

НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ «ЛЬВІВСЬКА ПОЛІТЕХНІКА»  
МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Кваліфікаційна наукова  
праця на правах рукопису

**ЯРЕМЧУК ІРИНА ЯРОСЛАВІВНА**

УДК 535.3; 535.42; 51-7

ДИСЕРТАЦІЯ  
**ХВИЛЕВОДНИЙ, ПЛАЗМОН-ПОЛЯРИТОННИЙ І ПЛАЗМОННИЙ  
РЕЗОНАНСНІ ЕФЕКТИ В МІКРО- ТА НАНОСТРУКТУРАХ ДЛЯ  
СЕНСОРНОЇ ЕЛЕКТРОНІКИ**

01.04.07 - фізика твердого тіла

Подається на здобуття наукового ступеня доктора технічних наук

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

Науковий консультант

**Бобицький Ярослав Васильович,**  
доктор технічних наук, професор

Львів – 2018

## АНОТАЦІЯ

*Яремчук І.Я.* Хвилеводний, плазмон-поляритонний і плазмонний резонансні ефекти в мікро- та наноструктурах для сенсорної електроніки. На правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора технічних наук за спеціальністю 01.04.07 - фізика твердого тіла. – Національний університет «Львівська Політехніка» Міністерства освіти і науки України, Львів, 2018.

Дисертацію присвячено вивченню та узагальненню фізики резонансних явищ, які виникають в процесі взаємодії електромагнітної хвилі з мікро- та наноструктурами в умовах оптичної дифракції та плазмонного, плазмон-поляритонного і хвилеводного резонансів. Математичне моделювання таких явищ для пошуку параметрів структур з максимальним проявом резонансу електромагнітного поля з наступним експериментальним підтвердженням є підґрунтям для розроблення та виготовлення вибраних приладів сучасної сенсорної електроніки.

В роботі розроблено математичні моделі взаємодії електромагнітної хвилі з композитними мікро- та наноструктурами для розрахунку їх спектральних характеристик та виявлення умов виникнення резонансних ефектів. Вивчено особливості виникнення хвилеводного та плазмон-поляритонного резонансів в призмових та ґраткових структурах, а також проведена оптимізація їх структурних і оптичних характеристик з метою виготовлення дослідних зразків для оптоелектронних систем. Досліджено спектральні характеристики оптичного відгуку металевих наночастинок та їх ансамблів, а також встановлено характер впливу металевих нановключень з урахуванням їх розміру, форми та концентрації на оптичні та електронні властивості нанокомпозитних структур. Шляхом моделювання визначено оптимальні параметри субмікронних структур, як сенсорів, що працюють на основі плазмон-поляритонного резонансу, можуть застосовуватися в спектроскопії комбінаційного розсіяння світла за рахунок виникнення резонансу плазмонів і відповідно значного підсилення поля.

Перший розділ роботи містить огляд літературних джерел за темою дисертації щодо проведення аналізу фізичних аспектів моделювання та створення композитних мікро- та наноструктур для сучасних практичних застосувань. Розглянуто основні напрямки, переваги і досвід застосування резонансних мікро-та наноструктур в задачах аналізу і синтезу оптико-електронних систем; проаналізовано сучасний стан методів дослідження та проблем вдосконалення наявних і створення нових ефективних засобів фотоніки та електроніки, а також можливі напрямки та методи покращення експлуатаційних характеристик твердотільних елементів.

Другий розділ дисертації присвячено математичним моделям дослідження взаємодії електромагнітного випромінювання з мікро- та наноструктурами. Вдосконалено метод зв'язаних хвиль шляхом нового представлення зв'язку між векторами електричних і магнітних полів за допомогою додаткових постійних коефіцієнтів та S-матриць, які пов'язують напруженості полів між сусідніми шарами ґратки, а також завдяки новому представленню функціональної залежності діелектричної проникності матеріалу періодичної структури у вигляді модифікованого комплексного ряду Фур'є. Досліджено точність аналізу оптичної дифракції на прикладі періодичних структур. Представлено розв'язок хвильового рівняння в частотній області чисельними методами. Детально описана математична модель взаємодії лазерного випромінювання з металевими наночастинками та елементами на їх основі.

