы иногда называют плазмонными атомами [12].

В квазиэлектростатическом случае область локализации поверхностного плазмона имеет характерные масштабы, сравнимые с размерами самой частицы, на которой плазмон локализован. Поскольку современные методы синтеза позволяют создавать наночастицы размером вплоть до нескольких нанометров [13], это открывает широкие возможности для управления оптическим излучением на глубоко субволновых масштабах. Одним из практических приложений на основе этого принципа является поверхностно-усиленная Рамановская спектроскопия или SERS (Surface-enhanced Raman spectroscopy) – спектроскопический метод, позволяющий вести детектирование крайне малых объемов вещества, вплоть до отдельных молекул [14, 15]. Это достигается за счет чрезвычайного усиления электрических полей агрегатами плазмонных частиц. Например, при использовании самоподобных каскадов последовательно уменьшающихся частиц энергия плазмона концентрируется в области, прилегающей к наименьшей частице и имеющей соответствующий характерный размер [16]. Это приводит к увеличению плотности энергии электрического поля на несколько порядков, что приводит к чрезвычайному усилению сигнала от образца, помещенного в эту область. Такая архитектура SERS была, например, использована для обнаружения мутаций в молекулах белков [17]. Интересно, что такой же способностью концентрироваться на острие обладают и плазмоны, распространяющиеся по непрерывной сужающейся металлической игле [18].

Частоты и форма плазмонных мод наночастицы в общем случае сильно зависят от формы частицы и ее физического окружения. Так, при непрерывном изменении формы частицы от шара к кубу или октаэдру имеет место сдвиг и даже расщепление спектральных линий, а также изменение их интенсивности [12, 19].

Моды локализованных поверхностных плазмонов, живущих на существенно несферических наночастицах, по большей части определяются

их геометрий. В качестве примера рассмотрим плазмонные моды кольцевого резонатора (split-ring resonator, SRR).

Кольцевые резонаторы представляют собой металлические элементы в форме кольца с зазором. Они получили большую популярность после того, как были предложены на роль мета-атомов для создания метаматериалов [20]. В силу технических ограничений кольцевые резонаторы субмикронного размера обычно изготавливаются в форме квадрата или квадратной подковы [21]. Плазмонные моды таких резонаторов имеют вид стоячих волн, упакованных в подковообразную форму резонатора. На концах резонатора образуются пучности, а на теле резонатора размещаются узлы, количество которых может быть соотнесено с номером моды [22-24].

Так, первая мода имеет один узел в центре тела резонатора и две пучности с противоположными знаками зарядов на его концах. Эта мода называется магнитодипольной, поскольку такая форма плазмонного колебания связана с возникновением циркулярного тока, в результате чего резонатор приобретает магнитный дипольный момент. Магнитодипольная мода – низшая по частоте и имеет наиболее выраженный отклик на внешнее поле, поэтому может рассматриваться как основная мода кольцевого резонатора.

Вторая мода имеет два узла и три пучности, одна из которых расположена в центре тела резонатора. Данная форма способствует образованию электрического дипольного момента, направленного перпендикулярно зазору, и такая мода называется электродипольной.

1.2. Цепочки плазмонных наночастиц

Одним из объектов изучения плазмоники являются цепочки плазмонных частиц. Такая геометрия представляет собой переходный случай от локализованного к бегущему плазмону. В первую очередь, интерес к цепочкам наночастиц обусловлен тем, что они могут выступать в качестве

субволновых волноводов оптического излучения. При этом область поперечной локализации плазмона имеет характерный размер частиц, составляющих цепочку, что также представляет интерес с точки зрения создания компактных оптоэлектронных вычислительных устройств.

Впервые возможность использовать цепочку сферических металлических частиц в качестве средства передачи электромагнитной энергии на субволновые расстояния была теоретически показана в работе Quinten et al [25]. В ней рассматривалась линейная цепочка из 50 серебряных сферических частиц диаметром 50 нм, первая из которых возбуждалась падающей электромагнитной волной, а к остальным частицам возбуждение передавалось за счет электромагнитного взаимодействия между ними. Поле каждой частицы представлялось в качестве комбинации сферических гармоник, которые сшивались с помощью граничных условий на поверхности каждой сферы. Было обнаружено, что плазмон способен распространяться вдоль такой системы на расстояние в несколько микрон, что сопоставимо с соответствующим параметром для плазмона на плоской границе.

Дальнейшие теоретические исследования таких систем были направлены на построение дисперсионного уравнения и нахождение дисперсии плазмонов. Однако, это оказалось нетривиальной задачей [26]. Проблема возникает при рассмотрении цепочек бесконечной длины, когда необходимо учесть взаимодействие всех частиц цепочки между собой. Часть дисперсионного уравнения, описывающая межчастичное взаимодействие в этом случае представлена бесконечным рядом. При наличии затухания этот ряд оказывается расходящимся, что делает решение дисперсионного уравнения невозможным.

Причина данной расходимости в том, что закон, описывающий взаимодействие между частицами, имеет степенной закон убывания с расстоянием, в то время как затухание самого плазмона имеет

экспоненциальный характер. Это приводит к образованию в дисперсионном уравнении конструкции вида:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{e^{ik|n|}}{|n|}, \quad (4)$$

где k - волновое число. Видно, что в присутствии затухания, то есть когда $\text{Im}k \neq 0$, ряд расходится. Впервые эта проблема была отмечена в [27].

Чтобы избежать данных трудностей, было разработано большое число приближенных методов построения дисперсии.

Наиболее простым представляется метод приближения ближайших соседей. Этот метод использовался для как нахождения дисперсии в квазистатическом приближении в цепочке сферических наночастиц [28], так и в цепочке отверстий в металлической пленке [29], а также в цепочке кольцевых резонаторов [30-32]. Также было показано, что в некоторых случаях результаты данного метода достаточно хорошо совпадают с результатами эксперимента [31, 33].

Другой подход к изучению цепочек взаимодействующих частиц – рассмотрение цепочек конечной длины. В рамках данного подхода используется так называемый матричный метод, учитывающий взаимодействие частиц в конечной цепочке по принципу «каждый с каждым» [27, 32]. Для каждой частицы записывается уравнение колебаний, и для N -частичной цепочки получается система N уравнений. Эту систему удобно записать в матричном виде:

$$\mathbf{A}\mathbf{p} = \mathbf{b}.$$

Здесь \mathbf{A} - матрица взаимодействий между элементами, \mathbf{p} - вектор амплитуд отклика, \mathbf{b} - вектор внешних воздействий. Далее, используя это уравнение, можно рассмотреть возбуждение цепочки точечным источником и проанализировать бегущие от него волны, определив из них волновые числа

и коэффициент затухания. Построив зависимость этих параметров от частоты вынуждающей силы, можно получить дисперсионные соотношения.

Сходный метод использовался в работе [34] для нахождения дисперсии в цепочке сферических плазмонных частиц, однако для моделирования распространения волн использовалась численная симуляция методом конечных разностей во временной области (finite difference time domain, FDTD). Возбуждение цепочки осуществлялось точечным диполем, расположенным на некотором расстоянии от одного из концов цепочки. Варьируя частоту осцилляций диполя и анализируя возникающее в цепочке распределение поля, была получена зависимость $k(\omega)$.

Восстановление дисперсионных характеристик из картины возбуждения конечной цепочки также осуществлялось в работе [35] для цепочки кольцевых резонаторов. Здесь для анализа использовалось преобразование Фурье от распределения амплитуд возбуждений в цепочке. Проводился анализ как полученных в результате численного моделирования, так и экспериментальных данных. В результате удалось разделить два отдельных решения, существующих параллельно: медленную обратную волну и быструю прямую.

Другой метод поиска дисперсии был реализован в работе [27]. Здесь ищутся собственные моды конечной цепочки, то есть те частоты, при которых матрица \mathbf{A} становится сингулярной. В этом случае любое, даже самое слабое воздействие приводит к образованию в цепочке возбуждения, имеющего форму синусоидальных стоячих волн. Это и есть собственные моды. Каждой собственной моде может быть сопоставлено некоторое волновое число, в зависимости от количества умещающихся на длине цепочки полуволн. Число собственных мод N -частичной цепочки равно N , что позволяет построить N дискретных точек на дисперсионной кривой. Таким образом, цепочка рассматривается как резонатор, «вырезающий» из непрерывной дисперсионной кривой бесконечной цепочки те дискретные

значения, при которых возникает резонанс. Очевидным недостатком данного метода является сложность интерпретации полученных результатов: невозможно узнать о характере дисперсии между полученными точками. При этом для увеличения количества точек необходимо рассматривать более длинные цепочки, что требует решения уравнений высоких степеней ($2N$ для N -частичной цепочки).

С переходом к бесконечным цепочкам задача усложняется. Как было сказано выше, при распространении в такой цепочке затухающей волны дисперсионное уравнение содержит в себе расходящийся ряд, что делает невозможным его решение. В этом случае можно рассматривать цепочки без затухания, либо можно учитывать его косвенно. Для этого может быть использован следующий метод. Положим частоту ω и волновое число k формально действительными (в этом случае расходимости нет). Дисперсионное уравнение может быть записано в общем виде:

$$F(k, \omega) = 0.$$

Очевидно, что при подстановке «истинных» дисперсионных значений ω и k функция F обращается в ноль. Если же ω и k не будут строго удовлетворять дисперсионному уравнению, но будут близки к истинным значениям, то функция F также будет немного отличаться от нуля, причем это отличие будет тем больше, чем дальше ω и k отошли от своих истинных значений.

Поскольку в систему введено затухание, строго удовлетворять данному уравнению может лишь пара ω и k , из которых хотя бы одно является комплексным. Тем не менее, если это затухание не очень велико, функция F будет становиться достаточно малой по модулю в тех случаях, когда ω и k максимально близко подходят к своим истинным значениям. Таким образом, построив зависимость $|F(k, \omega)|$ от действительных ω и k , можно увидеть очертания дисперсионных кривых в тех местах, где ω и k совпадают с

действительными частями своих истинных значений. Судить о величине затухания в цепочке в этом случае можно по характерной степени размытия построенных очертаний. Данный метод был реализован в работах [36, 37].

Точный метод построения дисперсии в бесконечной цепочке с учетом затухания был предложен в работе [26]. Он основан на процедуре аналитического продолжения. Ранее было показано [38], что бесконечные ряды вида (4) могут быть просуммированы аналитически (в области, где ряд сходится), используя определение функции полилогарифма [39] :

$$\text{Li}_s(x) = \sum_{m=1}^{\infty} x^m / m^s . \quad (5)$$

Полилогарифм – функция, определенная на всей комплексной плоскости, следовательно, он может являться аналитически продолжением ряда вида (4) и быть определенным даже в тех областях комплексной плоскости, где сам ряд (4) расходится. В [38] аналитическое продолжение использовалось для решения задачи о плазмоне, бегущем в цепочке сферических наночастиц, окруженной усиливающей средой. В [26] это же свойство полилогарифма использовалось для построения дисперсии в цепочке сферических наночастиц в вакууме.

Тем не менее, указанный метод требует знания аналитического закона, по которому взаимодействуют входящие в цепочку частицы, – в противном случае невозможно выполнить суммирование (5) и последующее аналитическое продолжение. Поэтому до настоящего времени построение точной дисперсии осуществлялось только для цепочек частиц сферической формы, поскольку их взаимодействие хорошо описывается диполь-дипольным приближением, которое имеет известную аналитическую зависимость. При этом часто возникает необходимость рассматривать цепочки, состоящие из частиц, имеющих более сложную форму. Так, например, хорошо известны волноводные свойства цепочек кольцевых резонаторов [40]. Помимо этого объектами изучения становятся цепочки

наночастиц в форме цилиндров [41], стержней, гребней [42], а также цепочки отверстий в металлической пленке [29].

В данной работе предлагается метод построения дисперсии в цепочках частиц сложной формы. Он представляет собой обобщение метода для цепочек сферических частиц [26]. В качестве примера рассматривается цепочка кольцевых резонаторов. Для выполнения процедур суммирования и аналитического продолжения используется аппроксимация функций, описывающих зависимость коэффициентов взаимодействия частиц от расстояния, обратно-степенными рядами. Показано, что при увеличении количества членов, входящих в аппроксимирующие ряды, результирующая дисперсия сходится к некоторому предельному значению, которое можно считать истинной дисперсией цепочки. Таким образом, в качестве входной информации метод использует данные о взаимодействии элементов цепочки на разных расстояниях. Эти данные могут быть получены в результате численного моделирования или из эксперимента.

Метод позволяет точно предсказывать картину распространения волн в цепочках, при этом можно разделять волны, соответствующие разным решениям (в том случае, если в цепочке возможно одновременное возбуждение нескольких типов волн). Также явным образом выделяется вклад волны, имеющей неэкспоненциальный характер убывания, что невозможно при использовании других методов. В силу неэкспоненциальности, именно этот вклад доминирует в цепочке на дальних расстояниях от источника.

1.3. Построение дисперсии в цепочках плазмонных частиц с учетом дальних взаимодействий

Прямой и главной особенностью задач о цепочках с полным взаимодействием (по сравнению с задачами о конечных цепочках или цепочках с неполным взаимодействием) является необходимость иметь дело с уравнениями, описывающими попарное взаимодействие бесконечного

количества частиц, то есть содержащими бесконечное количество членов s_n в конструкциях вида $S = \sum_{n=1}^{\infty} s_n$. Можно выделить два принципиальных подхода к решению подобных уравнений, позволяющих учесть каждый из членов s_n , – ручное и аналитическое суммирование.

В первом случае речь идет о том, чтобы выполнить почленное суммирование всех s_n , рассматривая каждый из них обособленно. Очевидно, технически невозможно выполнить эту операцию бесконечное количество раз, поэтому можно попробовать перейти от бесконечного суммирования к приближенной задаче конечного суммирования. При этом может интуитивно показаться, что при увеличении количества взятых членов их сумма будет асимптотически приближаться к своему истинному значению S , то есть, что имеет место предельный переход $\sum_{n=1}^N s_n \xrightarrow{N \rightarrow \infty} S$ (в этом случае можно обеспечить любую необходимую точность решения задачи, взяв достаточно большое количество членов s_n). Однако, в действительности этого не происходит, и увеличение (конечного) количества членов не приводит к верному решению.

Второй подход – аналитическое суммирование – предполагает, что все s_n могут быть приняты во внимание *одновременно* в ходе аналитического суммирования, т.е. если удалось найти аналитическую сумму ряда $S = \sum_{n=1}^{\infty} s_n$. Однако, это требует того, чтобы все s_n могли быть описаны единой формулой, иными словами, необходимо знать аналитическую зависимость, описывающую взаимодействие элементов на сколь угодно большом расстоянии. Примером системы, для которой такая зависимость известна, является цепочка точечных электрической диполей (этой моделью, например, хорошо описывается цепочка сферических наночастиц), дисперсия которой была найдена в [26].

Однако, для подавляющего числа частиц сложной формы такой аналитической зависимости не существует, то есть взаимодействие частиц может быть посчитано лишь численно для любого конечного количества n . Таким образом, задача нахождения дисперсии сводится к задаче аппроксимации, то есть к поиску такой функции, которая представляла бы взаимодействие между частицами на всем интервале $n \in [1, \infty)$ при условии, что точные значения функции взаимодействия известны лишь для конечного числа s_n .

Глава 2. ЦЕПОЧКА СФЕРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ

Рассмотрим цепочку наночастиц, возбуждаемую неоднородно распределенным по цепочке внешним полем заданной частоты ω , направленным перпендикулярно цепочке (T -поляризация). Это поле может создаваться падающей волной, ближнепольным источником или излучающими атомами. Найдем возбуждаемое этим полем распределение дипольных моментов в цепочке.

Дипольный момент p_n частицы с номером n , имеющей поляризуемость α , возникает под действием внешнего поля E^{ext} и поля, создаваемого всеми остальными частицами в цепочке:

$$p_n = \alpha E_n^{ext} + \alpha \sum_{m \neq n} g_{mn} p_m. \quad (6)$$

Здесь введено обозначение g_{mn} для поля m -го единичного диполя в месте расположения n -го диполя для T -поляризации:

$$g_{mn} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{d^3} \left(-\frac{1}{|m-n|^3} + \frac{ik_0 d}{|m-n|^2} + \frac{(k_0 d)^2}{|m-n|} \right) \exp(ik_0 d |m-n|), \quad m \neq n, \quad (7)$$

где d – период цепочки и $k_0 = \omega / c$ – приведенная частота.

Поляризуемость сферической частицы может быть найдена, используя следующую формулу [27, 43]:

$$\frac{1}{\alpha} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{\epsilon + 2}{\epsilon - 1} \frac{1}{a^3} - i \frac{2}{3} k_0^3 \right), \quad (8)$$

где ϵ - диэлектрическая проницаемость, a - радиус частицы. В качестве материала частиц выбрано серебро. Для частотной зависимости диэлектрической проницаемости используются экспериментальные данные [44].

Перейдем к Фурье-представлению и обозначим Фурье-образы распределения дипольных моментов и внешнего поля

$$p(k) = (2\pi)^{-1} \sum_n p_n \exp(-iknd), \quad (9)$$

$$e(k) = (2\pi)^{-1} \sum_n E_n^{ext} \exp(-iknd), \quad (10)$$

считая на этом этапе волновое число k вещественным. Тогда, выполняя преобразование Фурье от обеих частей (6), получим:

$$p(k) = \alpha e(k) + \alpha p(k) \sum_{m \neq 0} g_{m0} e^{ikmd} \quad (11)$$

или

$$p(k) = \alpha e(k) + (\alpha / d^3) f_0(k) p(k), \quad (12)$$

где введена безразмерная спектральная функция вещественного аргумента k :

$$f_0(k) = d^3 \sum_{m \neq 0} g_{m0} e^{ikmd}. \quad (13)$$

Здесь необходимо сделать следующее замечание. Ряд, которым представлена функция $f_0(k)$, сходится лишь условно в силу члена $\sum_{m \neq 0} \exp(ik_0 d |m - n|) / |m|$. Это делает применение преобразования Фурье к уравнению (6), строго говоря, некорректным. На это обстоятельство не было обращено внимания в ряде работ, посвященных исследованию плазмонов в бесконечных цепочках [26, 38, 45, 46]. Забегая вперед, отметим, что по той же причине аналитическое продолжение функции $f_0(k)$ с действительной оси на комплексную плоскость, выполненное в (17) с использованием полилогарифмов, нуждается в дополнительном обосновании. Более строгий вывод, с акцентом на анализе сходимости рядов, разрешающий обе эти проблемы, приведен в Приложении А. Здесь же мы ради простоты будем игнорировать их.

Перепишем функцию $f_0(k)$, отделив друг от друга вклады частиц, расположенных по одну и по другую сторону от рассматриваемой частицы:

$$f_0(k) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{m=1}^{+\infty} \left(-\frac{1}{m^3} + \frac{ik_0d}{m^2} + \frac{(k_0d)^2}{m} \right) e^{i(k_0+k)md} + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{m=1}^{+\infty} \left(-\frac{1}{m^3} + \frac{ik_0d}{m^2} + \frac{(k_0d)^2}{m} \right) e^{i(k_0-k)md}. \quad (14)$$

Таким образом, решение нашей задачи в Фурье-представлении имеет вид

$$p(k) = \frac{\alpha e(k)}{1 - (\alpha/d^3) f_0(k)}. \quad (15)$$

Вернемся в реальное пространство с помощью обратного преобразования Фурье:

$$p_n = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\alpha e(k) \exp(ikn)}{1 - (\alpha/d^3) f_0(k)} dk. \quad (16)$$

Формула (16) позволяет найти распределение дипольных моментов p_n для произвольного источника через его Фурье-образ $e(k)$.

Заметим, что здесь речь пока идет о вещественных k , так что оба ряда (см. (14)), составляющих функцию $f_0(k)$, сходятся. Ввиду дальнейшего рассмотрения комплексных k заметим, что первый и второй ряды в (14) расходятся, соответственно, в верхней и нижней комплексной полуплоскости k . Функция $f_0(k)$, таким образом, может быть определена только при $\text{Im}(k) = 0$. Для перехода к комплексным волновым числам необходимо найти аналитическое продолжение $f(k)$ функции $f_0(k)$ на комплексную плоскость [27]. В данном случае ряды, входящие в функцию $f_0(k)$, могут

быть просуммированы аналитически, используя определение полилогарифма

$$\text{Li}_s(x) = \sum_{m=1}^{\infty} x^m / m^s \quad [39]:$$

$$\begin{aligned} f(k) = & - \left[\text{Li}_3 \left(e^{i(k_0+k)d} \right) + \text{Li}_3 \left(e^{i(k_0-k)d} \right) \right] + \\ & + ik_0 d \left[\text{Li}_2 \left(e^{i(k_0+k)d} \right) + \text{Li}_2 \left(e^{i(k_0-k)d} \right) \right] \\ & + (k_0 d)^2 \left[\text{Li}_1 \left(e^{i(k_0+k)d} \right) + \text{Li}_1 \left(e^{i(k_0-k)d} \right) \right]. \end{aligned} \quad (17)$$

Заметим, что полилогарифм может быть вычислен с произвольной точностью для любого комплексного k . Эта возможность встроена во многие математические пакеты, такие как Wolfram Mathematica, Matlab, Maple.

Таким образом, получена функция $f(k)$, которая совпадает с функцией $f_0(k)$ на действительной оси, но в отличие от нее может быть вычислена на всей комплексной плоскости. Следовательно, она является аналитическим продолжением $f_0(k)$. После замены $f_0(k)$ на $f(k)$ в выражении (16) можно перейти от действительных k к комплексным. Путь интегрирования $[-\pi, \pi]$ в этом случае представлен отрезком на действительной оси (см. рис. 1).

Рассмотрим теперь цепочку, возбуждаемую точечным источником, то есть предположим, что единичное внешнее поле действует только на одну частицу с некоторым номером m :

$$E_n^{ext} = \delta_{nm}$$

Другими словами, найдем функцию Грина рассматриваемой системы. Фурье-образ такого источника представляет собой экспоненту:

$$e(k) = (2\pi)^{-1} e^{-ikmd}$$

Используя его, найдем распределение дипольных моментов по формуле (16):

$$p_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\alpha \exp(ik(n-m))}{1 - (\alpha/d^3) f(k)} dk \quad (18)$$

Далее рассмотрим случай $n - m \geq 0$ (наночастицы, расположенные правее δ -источника). В этом случае значение подынтегрального выражения в формуле (18) стремится к нулю при $\text{Im}k \rightarrow +\infty$, и путь интегрирования может быть сдвинут в верхнюю комплексную полуплоскость. При этом он должен быть деформирован таким образом, чтобы он не пересекал особенностей подынтегральной функции (см. рис. 1). В результате интеграл (18) распадается на сумму интегралов, взятых вокруг каждой особенности. Как можно видеть из рис. 1, подынтегральная функция в уравнении (18) имеет в верхней полуплоскости три особенности – два полюса и один разрез. В распределении дипольных моментов p_n , таким образом, присутствуют три вклада:

$$P_n = P_{n,pole_1} + P_{n,pole_2} + P_{n,cut} \quad (19)$$

Каждый интеграл, взятый по контуру, окружающему полюс, может быть выражен через соответствующий вычет:

$$\begin{aligned} P_{n,pole} &= \oint_{pole} \frac{\alpha \exp(ik(n-m))}{1 - (\alpha/d^3) f(k)} dk = 2\pi i \text{Res}_{pole} \left[\frac{\alpha \exp(ik(n-m))}{1 - (\alpha/d^3) f(k)} \right] = \\ &= 2\pi i \frac{\alpha \exp(ik_{pole}(n-m))}{-(\alpha/d^3) f'(k_{pole})} \end{aligned} \quad (20)$$

Производная в знаменателе (20) рассчитывается аналитически:

$$\begin{aligned} f'(k) &= -id \left[\text{Li}_2(e^{i(k_0+k)d}) - \text{Li}_2(e^{i(k_0-k)d}) \right] - k_0 d^2 \left[\text{Li}_1(e^{i(k_0+k)d}) - \text{Li}_1(e^{i(k_0-k)d}) \right] + \\ &\quad + ik_0^2 d^3 \left[\text{Li}_0(e^{i(k_0+k)d}) - \text{Li}_0(e^{i(k_0-k)d}) \right] = \\ &= -id \left[\text{Li}_2(e^{i(k_0+k)d}) - \text{Li}_2(e^{i(k_0-k)d}) \right] + k_0 d^2 \left[\ln(1 - e^{i(k_0+k)d}) - \ln(1 - e^{i(k_0-k)d}) \right] + \\ &\quad + ik_0^2 d^3 \left[\frac{e^{i(k_0+k)d}}{1 - e^{i(k_0+k)d}} - \frac{e^{i(k_0-k)d}}{1 - e^{i(k_0-k)d}} \right]. \end{aligned}$$

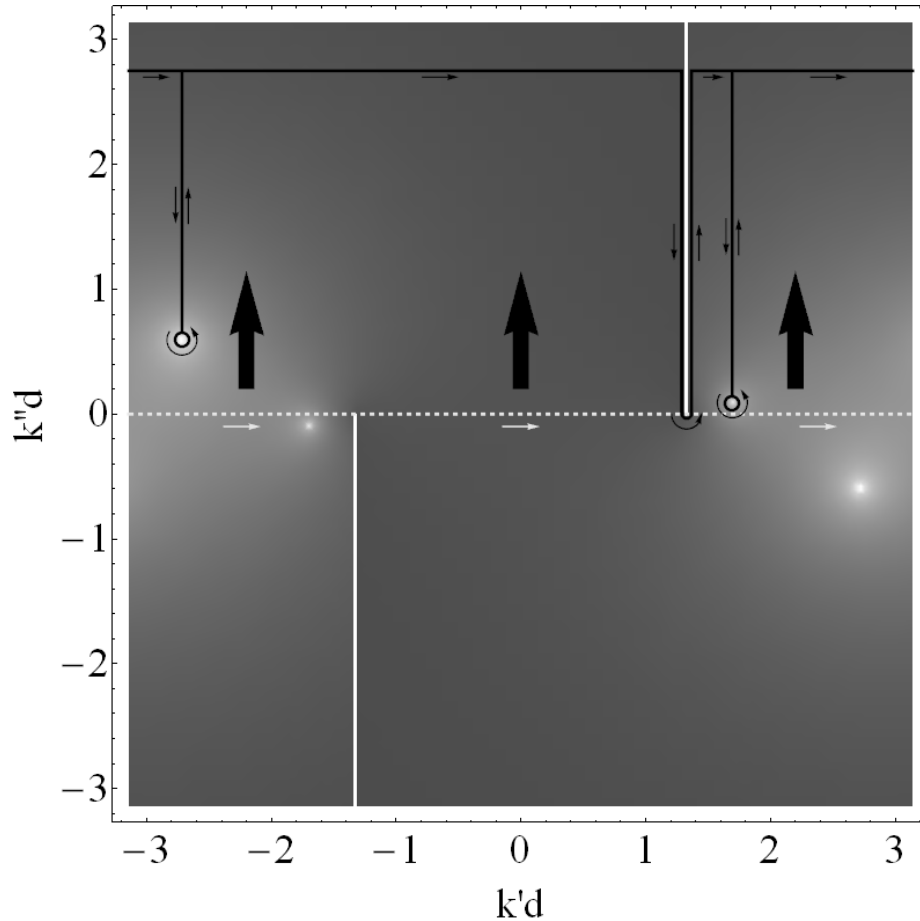


Рисунок 1. График абсолютной величины спектральной функции $1/(1 - \alpha/d^3 f(k' + ik''))$ (показана цветом) на комплексной плоскости. Горизонтальная белая пунктирная линия – исходный путь интегрирования, черная линия – путь интегрирования после смещения. Большие черные стрелки показывают направление смещения пути интегрирования. Маленькие стрелки показывают направление интегрирования. График построен при частоте $\omega = 5.31 \times 10^{15} \text{ с}^{-1}$. В целях наглядности использована модель поляризуемости частицы (8) и дисперсия диэлектрической проницаемости металла из работы [46]. Здесь и далее радиус частицы принимается равным $a = 25 \text{ нм}$, расстояние между центрами частиц $d = 75 \text{ нм}$ (те же параметры были использованы в работах [27, 46]).