У третьому розділі виконано дослідження хвилеводно-резонансних характеристик призмових структур, властивостей призмових структур в умовах резонансу поверхневих плазмон-поляритонів, а також зроблено порівняльний аналіз резонансу поверхневих плазмон-поляритонів та хвилеводних мод. Досліджено взаємодію електромагнітного випромінювання з плазмонними структурами в умовах високих температур на прикладі призмового сенсора. Встановлені нові закономірності, що визначають зв'язок між параметрами призмової сенсорної системи та її чутливістю. Показано, що найвища чутливість зміни мінімуму кута відбивання до зміни показника заломлення досліджуваного

середовища можлива в призмовій структурі без хвилеводного шару при реалізації плазмон–поляритонного резонансу. Чутливість зростає при зменшенні показника заломлення матеріалу призми, причому цей висновок стосується обох типів поляризації. Чутливість, яка визначається за зміною коефіцієнта відбивання в залежності від показника заломлення, є вищою для хвиль ТЕ поляризації ніж для ТМ поляризації, і вона зростає при наближенні мінімального кута відбивання до кута повного внутрішнього відбивання.

В четвертому розділі розглянуто умови виникнення хвилеводного, плазмон-поляритонного та плазмонного резонансів в ґраткових мікро- та наноструктурах та фактори, які впливають на їх спектральні характеристики. Розвинуто знання про хвилеводно-резонансні ґраткові структури, яке полягає у тому, що спектр відбивання характеризується високим коефіцієнтом відбивання у вузьких спектральних смугах, причому при нормальному падінні наявний один пік і два піки при падінні променя під кутом. Досліджено спектр пропускання для хвиль ТЕ поляризації багат шарової структури діелектричний шар/металева ґратка/діелектричний шар/підкладка та встановлено наявність єдиного піку пропускання в спектральному діапазоні від 1 до 10 мкм з спектральною шириною 200 нм. Проаналізовано взаємодію оптичного випромінювання з системою періодично розташованих квадратного перерізу золотих та срібних нанодротів на діелектричній підкладці. Встановлено, що спектральне розташування піків поглинання при резонансі локалізованих поверхневих плазмонів масиву періодично розташованих металевих нанодротів близькі до резонансних довжин хвиль металевих наночастинок.

У п'ятому розділі досліджено властивості металевих наночастинок в умовах локалізованого поверхневого плазмонного резонансу. Запропоновано аналітичне представлення діелектричної проникності міді, золота, срібла та алюмінію в широкому спектральному діапазоні, з допомогою яких додатково підтверджено, що зміною товщини оболонки металу на діелектричному чи напівпровідниковому ядрі можна налаштувати спектральне розташування піку поверхневого плазмонного поглинання в інтервалі довжин хвиль видимої і

ближньої інфрачервоної області спектру та оцінено вплив відносної діелектричної проникності навколишнього середовища на оптичні характеристики наночастинок.

В шостому розділі досліджено особливості взаємодії електромагнітного випромінювання з нанокompозитними матеріалами. Показано, що ефективну діелектричну проникність для нанокompозитного матеріалу на основі алмазоподібної вуглецевої плівки з диспергованими у ній наночастинками срібла найкраще описує теорія ефективного середовища Максвелла-Гарнетта. Встановлено визначальний вплив об'ємної концентрації срібла, електромагнітної взаємодії між наночастинками та зміни діелектричної проникності матриці на положення піку плазмонного поглинання. Проведено моделювання оптичних властивостей алмазоподібної вуглецевої плівки з диспергованими у ній наночастинками срібла в залежності від температури відпалу. Показано, що після відпалу нанокompозиту плазмонні піки зміщуються в довгохвильову область і розширюються, крім того, стають яскраво вираженими квадрупольні додаткові піки поглинання. Зміна спектральних параметрів відпалених нанокompозитних плівок пояснюється зміною розміру та форми наночастинок, зміною відносної діелектричної проникності середовища та збільшенням взаємодії між нанокластерами.