Здесь использованы следующие свойства полилогарифма:
 $d\text{Li}_n z / dz = \text{Li}_{n-1} z / z$, $\text{Li}_1 z = -\ln(1 - z)$, $\text{Li}_0 z = z / (1 - z)$.

Как видно из выражения (20), вклады $p_{n,pole_1}$ и $p_{n,pole_2}$ в распределение дипольных моментов p_n имеют вид экспоненциально затухающих гармонических волн¹ – плазмонов – с волновыми числами k_{pole_1} и k_{pole_2} . Последние могут быть найдены из условия равенства нулю знаменателя в (18):

$$1 - (\alpha / d^3) f(k) = 0, \quad (21)$$

Заметим, что выражение (21) формально может быть получено при рассмотрении уравнения (12) в отсутствие источника ($e(k)=0$) и распространении действия этого уравнения на комплексную плоскость k путем замены функции $f_0(k)$ на ее аналитическое продолжение $f(k)$. В этом смысле (21) есть дисперсионное уравнение собственного решения (плазмона) в бесконечной цепочке сферических наночастиц.

Вклад $p_{n,cut}$, связанный с обходом пути интегрирования вокруг разреза, имеет неэкспоненциальный характер затухания, поскольку включает в себя сумму многих гармоник.

Задача о возбуждении цепочки источником произвольной формы может быть решена как напрямую, с помощью формулы (16), так и используя полученные выше результаты для дельта-источника. В силу линейности уравнения (21) любой источник может быть представлен как набор дельта-источников. Тогда результирующее решение будет представлять собой линейную комбинацию соответствующих им решений типа (19). В этом

¹Очевидно, при смещении контура интегрирования в верхнюю полуплоскость могут быть задействованы волновые числа только с $\text{Im}k \geq 0$, что соответствует затуханию волны в положительном направлении. Аналогично, для $m < n$ смещение контура будет производиться в нижнюю полуплоскость, и задействованы будут волновые числа с $\text{Im}k \leq 0$.

смысле найденная суперпозиция решений, возбуждаемых дельта-источником, подобна функции Грина.

Используя дисперсионное уравнение (21), можно построить дисперсионные кривые, соответствующие плазмонным вкладам P_{pole_1} и P_{pole_2} . Эти кривые изображены на рис. 2.

Вклад P_{pole_1} соответствует обратной волне с минимумом затухания в окрестности собственной частоты дипольного резонанса частицы. Дисперсия вклада P_{pole_2} имеет вид, характерный для так называемых слабо локализованных плазмонов – плазмонов с очень слабым затуханием, распространяющихся со скоростью, близкой к скорости света. Для сравнения на том же рисунке приведена дисперсионная зависимость, найденная с использованием приближения ближайших соседей. Заметны существенные различия между ней и дисперсией, полученной по точному методу. В первую очередь, приближение ближайших соседей не обнаруживает существования слабо локализованного плазмона, указывая лишь на медленную обратную волну. Во-вторых, дисперсия найденная по точному методу остается в пределах одной зоны Бриллюэна, в то время как дисперсия, найденная по методу приближения ближайших соседей, пересекает отметку $-\pi$. В-третьих, затухание обратного плазмона на резонансной частоте, найденное по точному методу, оказывается примерно в два раза выше, чем то, что предсказывается в рамках приближения ближайших соседей.

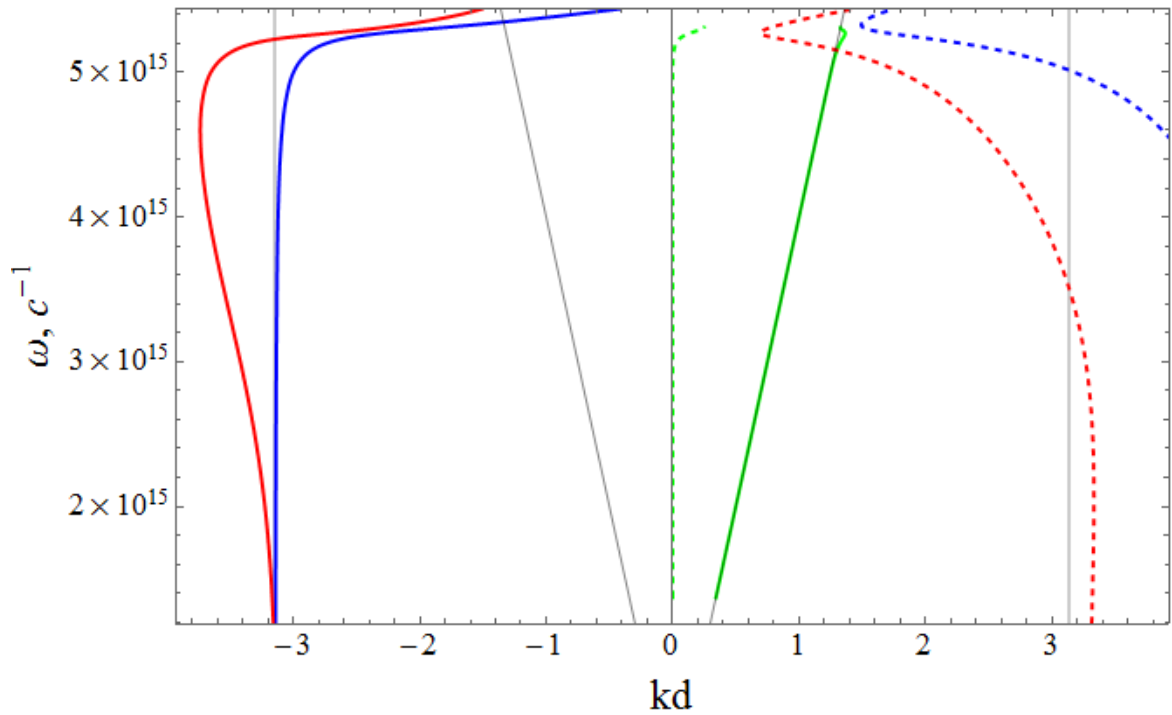


Рисунок 2. Дисперсионные кривые в бесконечной цепочке сферических наночастиц. Радиус частицы $a = 25\text{нм}$, период цепочки $d = 75\text{нм}$. Материал частиц – серебро, для частотной зависимости диэлектрической проницаемости использованы данные [44]. Синим и зеленым цветами изображены дисперсионные кривые, соответствующие вкладам P_{pole_1} и P_{pole_2} , соответственно. Красным цветом показана для сравнения дисперсионная кривая, найденная по методу приближения ближайших соседей. Сплошные кривые обозначают действительную часть волнового числа, пунктирные – мнимую.

Представляется интересным сравнить полученные результаты с решениями, возбуждаемыми в конечной цепочке с учетом взаимодействия всех частиц друг с другом. Для этого нами рассмотрено возбуждение цепочки, состоящей из 201 частицы, пронумерованных от -100 до 100,

дельта-источником, установленным на нулевой элемент¹. Данная задача решается с помощью матричного метода, описанного ранее [27]. Результат

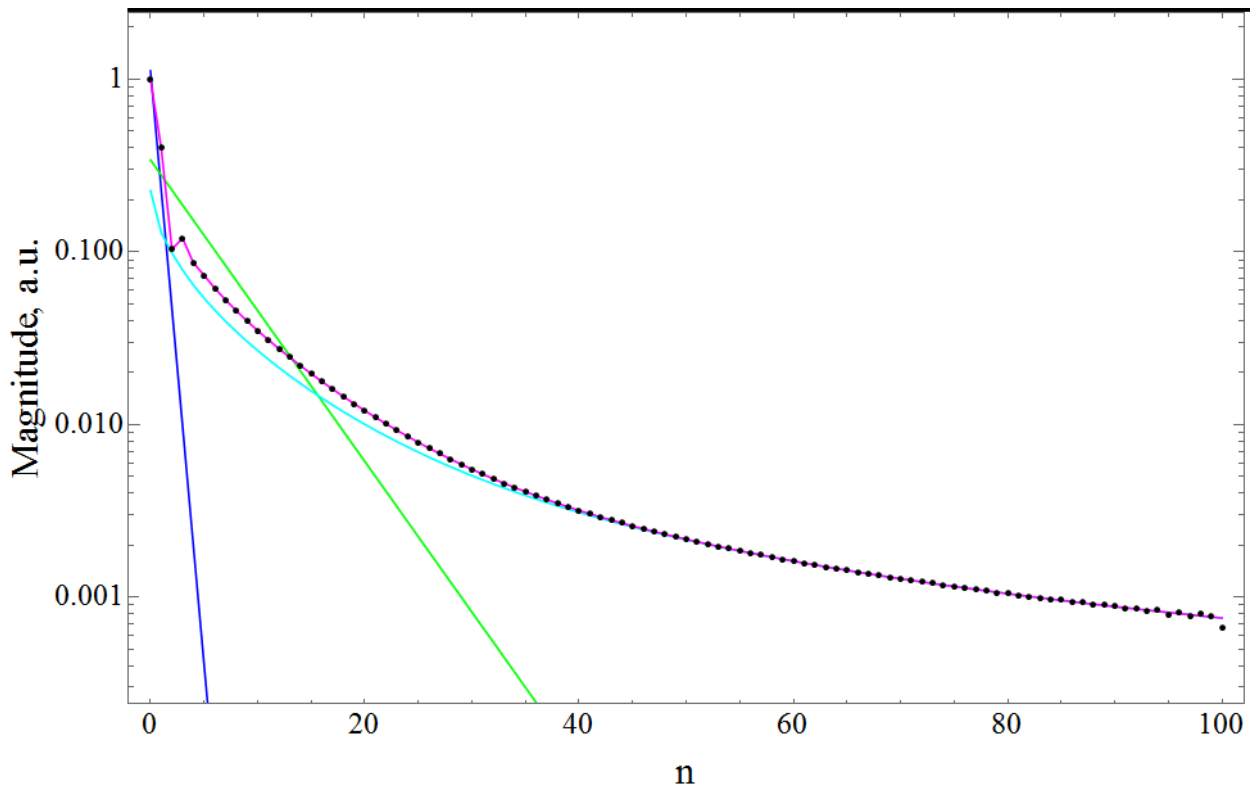


Рисунок 3. Профиль затухания волн, возбуждаемых на частоте дипольного резонанса точечным источником, установленным на нулевой элемент, в конечной и бесконечной цепочке сферических наночастиц. Радиус частицы $a = 25\text{нм}$, период цепочки $d = 75\text{нм}$. Материал частиц – серебро, для частотной зависимости диэлектрической проницаемости использованы данные [44]. Точками показаны амплитуды колебаний в конечной цепочке, найденные по методу [27], фиолетовой линией – в бесконечной цепочке. Синей, зеленой и голубой линиями показаны отдельно вклады сильно- и слабозатухающего плазмонов (p_{pole_1} и p_{pole_2} , соответственно), а также вклад волны, имеющей неэкспоненциальный профиль затухания (p_{cut}).

¹ Такой выбор обусловлен желанием избавиться от волн, отраженных от концов цепочки. Результат расчета был бы существенно другим, если бы возбуждение цепочки производилось источником, установленным, например, на один из крайних элементов цепочки.

сравнения представлен на рис. 3. Наблюдается превосходное совпадение результатов обоих методов, за исключением небольшого участка на конце цепочки, где имеет место интерференция с отраженной волной. Также видно, что сложение вкладов слабо затухающего плазмона p_{pole_2} и волны с неэкспоненциальным профилем затухания p_{cut} происходит деструктивно. Кроме того, сильное затухание плазмонных вкладов p_{pole_1} и p_{pole_2} приводит к тому, что на больших расстояниях от источника доминирует вклад неэкспоненциально затухающей волны p_{cut} . Стоит отметить, что при наличии в цепочке ненулевого затухания (выражаемого мнимой частью поляризуемости α) такая картина будет наблюдаться в любом случае, так как экспоненциальное затухание плазмонов всегда будет асимптотически более быстрым, чем затухание вклада типа p_{cut} . От конкретных параметров цепочки, таких как коэффициенты взаимодействия между частицами или величина омических потерь, может зависеть лишь расстояние от источника, на котором произойдет смена доминирующего решения.