Сьомий розділ містить результати моделювання та оптимізації субмікронних структур як оптичних елементів для фотонних систем. Показано можливість просвітлення ґраткою границі прозорий діелектрик – повітря. Оптимізовано геометричні параметри металізованої ґратки та створено на її основі сенсорний елемент. Показано, що положення піку плазмонного резонансу лінійно залежить від довжини хвилі збудження та зміни періоду ґратки, і така структура є більш чутливою до зміни показника заломлення у рідких середовищах, ніж у газових середовищах. Проведено моделювання та оптимізацію прямокутних ґраткових структур на базі полікарбонат/срібло та срібло/срібло з метою отримання максимального підсилення гігантського комбінаційного розсіювання світла (КРС). Показано, що досягнення

максимального підсилення певної довжини хвилі збудження можливе лише за певних комбінацій періоду ґратки, її глибини і коефіцієнта заповнення, які відповідають резонансу локалізованих поверхневих плазмонів в інтерфейсі металу. Встановлено, що повністю металеві періодичні структури є більш придатними для ефективного застосування їх в якості підкладок гігантського КРС, оскільки вони дозволяють досягнути значно більшого підсилення електромагнітного поля у порівнянні з метал-діелектричними періодичними структурами.

**Ключові слова:** хвилеводний резонанс, плазмон-поляритонний резонанс, локалізований плазмонний резонанс, дифракційна ґратка, хвилевод, наночастинки, нанооболонки, нанокompозитні матеріали, сенсори.

Список публікацій здобувача:

*Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:*

1. Fitio, V., Yaremchuk, I., Vernyhor, O., & Bobitski, Y. (2018). Resonance of surface-localized plasmons in a system of periodically arranged gold and silver nanowires on a dielectric substrate. *Applied Nanoscience*, 8(5), 1015–1024. <https://doi.org/10.1007/s13204-018-0686-z>.

2. Yaremchuk, I., Petrovska, H., Fitio, V., & Bobitski, Y. (2017). Optimization and Fabrication of the Gold-Coated GaAs Diffraction Gratings for Surface Plasmon Resonance Sensors. *Optik-International Journal for Light and Electron Optics*, 158 535–540. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2017.12.148>.

3. Meškinis, Š., Peckus, D., Vasiliauskas, A., Čiegis, A., Gudaitis, R., Tamulevičius, T., Yaremchuk I., & Tamulevičius, S. (2017). Photovoltaic Properties and Ultrafast Plasmon Relaxation Dynamics of Diamond-Like Carbon Nanocomposite Films with Embedded Ag Nanoparticles. *Nanoscale Research Letters*, 12(1), 288-1–288-10. <https://doi.org/10.1186/s11671-017-2065-1>.

4. Fitio, V.M., Bendzyak, A.V., Yaremchuk, I.Y., & Bobitski, Y.V. (2017). Wave equation solution for multilayer planar waveguides in a spatial frequency domain. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*, 20(4), 424–429. <https://doi.org/10.15407/spqeo20.04.424>.

5. Yaremchuk, I.Y., Fitio, V.M., & Bobitski, Y.V. (2017). Resonance phenomena in one-dimensional grating-based structures. *Semiconductor Physics Quantum Electronics & Optoelectronics*, 20(1), 85–90. <https://doi.org/10.15407/spqeo20.01.085>.

6. Яремчук І.Я., Петровська Г.А., Фітьо В.М., & Бобицький Я.В. (2017). Детальний аналіз елемента призмового сенсора, що працює на явищі поверхневого плазмонного резонансу. *Вісник Національного університету*

"Львівська політехніка". Серія "Радіоелектроніка та телекомунікації", 885, 97–102. <http://science.lpnu.ua/srt/all-volumes-and-issues>.

7. Петровська Г.А., Яремчук І.Я., Мурвай І.М., Фітьо В.М., & Бобицький Я.В. (2017) Підсилення електромагнітного поля періодичними структурами для застосування у раманівській спектроскопії. *Вісник Національного університету "Львівська політехніка". Серія "Радіоелектроніка та телекомунікації"*, 885, 141–146 <http://science.lpnu.ua/srt/all-volumes-and-issues>.

8. Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Y., Romakh, V.V., & Bobitski, Y.V. (2017). Numerical Solution of One-Dimensional Stationary Schrödinger Equation in the Frequency Domain. *International Conference on Nanotechnology and Nanomaterials* (pp. 3–17). Springer, Cham. [https://doi.org/10.1007/978-3-319-56422-7\\_1](https://doi.org/10.1007/978-3-319-56422-7_1).

9. Meškinis, Š., Yaremchuk, I., Grigaliūnas, V., Vasiliauskas, A., & Čiegis, A. (2016). Plasmonic Properties of Nanostructured Diamond Like Carbon/Silver Nanocomposite Films with Nanohole Arrays. *Materials Science*, 22(4), 467–471. <http://dx.doi.org/10.5755/j01.ms.22.4.13193>.

10. Meškinis, Š., Čiegis, A., Vasiliauskas, A., Šlapikas, K., Gudaitis, R., Yaremchuk, I., Fitio, V., Bobitski, Ya. & Tamulevičius, S. (2016). Annealing effects on structure and optical properties of diamond-like carbon films containing silver. *Nanoscale Research Letters*, 11(1), 146-1–146-9. <https://doi.org/10.1186/s11671-016-1362-4>.

11. Bulavinets, T., Yaremchuk, I., & Bobitski, Y. (2016). Modeling Optical Characteristics of Multilayer Nanoparticles of Different Sizes for Applications in Biomedicine. *Nanophysics, Nanophotonics, Surface Studies, and Applications* (pp. 101–115). Springer, Cham. [https://doi.org/10.1007/978-3-319-30737-4\\_9](https://doi.org/10.1007/978-3-319-30737-4_9).

12. Ivanov, S., Barylyak, A., Besaha, K., Bund, A., Bobitski, Y., Wojnarowska-Nowak, R., Yaremchuk I. & Kus-Liśkiewicz, M. (2016). Synthesis, characterization, and photocatalytic properties of sulfur-and carbon-codoped TiO<sub>2</sub> nanoparticles. *Nanoscale Research Letters*, 11(1), 140-1–140-12. <https://doi.org/10.1186/s11671-016-1353-5>.

13. Yaremchuk, I.Y., Fitio, V.M., & Bobitski, Y.V. (2016). Enhanced optical transmission of the triple-layer resonant waveguide structure. *Semiconductor Physics Quantum Electronics & Optoelectronics*, 19(2), 156–161. doi: 10.15407/spqeo19.02.156.

14. Яремчук, І.Я., Фітьо, В.М., & Бобицький, Я.В. (2016). Моделювання плазмонних властивостей нанокмпозитних матеріалів на основі алмазоподібної вуглецевої плівки та наночастинок срібла. *Вісник Національного університету "Львівська політехніка". Серія "Радіоелектроніка та телекомунікації"*, 849, 292–299. <http://science.lpnu.ua/srt/all-volumes-and-issues>.

15. Yaremchuk, I., Meškinis, Š., Fitio, V., Bobitski, Y., Šlapikas, K., Čiegis, A., Balevičius Z., Selskis A. & Tamulevičius, S. (2015). Spectroellipsometric characterization and modeling of plasmonic diamond-like carbon nanocomposite films with embedded Ag nanoparticles. *Nanoscale Research Letters*, 10(1), 157-1–175-7. <https://doi.org/10.1186/s11671-015-0854-y>.

16. Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Y., Romakh, V.V., & Bobitski, Y.V. (2015). A solution of one-dimensional stationary Schrödinger equation by the Fourier transform.

*ACES*, 30(5), 534–539. Retrieved from <http://www.aces-society.org/search.php?vol=30&no=5&type=2>.

17. Yaremchuk, I., Tamulevičienė, A., Tamulevičius, T., & Tamulevičius, S. (2014). Optical Properties of DLC-Ag Nanocomposite and Grating Structures on their Base. *Applied Mechanics and Materials*, 490, 53–57. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMM.490-491.53>.

18. Yaremchuk, I., Tamulevičienė, A., Tamulevičius, T., Šlapikas, K., Balevičius, Z., & Tamulevičius, S. (2014). Modeling of the plasmonic properties of DLC-Ag nanocomposite films. *Physica Status Solidi (a)*, 211(2), 329–335. <https://doi.org/10.1002/pssa.201330067>.