Глава 3. ЦЕПОЧКА КОЛЬЦЕВЫХ РЕЗОНАТОРОВ

Описанный выше метод может быть обобщен на случай цепочек частиц произвольной формы. В качестве примера мы выбрали аксиальную цепочку кольцевых резонаторов. Кольцевые резонаторы – это популярные элементы в плазмонике и радиофизике [47-49]. Было показано, что такие цепочки могут быть использованы в качестве волноводов, причем волны, распространяющиеся в них, во многом аналогичны волнам в цепочках сферических наночастиц [50].

Кольцевой резонатор представляет собой частицу в форме кольца с небольшим зазором. Кольцевой резонатор обладает серией собственных мод, каждая из которых имеет характерное распределение заряда и собственную частоту [24]. Здесь мы рассматриваем основную (магнитодипольную) моду. Для описания динамики кольцевого резонатора в режиме магнитодипольных колебаний мы будем применять часто используемую модель колебательного контура [51]. Согласно этой модели, кольцевой резонатор обладает эффективными параметрами индуктивности, сопротивления и емкости, которые определяют частоту и характер колебаний аналогично тому, как это происходит в LC - контуре. Уравнение колебаний заряда в резонаторе в таком случае выглядит следующим образом:

$$\ddot{q}(t)L + \dot{q}(t)R + q(t)/C = \varepsilon_{\text{внеш}}(t) \quad (22)$$

– здесь L – индуктивность, R – сопротивление, C – емкость резонатора, $q(t)$ – амплитуда колебаний. Поскольку магнитодипольная мода антисимметрична, $q(t)$ можно формально определить как электрический заряд одной половины резонатора. $\varepsilon_{\text{внеш}}(t)$ – это внешняя ЭДС, выполняющая роль вынуждающей силы. Она может быть наведена соседними резонаторами либо внешними по отношению к цепочке ЭМ-полями. Уравнение (22) может быть поделено на L и переписано в виде:

$$\ddot{q}(t) + 2\gamma\dot{q}(t) + \omega_0^2 q(t) = \varepsilon_{внеш}(t) / L. \quad (23)$$

Здесь $\omega_0 = 1/(LC)^{1/2}$ - собственная частота резонатора (называемая также частотой LC-резонанса), $\gamma = R/2L$ - коэффициент затухания. Собственная индуктивность L кольцевого резонатора может быть вычислена по формуле Ландау-Лифшица [52]:

$$L = \mu_0 R \left(\ln \left(\frac{8R}{a} \right) - \frac{7}{4} \right).$$

Коэффициенты ω_0 и γ могут быть определены в ходе решения задачи на собственные значения как, соответственно, действительная и мнимая части комплексной собственной частоты магнитодипольной моды. Решение данной задачи осуществлялось в среде COMSOL (см. рис. 4).

Геометрическая форма резонатора представляет собой тор радиусом 250 нм и радиусом сечения 50 нм, из которого вырезан сектор угловым размером 0,8 рад. На концах тора находятся плавно сопряженные с ним скругления в форме эллипсоидов с полуосями 50 и 25 нм. Материалом резонатора является серебро, частотная зависимость диэлектрической проницаемости взята из [53].

Две первые комплексные собственные частоты, найденные из задачи на собственные значения, равны $\hat{\omega}_0 = (37,9 + 1,49i) \times 10^{13} c^{-1}$ для магнитодипольной моды и $\hat{\omega}_1 = (10,8 + 2,55i) \times 10^{14} c^{-1}$ для электродипольной. Таким образом, для магнитодипольной моды получаем собственную частоту $\omega_0 = 3,79 \times 10^{14} c^{-1}$ и коэффициент затухания $\gamma = 1,5 \times 10^{13} c^{-1}$. Верхняя граница диапазона применимости магнитодипольного приближения выбрана равной $\omega_1 = 5,8 \times 10^{14} c^{-1}$.

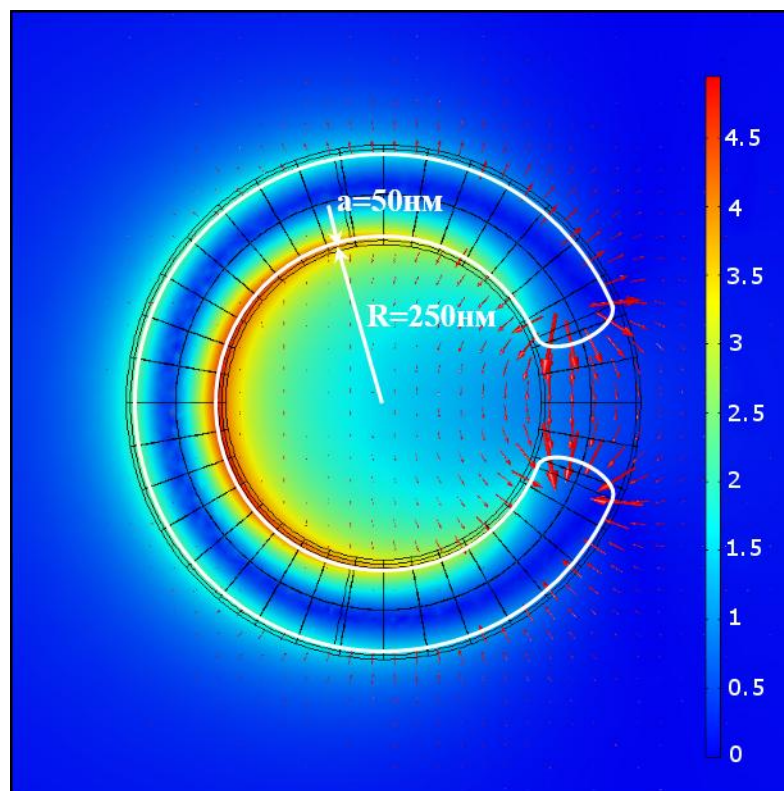


Рисунок 4. Магнитодипольная мода кольцевого резонатора (симуляция COMSOL). На рисунке показано распределение модулей магнитного (цвет) и электрического (стрелки) полей. Резонатор имеет форму тора с радиусом $R = 250 \text{ nm}$ и радиусом сечения $a = 50 \text{ nm}$.

Также из данных численного моделирования восстанавливались распределения тока и заряда в магнитодипольной моде. При этом использовалось приближение токов, текущих вдоль бесконечно тонкой нити, проходящей по окружности резонатора. В этом приближении детали этих распределений на масштабах, меньших, чем диаметр поперечного сечения резонатора, можно считать незначительными. Таким образом, функции распределения моделируются 36-ю дискретными значениями, изображенными на рис. 5.

Взаимодействие между кольцевыми резонаторами может быть описано в терминах взаимной емкости K и взаимной индуктивности M :

$$\varepsilon_{nm} = -M_{nm} \ddot{q}_m + K_{nm}^{-1} q_m,$$

и уравнение, описывающее динамику целой цепочки, может быть получено из (23):

$$\ddot{q}_n + 2\gamma\dot{q}_n + \omega_0^2 q_n = \frac{1}{L} \sum_{m \neq n} (M_{nm} \ddot{q}_m + K_{nm}^{-1} q_m) + \varepsilon_n^{ext}. \quad (24)$$

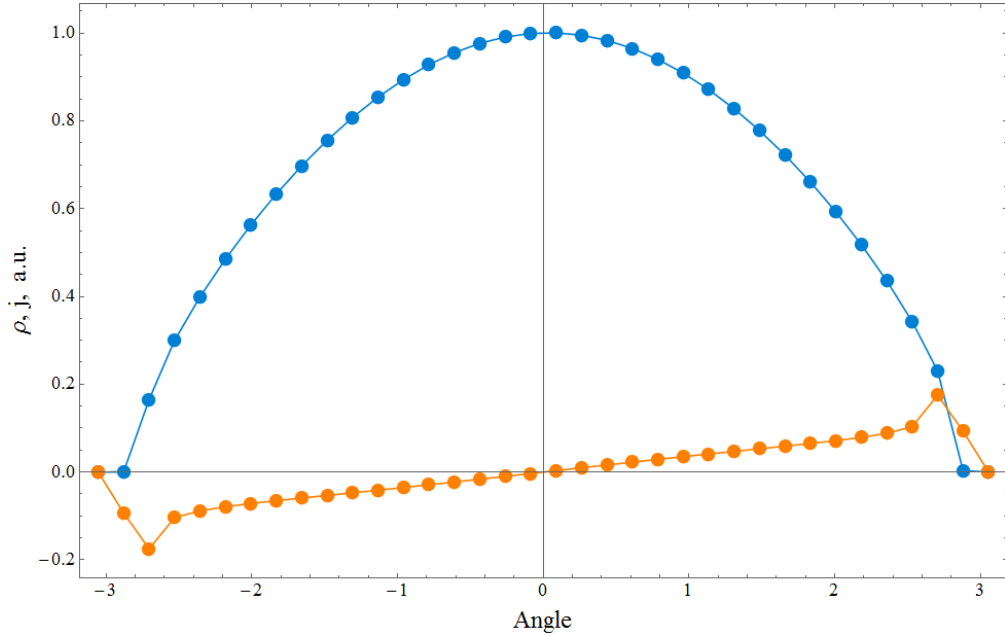


Рисунок 5. Угловое распределение тока (синий) и зарядовой плотности (оранжевый) в кольцевом резонаторе. Нормировка выбрана таким образом, чтобы заряд одной половины резонатора, а также плотность тока в его центре равнялись единице.

Здесь K_{nm} и M_{nm} обозначают взаимную емкость и взаимную индуктивность между n -ым и m -ым элементом. Также далее в тексте будут использоваться следующие обозначения: $K_m = K_{n,n+m}$, $M_m = M_{n,n+m}$. Очевидно, K_m и M_m не зависят от n в силу трансляционной инвариантности цепочки. K и M без нижних индексов следует понимать как непрерывные функции расстояния между элементами, таким образом $K_m = K(md)$ и $M_m = M(md)$, где d - период цепочки.

Принимая временную зависимость $q(t)$ в виде $q(t) \sim e^{-i\omega t}$, уравнение (24) может быть переписано:

$$-(\omega^2 + i2\gamma\omega - \omega_0^2)q_n = \frac{1}{L} \sum_{m=1}^{\infty} (\omega^2 M_m - K_m^{-1})(q_{n+m} + q_{n-m}) + \frac{\varepsilon_n^{ext}}{L}. \quad (25)$$

Нетрудно показать, что уравнение (25) может быть сведено к виду (6). Для этого нужно принять следующие обозначения (здесь индекс SRR означает split-ring resonator):

$$\alpha_{SRR} = \frac{1}{-\omega^2 - 2i\gamma\omega + \omega_0^2},$$

$$g_{SRR,n-m} = \left(\omega^2 \frac{M_{n-m}}{L} - \omega_0^2 \frac{C}{K_{n-m}} \right),$$

$$E_{SRR}^{ext} = \frac{\varepsilon_n^{ext}}{L}.$$

Здесь $g_{SRR,n-m} = g_{SRR,mm}$, аналогично тому, как это было определено для M_n и K_n (см. обсуждение после формулы (24)).

Тогда уравнение (25) приводится к виду:

$$q_n = \alpha_{SRR} \sum_{m=1}^{\infty} g_{SRR_m} (q_{n+m} + q_{n-m}) + \alpha_{SRR} E_{SRR_n}^{ext},$$

что эквивалентно (6). Это позволяет повторить те же рассуждения, что были приведены в предыдущем разделе для цепочки сферических наночастиц. Однако, перед этим необходимо получить аналитический вид функции g_m , то есть, функций M_m и K_m .

Коэффициенты M и K в приближении нитевидных токов могут быть вычислены по следующим формулам [54]:

$$M = \frac{\mu_0}{4\pi} \iint \frac{I(\vec{r}_1)I(\vec{r}_2)e^{\frac{i\omega}{c}|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2, \quad (26)$$

$$K^{-1} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \iint \frac{q(\vec{r}_1)q(\vec{r}_2)e^{\frac{i\omega}{c}|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2. \quad (27)$$

Здесь функции $q(\vec{r})$ и $I(\vec{r})$ - восстановленные функции распределения заряда и тока (см. рис. 5). Формулы (26) и (27) позволяют вычислить коэффициенты взаимодействия для любой пары элементов. Тем не менее, они не могут рассматриваться как аналитические выражения, поэтому для решения задачи нахождения дисперсии необходимо выполнить поиск функций, аппроксимирующих выражения (26) и (27) на всем диапазоне рассматриваемых расстояний.

Функции M и K^{-1} в силу эффектов запаздывания быстро осциллируют с расстоянием l . Для облегчения задачи аппроксимации необходимо выделить осциллирующий фазовый множитель, то есть представить их в виде (здесь и далее все расстояния измеряются в радиусах R , $k_0 = \omega c / R$ – безразмерное волновое число):

$$K^{-1}(l) = K^{*-1}(l)e^{ik_0l},$$

$$M(l) = M^*(l)e^{ik_0l}.$$

В качестве аппроксимирующих функций предлагается использовать обратно-степенные ряды. Функции M^* и K^{*-1} имеют быстрый рост в окрестности нуля и асимптотически приближаются к нулю на больших расстояниях, поэтому предполагается, что для точной аппроксимации потребуется всего несколько членов.

Таким образом, функции M и K^{-1} ищутся в виде:

$$M \approx M_{app} = \sum_{n=1}^N \frac{B_n}{l^n} e^{ik_0l}, \quad (28)$$

$$K^{-1} \approx K_{app}^{-1} = \sum_{n=1}^N \frac{A_n}{l^n} e^{ik_0l}. \quad (29)$$

Здесь A_n и B_n – некоторые комплексные коэффициенты, N – количество членов, используемых для аппроксимации. Представление

функций в таком виде также удобно тем, что функция g_{mn} для кольцевого резонатора принимает вид, аналогичный виду для сферических наночастиц (7):

$$g_{SRR} = \omega^2 \frac{M}{L} - \frac{1}{KL} \approx \frac{\omega^2}{L} \left(\sum_{n=1}^N \frac{B_n}{l^n} \right) e^{ik_0 l} - \frac{1}{L} \left(\sum_{n=1}^N \frac{A_n}{l^n} \right) e^{ik_0 l} =$$

$$= \left(\sum_{n=1}^N \frac{B_n \omega^2 - A_n}{l^n} \right) \frac{e^{ik_0 l}}{L},$$

что позволяет в дальнейшем, используя аналогичный формализм, получить дисперсионное уравнение в виде:

$$1 - \alpha_{SRR} f_{SRR}(k) = 0, \quad (30)$$

где $f_{SRR}(k)$ имеет вид, аналогичный таковому для цепочки сферических частиц (17):

$$f_{SRR}(k) = \sum_{n=1}^N (B_n \omega^2 - A_n) \left[Li_n \left(e^{i(k_0+k)d} \right) + Li_n \left(e^{i(k_0-k)d} \right) \right]. \quad (31)$$

Уравнение (30) – это дисперсионное уравнение плазмонов в цепочке кольцевых резонаторов.

Поиск оптимальных значений A_n и B_n производится путем минимизации выражений:

$$err_{K^{-1}}(A_1, \dots, A_n) = \sum_i \frac{\left| K^{*-1}(l_i) - \sum_{n=1}^N A_n / l_i^n \right|^2}{\left| K^{*-1}(l_i) \right|^2}, \quad (32)$$

$$err_M(B_1, \dots, B_n) = \sum_i \frac{\left| M^*(l_i) - \sum_{n=1}^N B_n / l_i^n \right|^2}{\left| M^*(l_i) \right|^2}, \quad (33)$$

которые представляют собой суммарную относительную погрешность аппроксимации. l_i обозначает сетку, по узлам которой ведется

суммирование. Значения функций M и K^{-1} вычисляются в каждом узле по формулам (26) и (27).

Важным в стратегии аппроксимации является то, чтобы искомая аппроксиманта воспроизводила свойства исходной функции как на малых, так и на больших расстояниях. Это приводит к ряду особенностей дизайна задачи оптимизации выражений (32) и (33), которые должны быть учтены для ее успешного выполнения. Во-первых, значения M^* и K^{*-1} при больших l могут быть на несколько порядков меньше, чем при $l \sim 1$. Поэтому важно использовать в выражениях (32) и (33) относительную погрешность, а не абсолютную, в противном случае дальние узлы l_i будут проигнорированы методом как незначительные. Во-вторых, скорость изменения значений M^* и K^{*-1} с расстоянием уменьшается при увеличении расстояния, поэтому для отражения свойств функций на больших расстояниях нужно меньшее количество узлов сетки на единицу расстояния по сравнению с малыми расстояниями. Поэтому для равномерного учета свойств функций M^* и K^{*-1} при всех l_i следует использовать логарифмическую сетку. В-третьих, следует определить тот диапазон расстояний, на котором будет производиться аппроксимация. Приближение нитевидных токов, которое используется для вычисления M^* и K^{*-1} , не позволяет корректно найти их для расстояний $l < 1$. Это же накладывает ограничение снизу на период исследуемых цепочек. Далее в каждом случае нижняя граница диапазона аппроксимации будет приниматься равной периоду рассматриваемой цепочки, поскольку рассматривать взаимодействие элементов на меньшем расстоянии не имеет смысла. Что касается дальней границы, ее следует брать достаточно большой, чтобы из всех членов, входящих в аппроксимирующие выражения (28) и (29), выжили только младшие. В этом случае на конце диапазона аппроксимации будет присутствовать участок, на котором младший член доминирует по сравнению с остальными членами, что позволяет точно определить

значение коэффициента при этом члене в ходе оптимизации. В противном случае нахождение этого коэффициента будет затруднено, поскольку на недостаточно больших расстояниях младший член оказывается слишком малым по сравнению с остальными членами. Наконец, нужно отметить, что вследствие симметричности рассматриваемой магнитодипольной моды выражение для обратной емкости (27) не имеет первого члена в аппроксимации (29), то есть что $A_1 \equiv 0$.

В данной работе использовался следующий дизайн задачи аппроксимации:

Сетка аппроксимации содержит 41 узел для аппроксимации K^{*-1} и 31 узел для аппроксимации M^* . Ближний конец сетки принимается равным $l = d$ (d - период цепочки, использовались значения $d = 1, 2$), дальний конец принимается $l = 10000$ в случае K^{*-1} и $l = 1000$ в случае M^* . Узлы на каждой из сеток распределены логарифмически от ближнего до дальнего края.

Поиск наилучшей аппроксиманты выполняется итерационно, увеличивая на каждом шаге количество аппроксимирующих членов N на 1, начиная с $N = 4$. На каждом шаге задача оптимизации (32)-(33) решается методом Ньютона с начальными значениями варьируемых параметров, принимаемыми равными значениям тех же параметров, полученным на предыдущей итерации (или 0 если такого значения не существует, т.е. если параметр появляется на данной итерации впервые). Действительная и мнимая части каждого параметра варьируются как две независимые переменные, также всегда $A_1 = 0$.

Весь описанный итерационный процесс проводится для каждого значения частоты ω из исследуемого частотного интервала (от 0 до $\omega_1 = 5,8 \times 10^{14} \text{ c}^{-1}$).

Пример результата аппроксимации, полученный на одной из итераций, показан на рис. 6.

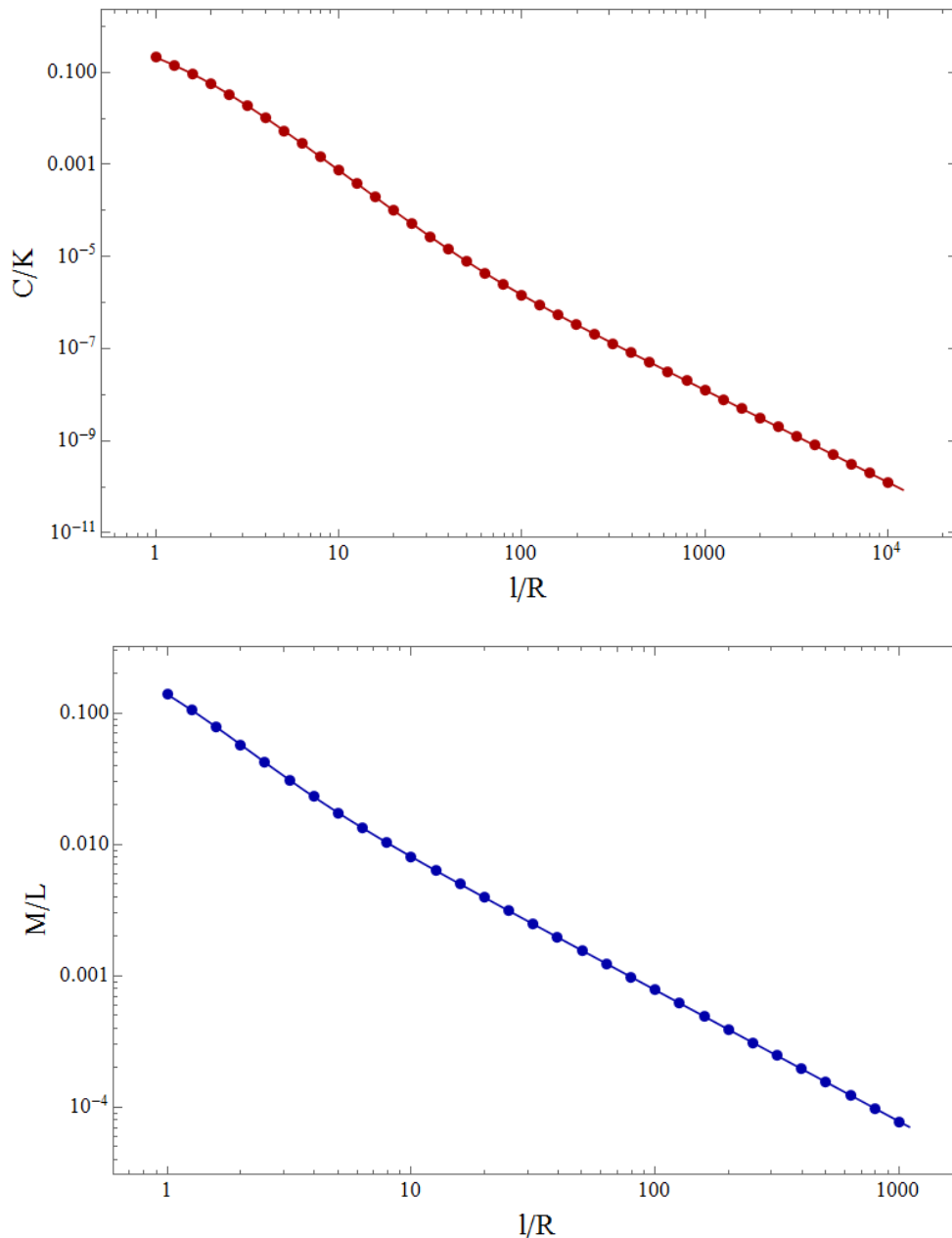


Рисунок 6. Пример аппроксимации зависимости обратной взаимной емкости (вверху) и взаимной индуктивности (внизу) от расстояния обратно-степенным рядом. Точками обозначены абсолютные численные значения, полученные по формулам (26)-(27), кривой – результат обратно-степенной аппроксимации. Расстояния измеряются в радиусах резонатора. Частота, при которой получена аппроксимация $\omega = 2 \times 10^{13} \text{ c}^{-1}$, количество членов $N = 6$.

Параметры A_n и B_n , полученные на каждой итерации, при подставлении в (31) приводят к дисперсионному уравнению в виде (30). Типичным результатом решения такого уравнения, как и в случае с уравнением для цепочки сферических частиц, является набор точек на

комплексной плоскости, представляющих различные решения с комплексными волновыми числами. Отслеживание изменения положения этих точек с изменением частоты позволяет построить дисперсионные кривые.

Сравнивая между собой кривые, полученные при различном количестве аппроксимирующих членов, можно видеть, что при увеличении N наблюдается сходимость дисперсионной картины к некоторому предельному виду. Так, например, при $d=1$ дисперсионная кривая, соответствующая основному решению (обратной волне), почти перестает видоизменяться после достижения количества $N=6$. Процесс сходимости этой дисперсионной кривой показан на рис. 7.

Разумно ожидать, что с ростом N качество аппроксимации будет повышаться, а сами аппроксимирующие обратно-степенные ряд будут приближаться к истинному виду аппроксимируемых функций. Это дает основания считать полученные предельные кривые, к которым сходится дисперсионная картина, истинными дисперсионными кривыми рассматриваемой цепочки. Таким образом, для получения истинных дисперсионных кривых некоторой цепочки нужно построить серию промежуточных кривых, получаемых из решения дисперсионного уравнения (30), увеличивая N до тех пор, пока дисперсионная картина не перестанет меняться вне пределов интересующей нас погрешности.

Таким образом были построены дисперсионные кривые в цепочке кольцевых резонаторов при значениях периода $d=1,2,3$. Данные кривые приведены на рис. 8.

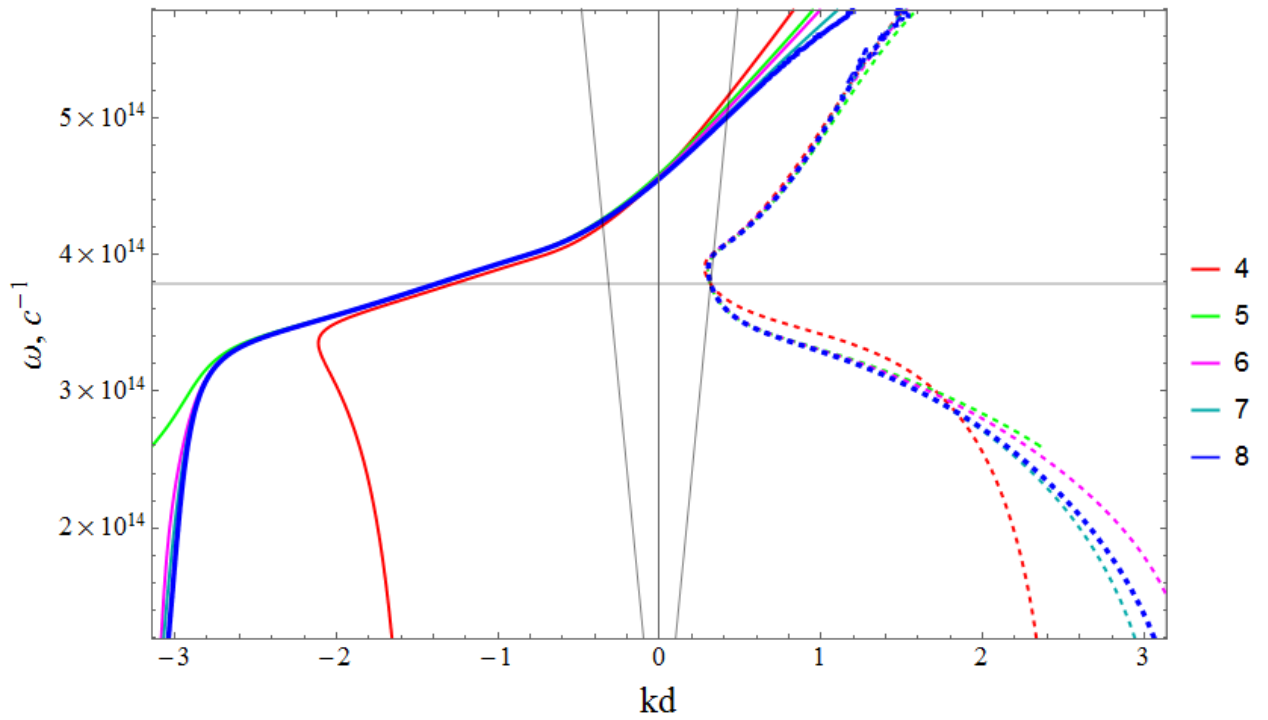


Рисунок 7. Дисперсионные кривые в бесконечной цепочке кольцевых резонаторов, полученные из решения уравнения (30) при различных N (показаны только кривые, соответствующие обратной волне). Резонаторы имеют форму тора радиусом $R = 250$ нм и радиусом сечения $a = 50$ нм, материал резонатора – серебро, данные о частотной зависимости диэлектрической проницаемости взяты из [53]. Сплошными кривыми обозначена действительная часть волнового числа, пунктирными – мнимая. Разными цветами изображены кривые, полученные при различных N . Можно наблюдать сходимость дисперсионной кривой к некоторому предельному состоянию при увеличении N . Предельное состояние (получено при $N = 8$, выделено синим) можно считать истинной дисперсионной кривой обратного плазмона в рассматриваемой цепочке.

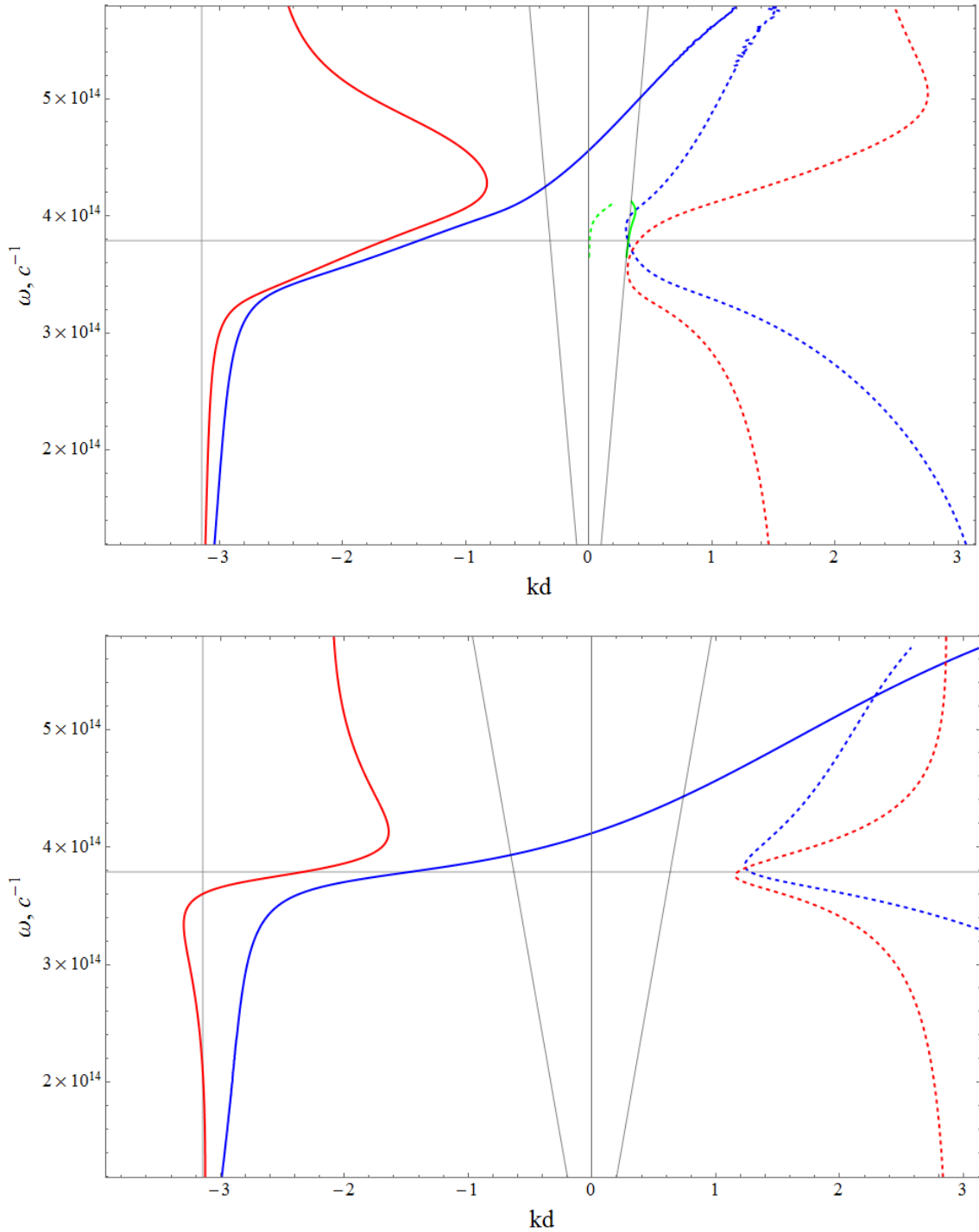


Рисунок 8. Дисперсионные кривые в бесконечной цепочке кольцевых резонаторов при $d = 1$ (вверху) и $d = 2$ (внизу). Синим и красным цветами изображены дисперсионные кривые, соответствующие обратному и прямому плазмону, соответственно. Фиолетовым цветом показана для сравнения дисперсионная кривая, найденная по методу приближения ближайших соседей. Сплошные кривые обозначают действительную часть волнового числа, пунктирные – мнимую. Серым показаны световые линии, частота магнитодипольного резонанса и левая граница зоны Бриллюэна.

Как и в случае с цепочкой сферических наночастиц, в цепочке кольцевых резонаторов существуют плазмоны двух типов: прямой быстрый (распространяющийся почти со скоростью света) и обратный медленный. Также присутствует вклад волны с неэкспоненциальным профилем затухания. Как видно из сравнения рисунков, прямой плазмон перестает существовать в качестве самостоятельного решения при больших значениях периода, сливаясь с неэкспоненциально затухающей волной. Дисперсионные характеристики обратного плазмона, найденные по описанному методу и по методу приближения ближайших соседей, имеют хорошее сходство при $d = 1$ и $\omega < 4 \times 10^{14} \text{ c}^{-1}$. Однако, при больших частотах наблюдается сильное расхождение кривых. Из сравнения рисунков также видно, что сходство между кривыми утрачивается при увеличении периода цепочки.

Для того, чтобы оценить корректность полученных результатов, имеет смысл сопоставить найденные решения с возбуждением, которое возникает в конечной цепочке под действием точечного источника, как это было сделано для цепочки сферических частиц. Аналогично предыдущему случаю, было рассмотрено возбуждение точечным источником конечной цепочки, состоящей из 201 кольцевого резонатора, найденное матричным методом с учетом взаимодействия всех элементов друг с другом [32].

Результаты приведены на рис. 9. Можно видеть превосходное совпадение результатов обоих методов, за исключением участка на конце цепочки, где имеет место интерференция с отраженной волной. Профиль затухания образован одним сильно- и одним слабозатухающим плазмоном, а также волной с неэкспоненциальным профилем затухания. Примечательно, что осцилляции амплитуды, которые возникают на расстоянии 10-20 элементов от источника, обусловлены интерференцией решений различного типа, одновременно возбуждаемых источником. Разделение данных решений (а также выделение вклада с неэкспоненциальным профилем затухания) с использованием других методов было бы затруднено либо вовсе невозможно.

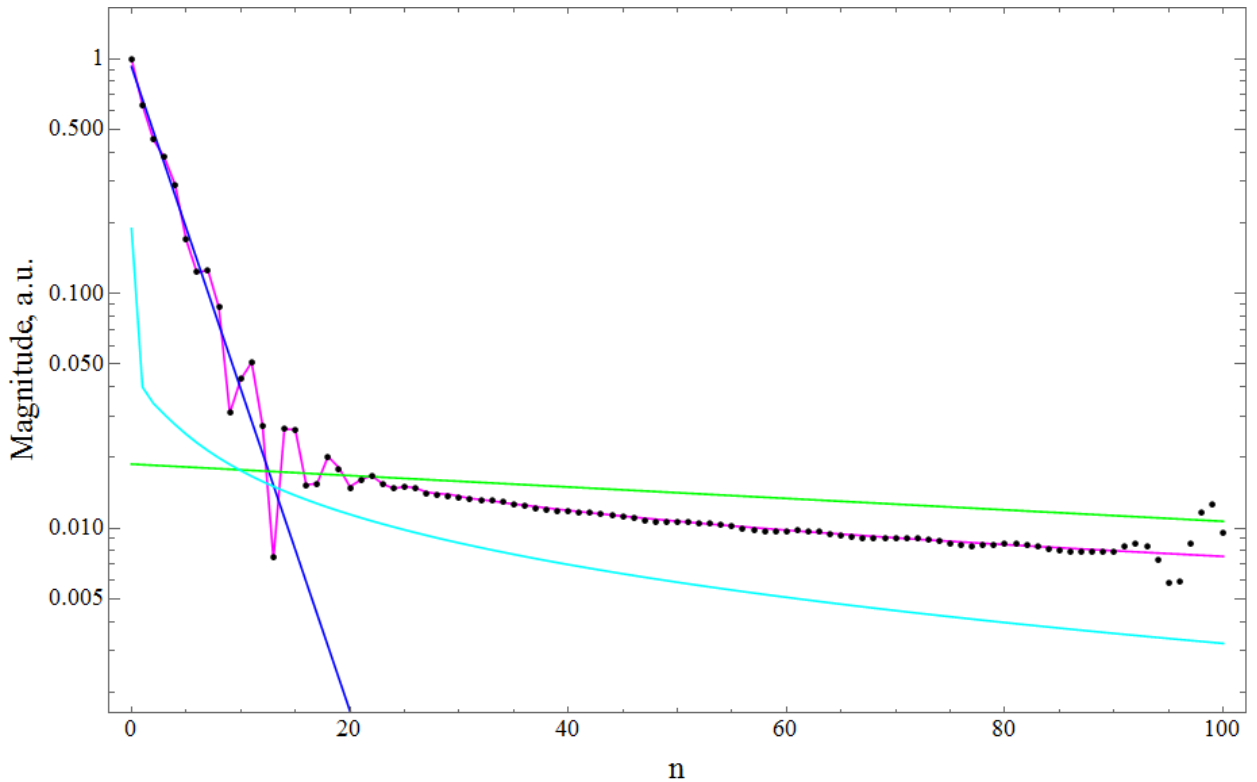


Рисунок 9. Профиль затухания волн, возбуждаемых на собственной частоте ω_0 точечным источником, установленным на нулевой элемент, в конечной и бесконечной цепочке кольцевых резонаторов. Точками показаны амплитуды колебаний в конечной цепочке, найденные по методу [32], фиолетовой линией – в бесконечной цепочке. Синей, зеленой и голубой линиями показаны отдельно вклады сильно- и слабозатухающего плазмонов, а также вклад волны, имеющей неэкспоненциальный профиль затухания.

Стоит отметить, что уравнение (30) в некоторых случаях может иметь другие решения, помимо показанных на рис. 8, 9. Однако, эти решения, как правило, имеют весьма большую мнимую часть и потому не имеют значимого вклада в общее решение. Кроме того, они ведут себя нестабильно при изменении частоты или параметра N и в целом представляются нефизичными. Чтобы прояснить, какой смысл они несут, построим на одном графике профили затухания вкладов, соответствующих данным «побочным» решениям, а также остаток, который остается после вычитания «основных» решений – прямого плазмона, обратного плазмона и неэкспоненциальной

волны – из профиля затухания, возникающего в конечной цепочке (см. рис. 10).

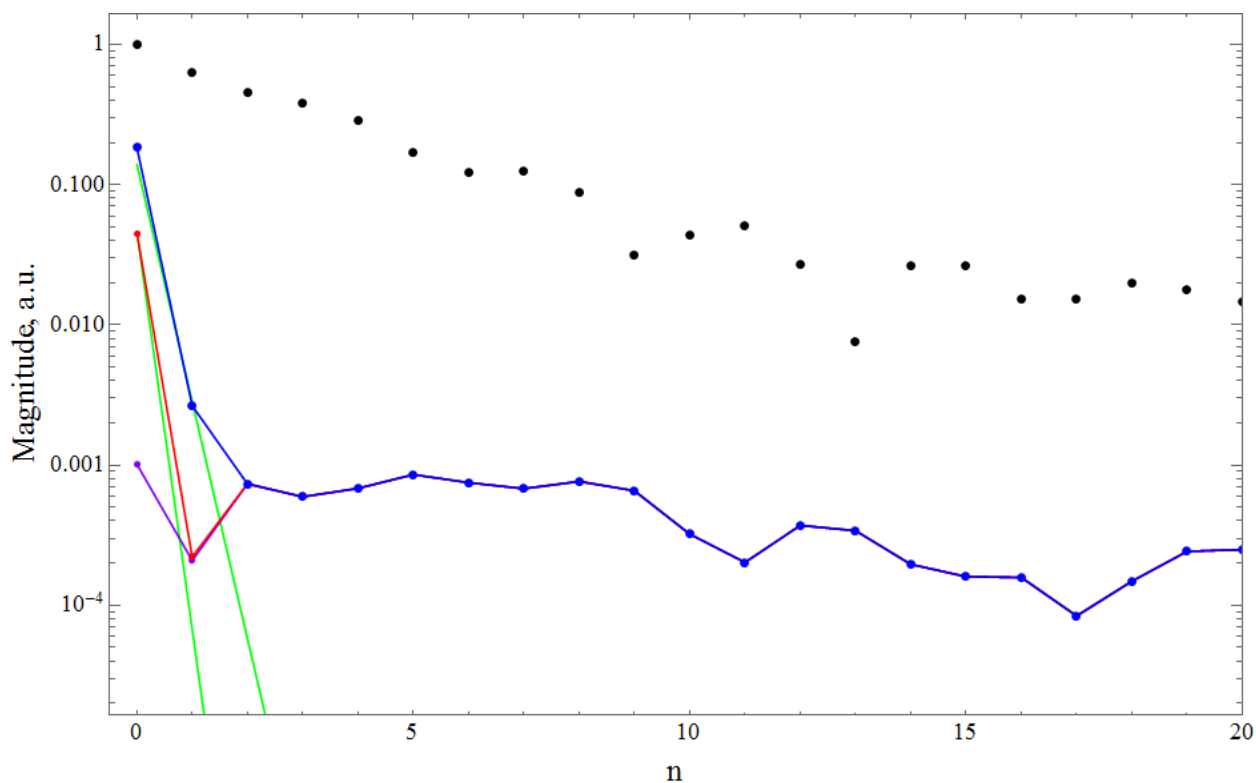


Рисунок 10. Разница между решениями, найденными в конечной и бесконечной цепочке кольцевых резонаторов. Черными точками показаны амплитуды колебаний в конечной цепочке, синим – остаток после вычитания вкладов прямого и обратного плазмонов, а также неэкспоненциальной волны, красным – остаток после вычитания вклада более сильного из «побочных» решений, фиолетовым – остаток после вычитания всех вкладов. Профили затухания «побочных решений» показаны зеленым.

Можно видеть, что на расстоянии от источника, большем трех периодов, погрешность в определении амплитуд колебаний на разных элементах не превышает $\approx 0,1\%$. Однако, на малом расстоянии от источника эта погрешность резко повышается. Если же последовательно ввести поправки на существование двух «побочных» решений, погрешность опускается на тот же уровень $\approx 0,1\%$ и в окрестности источника.

Такая ситуация позволяет трактовать спонтанное возникновение «побочных» решений, как результат неточностей в определении профиля затухания волны как суперпозиции «основных» решений на близком расстоянии от источника. Неточности возникают по причине ошибок в определении амплитуд и волновых числе «основных» решений. В этом случае происходит автоматическая минимизация погрешности с помощью аппроксимации ее экспоненциально затухающими волнами и выделения их в отдельные фиктивные решения. Поскольку неточности в определении профиля затухания возникают преимущественно вблизи источника, данные фиктивные плазмоны обязаны иметь чрезвычайно сильное затухание, то есть чрезвычайно большую мнимую часть.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, было впервые показано, что метод, разработанный для поиска дисперсии в цепочке сферических плазмонных частиц с учетом бесконечного количества взаимодействий, может быть успешно обобщен на случай цепочки плазмонных частиц сложной формы. Обобщенный метод был апробирован на аксиальной цепочке кольцевых нано-резонаторов. Метод позволяет получать дисперсионные зависимости различных волн, одновременно существующих в цепочке при возбуждении внешним источником, различать их, а также строить профили затухания вдоль цепочки каждой из этих волн как по отдельности, так и в суперпозиции. Помимо решений в виде плазмонов было также получено решение в виде волны с неэкспоненциальным профилем затухания, которая доминирует на большом расстоянии от источника. Выделение данной волны в явном виде также является преимуществом описанного метода.

Профили затухания волн, возбуждаемых внешним источником в цепочке кольцевых резонаторов, найденные с помощью полученного метода, превосходно совпадают с предсказаниями матричного подхода для конечных цепочек, что может рассматриваться, как критерий истинности найденных решений. Также было обнаружено, что при реализации данного метода могут возникать дополнительные фиктивные решения, которые, по-видимому, являются продуктом автоматической минимизации погрешностей. Сравнение полученных результатов с результатами, найденными с помощью приближения ближайших соседей показало, что последний имеет ряд ограничений и не всегда способен дать адекватное предсказание дисперсионных характеристик.

Описанный метод является универсальным в том смысле, что он может быть применен к любой цепочке, в которой элементы взаимодействуют попарно и коэффициенты этого взаимодействия могут быть найдены численно – в результате компьютерной симуляции или же из эксперимента.

В частности, это означает, что он может быть обобщен на случай не только плазмонных цепочек, но и, например, фононных, спиновых и других.

Данный метод можно рассматривать как своего рода завершающее звено в ряде различных методов, разработанных для поиска дисперсии в цепочках плазмонных частиц.

Изложенное выше позволяет утверждать, что представленный метод выполняет поставленные перед ним задачи, а цели, поставленные в начале данной работы, можно считать выполненными.

Полученные результаты были опубликованы в следующих работах и докладывались на следующих конференциях:

1. Dorofeenko A.V., Pikalov A.M., Vinogradov A.P., Granovsky A.B. (2016, September). «Non-nearest neighbours interactions in SRR Chains», *Advanced Electromagnetic Materials in Microwaves and Optics (METAMATERIALS)*, 2016 10th International Congress on (pp. 103-105). IEEE.

2. Пикалов А.М., «Построение дисперсионных кривых в цепочках плазмонных частиц сложной формы с учетом дальних взаимодействий на примере цепочки кольцевых резонаторов», конференция «Ломоносов-2017», Москва, Россия, 2017

3. Пикалов А.М., Дорофеев А.В., Виноградов А.П., Грановский А.Б., «Взаимодействие ближайших соседей в цепочках кольцевых резонаторов», тезисы докладов Семнадцатой ежегодной научной конференции ИТПЭ РАН, Москва, Россия, 2016

4. Pikalov A.M., Dorofeenko A.V., et al., «Plasmons in chains of nanoparticles of complex shape», *MISM-2017, Moscow, Russia 2017*

5. Пикалов А.М., Дорофеев А.В., Грановский А.Б., Лозовик Ю.Е., «Плазмоны в цепочках сферических наночастиц с учетом всех парных взаимодействий», *Радиотехника и электроника* (принято к публикации)

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 Maier, S.A.: 'Plasmonics: fundamentals and applications' (Springer Science & Business Media, 2007. 2007)
- 2 McPeak, K.M., Jayanti, S.V., Kress, S.J., Meyer, S., Iotti, S., Rossinelli, A., and Norris, D.J.: 'Plasmonic films can easily be better: rules and recipes', ACS photonics, 2015, 2, (3), pp. 326-333
- 3 Nezhad, M.P., Tetz, K., and Fainman, Y.: 'Gain assisted propagation of surface plasmon polaritons on planar metallic waveguides', Optics Express, 2004, 12, (17), pp. 4072-4079
- 4 Polman, A.: 'Plasmonics applied', Science, 2008, 322, (5903), pp. 868-869
- 5 Bozhevolnyi, S.I., Volkov, V.S., Devaux, E., and Ebbesen, T.W.: 'Channel plasmon-polariton guiding by subwavelength metal grooves', Physical review letters, 2005, 95, (4), pp. 046802
- 6 Smith, C.L., Stenger, N., Kristensen, A., Mortensen, N.A., and Bozhevolnyi, S.I.: 'Gap and channeled plasmons in tapered grooves: a review', Nanoscale, 2015, 7, (21), pp. 9355-9386
- 7 Zeng, B., Pan, L., Liu, L., Fang, L., Wang, C., and Luo, X.: 'Improved near field lithography by surface plasmon resonance in groove-patterned masks', Journal of Optics A: Pure and Applied Optics, 2009, 11, (12), pp. 125003
- 8 Lal, S., Link, S., and Halas, N.J.: 'Nano-optics from sensing to waveguiding', Nature photonics, 2007, 1, (11), pp. 641-648
- 9 Pile, D.F., and Gramotnev, D.K.: 'Channel plasmon-polariton in a triangular groove on a metal surface', Optics Letters, 2004, 29, (10), pp. 1069-1071
- 10 Ditlbacher, H., Hohenau, A., Wagner, D., Kreibig, U., Rogers, M., Hofer, F., Aussenegg, F.R., and Krenn, J.R.: 'Silver nanowires as surface plasmon resonators', Physical review letters, 2005, 95, (25), pp. 257403
- 11 Pitarke, J., Silkin, V., Chulkov, E., and Echenique, P.: 'Theory of surface plasmons and surface-plasmon polaritons', Reports on progress in physics, 2006, 70, (1), pp. 1
- 12 Климов, В.: 'Наноплазмоника', Физматлит, Москва, 2009
- 13 Tolaymat, T.M., El Badawy, A.M., Genaidy, A., Scheckel, K.G., Luxton, T.P., and Suidan, M.: 'An evidence-based environmental perspective of manufactured silver nanoparticle in syntheses and applications: a systematic review and critical appraisal of peer-reviewed scientific papers', Science of the Total Environment, 2010, 408, (5), pp. 999-1006
- 14 Stockman, M.I.: 'Electromagnetic theory of SERS': 'Surface-Enhanced Raman Scattering' (Springer, 2006), pp. 47-65

- 15 Kneipp, K., Wang, Y., Kneipp, H., Perelman, L.T., Itzkan, I., Dasari, R.R., and Feld, M.S.: ‘Single molecule detection using surface-enhanced Raman scattering (SERS)’, *Physical review letters*, 1997, 78, (9), pp. 1667-1670
- 16 Li, K., Stockman, M.I., and Bergman, D.J.: ‘Self-similar chain of metal nanospheres as an efficient nanolens’, *Physical Review Letters*, 2003, 91, (22), pp. 227402
- 17 Coluccio, M.L., Gentile, F., Das, G., Nicastrì, A., Perri, A.M., Candeloro, P., Perozziello, G., Zaccaria, R.P., Gongora, J.S.T., and Alrasheed, S.: ‘Detection of single amino acid mutation in human breast cancer by disordered plasmonic self-similar chain’, *Science advances*, 2015, 1, (8), pp. e1500487
- 18 Stockman, M.I.: ‘Nanofocusing of optical energy in tapered plasmonic waveguides’, *Physical Review Letters*, 2004, 93, (13), pp. 137404
- 19 Noguez, C.: ‘Surface plasmons on metal nanoparticles: the influence of shape and physical environment’, *The Journal of Physical Chemistry C*, 2007, 111, (10), pp. 3806-3819
- 20 Pendry, J.B., Holden, A.J., Robbins, D., and Stewart, W.: ‘Magnetism from conductors and enhanced nonlinear phenomena’, *IEEE Transactions on microwave theory and techniques*, 1999, 47, (11), pp. 2075-2084
- 21 Enkrich, C., Pérez-Willard, F., Gerthsen, D., Zhou, J., Koschny, T., Soukoulis, C.M., Wegener, M., and Linden, S.: ‘Focused-ion-beam nanofabrication of near-infrared magnetic metamaterials’, *Advanced Materials*, 2005, 17, (21), pp. 2547-2549
- 22 Chen, C.-Y., Wu, S.-C., and Yen, T.-J.: ‘Experimental verification of standing-wave plasmonic resonances in split-ring resonators’, *Applied Physics Letters*, 2008, 93, (3), pp. 034110
- 23 Rockstuhl, C., Lederer, F., Etrich, C., Zentgraf, T., Kuhl, J., and Giessen, H.: ‘On the reinterpretation of resonances in split-ring-resonators at normal incidence’, *Optics Express*, 2006, 14, (19), pp. 8827-8836
- 24 Rockstuhl, C., Zentgraf, T., Guo, H., Liu, N., Etrich, C., Loa, I., Syassen, K., Kuhl, J., Lederer, F., and Giessen, H.: ‘Resonances of split-ring resonator metamaterials in the near infrared’, *Applied Physics B: Lasers and Optics*, 2006, 84, (1), pp. 219-227
- 25 Quinten, M., Leitner, A., Krenn, J., and Aussenegg, F.: ‘Electromagnetic energy transport via linear chains of silver nanoparticles’, *Optics Letters*, 1998, 23, (17), pp. 1331-1333
- 26 Koenderink, A.F., and Polman, A.: ‘Complex response and polariton-like dispersion splitting in periodic metal nanoparticle chains’, *Physical Review B*, 2006, 74, (3), pp. 033402

- 27 Weber, W., and Ford, G.: 'Propagation of optical excitations by dipolar interactions in metal nanoparticle chains', *Physical Review B*, 2004, 70, (12), pp. 125429
- 28 Brongersma, M.L., Hartman, J.W., and Atwater, H.A.: 'Electromagnetic energy transfer and switching in nanoparticle chain arrays below the diffraction limit', *Physical Review B*, 2000, 62, (24), pp. R16356
- 29 Liu, H., Li, T., Wang, Q., Zhu, Z., Wang, S., Li, J., Zhu, S., Zhu, Y., and Zhang, X.: 'Extraordinary optical transmission induced by excitation of a magnetic plasmon propagation mode in a diatomic chain of slit-hole resonators', *Physical Review B*, 2009, 79, (2), pp. 024304
- 30 Radkovskaya, A., Sydoruk, O., Tatartschuk, E., Gneiding, N., Stevens, C., Edwards, D., and Shamonina, E.: 'Dimer and polymer metamaterials with alternating electric and magnetic coupling', *Physical Review B*, 2011, 84, (12), pp. 125121
- 31 Radkovskaya, A., Sydoruk, O., Shamonin, M., Shamonina, E., Stevens, C., Faulkner, G., Edwards, D., and Solymar, L.: 'Experimental study of a bi-periodic magnetoinductive waveguide: comparison with theory', *IET microwaves, antennas & propagation*, 2007, 1, (1), pp. 80-83
- 32 Shamonina, E., Kalinin, V., Ringhofer, K., and Solymar, L.: 'Magnetoinductive waves in one, two, and three dimensions', *Journal of Applied Physics*, 2002, 92, (10), pp. 6252-6261
- 33 Wiltshire, M., Shamonina, E., Young, I., and Solymar, L.: 'Dispersion characteristics of magneto-inductive waves: comparison between theory and experiment', *Electronics Letters*, 2003, 39, (2), pp. 215-217
- 34 Maier, S.A., Kik, P.G., and Atwater, H.A.: 'Optical pulse propagation in metal nanoparticle chain waveguides', *Physical Review B*, 2003, 67, (20), pp. 205402
- 35 Lomanets, V., Zhuromskyy, O., Onishchukov, G., Sydoruk, O., Tatartschuk, E., Shamonina, E., Leuchs, G., and Peschel, U.: 'Interacting waves on chains of split-ring resonators in the presence of retardation', *Applied Physics Letters*, 2010, 97, (1), pp. 011108
- 36 Citrin, D.: 'Coherent excitation transport in metal-nanoparticle chains', *Nano Letters*, 2004, 4, (9), pp. 1561-1565
- 37 Fung, K.H., and Chan, C.T.: 'Plasmonic modes in periodic metal nanoparticle chains: a direct dynamic eigenmode analysis', *Optics Letters*, 2007, 32, (8), pp. 973-975
- 38 Citrin, D.: 'Plasmon-polariton transport in metal-nanoparticle chains embedded in a gain medium', *Optics letters*, 2006, 31, (1), pp. 98-100
- 39 Абрамовиц, М.: 'Справочник по специальным функциям' (Наука, 1979. 1979)

- 40 Shamonina, E., Kalinin, V., Ringhofer, K., and Solymar, L.: 'Magneto-inductive waveguide', *Electronics letters*, 2002, 38, (8), pp. 371-373
- 41 Castro, J.C.A., and Beltrán, Á.S.C.: 'Surface plasmon resonance of a few particles linear arrays', *Journal of Electromagnetic Analysis and Applications*, 2011
- 42 Shen, B., Huang, Y., Duan, X., Ren, X., Zhang, X., Wang, Q., and Zhang, D.: 'Energy transportation in a subwavelength waveguide composed of a pair of comb-shape nanorod chains', *Applied optics*, 2012, 51, (26), pp. 6376-6381
- 43 Capolino, F.: 'Theory and phenomena of metamaterials' (CRC press, 2009. 2009)
- 44 Jayanti, S.V., Park, J.H., Dejneka, A., Chvostova, D., McPeak, K.M., Chen, X., Oh, S.-H., and Norris, D.J.: 'Low-temperature enhancement of plasmonic performance in silver films', *Optical Materials Express*, 2015, 5, (5), pp. 1147-1155
- 45 Alu, A., and Engheta, N.: 'Theory of linear chains of metamaterial/plasmonic particles as subdiffraction optical nanotransmission lines', *Physical Review B*, 2006, 74, (20), pp. 205436
- 46 Fung, K.H., Tang, R.C.H., and Chan, C.: 'Analytical properties of the plasmon decay profile in a periodic metal-nanoparticle chain', *Optics letters*, 2011, 36, (12), pp. 2206-2208
- 47 Baena, J.D., Bonache, J., Martin, F., Sillero, R.M., Falcone, F., Lopetegui, T., Laso, M.A., Garcia-Garcia, J., Gil, I., and Portillo, M.F.: 'Equivalent-circuit models for split-ring resonators and complementary split-ring resonators coupled to planar transmission lines', *IEEE transactions on microwave theory and techniques*, 2005, 53, (4), pp. 1451-1461
- 48 Marqués, R., Mesa, F., Martel, J., and Medina, F.: 'Comparative analysis of edge-and broadside-coupled split ring resonators for metamaterial design-theory and experiments', *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 2003, 51, (10), pp. 2572-2581
- 49 Zhang, Y., Hong, W., Yu, C., Kuai, Z.-Q., Don, Y.-D., and Zhou, J.-Y.: 'Planar ultrawideband antennas with multiple notched bands based on etched slots on the patch and/or split ring resonators on the feed line', *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 2008, 56, (9), pp. 3063-3068
- 50 Zhuromskyy, O., Sydoruk, O., Shamonina, E., and Solymar, L.: 'Slow waves on magnetic metamaterials and on chains of plasmonic nanoparticles: Driven solutions in the presence of retardation', *Journal of Applied Physics*, 2009, 106, (10), pp. 104908
- 51 Sydoruk, O., Tatartschuk, E., Shamonina, E., and Solymar, L.: 'Analytical formulation for the resonant frequency of split rings', *Journal of Applied Physics*, 2009, 105, (1), pp. 014903

- 52 Ландау, Л.Д., and Лифшиц, Е.М.: ‘Теоретическая физика. Электродинамика сплошных сред’, 1957
- 53 Johnson, P.B., and Christy, R.-W.: ‘Optical constants of the noble metals’, *Physical Review B*, 1972, 6, (12), pp. 4370
- 54 Tatartschuk, E., Gneiding, N., Hesmer, F., Radkovskaya, A., and Shamonina, E.: ‘Mapping inter-element coupling in metamaterials: Scaling down to infrared’, *Journal of Applied Physics*, 2012, 111, (9), pp. 094904

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Выполнение Фурье-преобразования по формулам (9) и (10), учитывая вид функции g_{mn} , приводит к условной сходимости ряда в формуле (11), что делает такой подход некорректным. Ниже приведен более строгий вывод формулы (16), избегая проблемы условной сходимости.

Итак, рассмотрим функцию

$$\begin{aligned} g_{mn}^* &= g_{mn} e^{-\sigma|m-n|} = \\ &= \frac{1}{d^3} \left(-\frac{1}{|m-n|^3} + \frac{ik_0 d}{|m-n|^2} + \frac{(k_0 d)^2}{|m-n|} \right) \exp(ik_0 d |m-n|) e^{-\sigma|m-n|}, \quad m \neq n \\ g_{mn}^* &= 0, \quad m = n. \end{aligned}$$

Функция g_{mn}^* является функцией трех аргументов: m , n и σ ($\sigma \in \mathbb{R}$).

Далее, повторим все выкладки, начиная с формулы (6), заменив всюду функцию g_{mn} на g_{mn}^* :

$$p_n = \alpha E_n^{ext} + \alpha \sum_{m \neq n} g_{mn}^* p_m. \quad (34)$$

Этот ряд сходится абсолютно при $\sigma > 0$ в силу множителя $e^{-\sigma|m-n|}$.

Преобразование Фурье задается формулами:

$$p(k, \sigma) = (2\pi)^{-1} \sum_n p_n \exp(-iknd),$$

$$e(k, \sigma) = (2\pi)^{-1} \sum_n E_n^{ext} \exp(-iknd),$$

которые полностью повторяют формулы (9) и (10), с тем отличием, что функции спектральной плотности являются функциями не только k , но и σ .

Проанализируем сходимость ряда в выражении для $p(k, \sigma)$:

$$\begin{aligned} p(k, \sigma) &= (2\pi)^{-1} \sum_n \left(\alpha E_n^{ext} + \alpha \sum_m g_{mn}^* p_m \right) \exp(-iknd) = \\ &= (2\pi)^{-1} \alpha \sum_n E_n^{ext} \exp(-iknd) + (2\pi)^{-1} \alpha \sum_{n,m} g_{mn}^* p_m \exp(-iknd). \end{aligned}$$

Ряд в первом слагаемом в этом выражении сходится для любого ограниченного источника¹. Двойной ряд во втором слагаемом сходится абсолютно при $\sigma > 0$, аналогично ряду в формуле (34).

Выполним теперь преобразование Фурье над обеими частями выражения (34):

$$p(k, \sigma) = \alpha e(k, \sigma) + \alpha p(k, \sigma) \sum_{m \neq 0} g_{m0}^* e^{iknd}. \quad (35)$$

Эта формула является аналогом уравнения (11). Ряд в ней сходится абсолютно при $\sigma > 0$ в силу множителя $e^{-\sigma|m-n|}$.

Перепишем уравнение (35) в более удобном виде:

$$p(k, \sigma) = \alpha e(k, \sigma) + (\alpha / d^3) f_0^*(k, \sigma) p(k, \sigma), \quad (36)$$

где

¹ Ограниченным здесь называется источник E_n^{ext} , убывающий с ростом $|n|$ быстрее, чем $1/|n|$.

$$\begin{aligned}
f_0^*(k, \sigma) = & \sum_{m=1}^{+\infty} \left(-\frac{1}{m^3} + \frac{ik_0 d}{m^2} + \frac{(k_0 d)^2}{m} \right) e^{i(k_0+k)md} e^{-\sigma m} + \\
& + \sum_{m=1}^{+\infty} \left(-\frac{1}{m^3} + \frac{ik_0 d}{m^2} + \frac{(k_0 d)^2}{m} \right) e^{i(k_0-k)md} e^{-\sigma m}.
\end{aligned} \tag{37}$$

Функция $f_0^*(k, \sigma)$ является аналогом функции $f_0(k)$ в формулах (13) и (14).

Из формулы (36) выразим спектральную плотность $p(k, \sigma)$ и найдем распределение p_n , аналогично формулам (15) и (16):

$$\begin{aligned}
p(k, \sigma) &= \frac{\alpha e(k, \sigma)}{1 - (\alpha / d^3) f_0^*(k, \sigma)}, \\
p_n &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\alpha e(k, \sigma) \exp(ikn)}{1 - (\alpha / d^3) f_0^*(k, \sigma)} dk.
\end{aligned} \tag{38}$$

Теперь необходимо найти аналитическое продолжение функции $f_0^*(k, \sigma)$. Для этого перейдем к рассмотрению комплексных k : $k = k' + ik''$.

Когда k комплексное, абсолютная сходимость первого и второго рядов в формуле (37) определяется множителями $e^{-(\sigma+k''d)m}$ и $e^{-(\sigma-k''d)m}$ соответственно. Отсюда, первое и второе слагаемые функции $f_0^*(k, \sigma)$ определены при $k'' > -\sigma/d$ и $k'' < \sigma/d$ соответственно. Функция $f_0^*(k, \sigma)$, таким образом, определена при $\sigma > 0$ в полосе $(-\sigma/d, \sigma/d)$. В этой полосе,

но не на ее границах, может быть применено определение полилогарифма

$$\text{Li}_s(x) = \sum_{m=1}^{\infty} x^m / m^s :$$

$$\begin{aligned} f^*(k, \sigma) = & - \left[\text{Li}_3 \left(e^{i(k_0+k)d} e^{-\sigma} \right) + \text{Li}_3 \left(e^{i(k_0-k)d} e^{-\sigma} \right) \right] + \\ & + ik_0 d \left[\text{Li}_2 \left(e^{i(k_0+k)d} e^{-\sigma} \right) + \text{Li}_2 \left(e^{i(k_0-k)d} e^{-\sigma} \right) \right] + \\ & + (k_0 d)^2 \left[\text{Li}_1 \left(e^{i(k_0+k)d} e^{-\sigma} \right) + \text{Li}_1 \left(e^{i(k_0-k)d} e^{-\sigma} \right) \right]. \end{aligned}$$

Как было показано в обсуждении формулы (17), записанная таким образом функция $f^*(k, \sigma)$ является аналитическим продолжением функции $f_0^*(k, \sigma)$ как по k , так и по σ , то есть может быть вычислена при любых комплексных значениях этих переменных. Тогда можно определить $f(k) \equiv f^*(k, 0)$, и, заменяя в формуле (38) функцию $f_0^*(k, \sigma)$ на ее аналитическое продолжение $f^*(k, \sigma)$, а также принимая $\sigma = 0$, получаем формулу для распределения дипольного момента p_n , идентичную (18).

Благодарности

Автор выражает благодарность научному руководителю Дорофеенко А.В. за помощь в написании работы, а также Грановскому А.Б., Радковской А.А. и Виноградову А.П. за обсуждение полученных результатов.