19. Yaremchuk, I., Tamulevičius, T., Fitio, V., Gražulevičiūtė, I., Bobitski, Y., & Tamulevičius, S. (2013). Guide-mode resonance characteristics of periodic structure on base of diamond-like carbon film. *Optics Communications*, 301, 1-6. <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2013.03.032>.

20. Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Y., & Bobitski, Y.W. (2013). Accuracy of coupled-wave analysis of relief diffraction gratings in optical range. *Telecommunications and Radio Engineering*, 72(8), 661–671. DOI: 10.1615/TelecomRadEng.v72.i8.20.

21. Yaremchuk, I., Tamulevičius, T., Fitio, V., Gražulevičiūtė, I., Bobitski, Y., & Tamulevičius, S. (2013). Numerical implementation of the S-matrix algorithm for modeling of relief diffraction gratings. *Journal of Modern Optics*, 60(20), 1781–1788. <https://doi.org/10.1080/09500340.2013.861032>.

22. Yaremchuk, I.Y., Fitio, V.M., & Bobitski, Y.V. (2011). New design of interference band-pass infrared filter. *Opto-Electronics Review*, 19(2), 193–197. <https://doi.org/10.2478/s11772-011-0008-4>.

23. Fitio, V., Yaremchuk, I., & Bobitski, Y. (2011). Optical excitation of surface plasmon polariton and waveguide modes resonances on prismatic structures. *Optica Applicata*, 41(4), 929–939. [http://direct.dbc.wroc.pl/Content/17198/OA\\_vol41\\_2011\\_4.pdf#page=135](http://direct.dbc.wroc.pl/Content/17198/OA_vol41_2011_4.pdf#page=135)

24. Фітьо, В.М., Яремчук, І.Я., Ромах, В.В., & Бобицький, Я.В. (2010). Резонанс поверхневих плазмонів та хвилеводних мод у призмових структурах. *Вісник Національного університету „Львівська політехніка”*. Електроніка, 681, 160–166. <http://ena.lp.edu.ua/handle/ntb/24074>.

25. Фітьо, В., & Яремчук, І. (2010). Просвітлення ґраткою межі прозорий діелектрик-повітря. *Теоретична електротехніка*, 61, 180–187. [http://elit.lnu.edu.ua/pdf/61\\_23.pdf](http://elit.lnu.edu.ua/pdf/61_23.pdf).

26. Яремчук, І.Я., Фітьо, В.М., & Бобицький, Я.В. (2009). Модель інфрачервоних тонкоплівкових фільтрів на основі інтерференційного дзеркала. *Вісник Національного університету „Львівська політехніка”*. Електроніка, 646, 218–225. [http://vlp.com.ua/files/21\\_36.pdf](http://vlp.com.ua/files/21_36.pdf).

*Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:*

27. Fitio, V., Vernygor, O., Yaremchuk, I., & Bobitski, Y. (2018, February). Analytical approximations of the noble metals dielectric permittivity. *14th*



*International Conference on Advanced Trends in Radioelectronics, Telecommunications and Computer Engineering (TCSET)* (pp. 426–430). IEEE

28. Yaremchuk, I., Petrovska, H., Fitio, V., Bobitski, Y., Sheregii, E., & Wojnarowska-Nowak, R. (2017, May). Sensors element on base of the relief Au-coated GaAs grating. *First Ukraine Conference on Electrical and Computer Engineering (UKRCON)* (pp. 709–712). IEEE.

29. Yaremchuk, I., Petrovska, H., Bobitski, Y., Sheregii, E., & Wojnarowska-Nowak R. (2017, May). Gold-coated polycarbonate grating-based substrates for Raman spectroscopy. *First Ukraine Conference on Electrical and Computer Engineering (UKRCON)* (pp. 717–720). IEEE.

30. Fitio, V., Yaremchuk, I., Bendzyak, A., & Bobitski, Y. (2017, May). Application RCWA for studying plasmon resonance under diffraction by metal gratings. *First Ukraine Conference on Electrical and Computer Engineering (UKRCON)*, (pp. 667–670). IEEE.

31. Fitio, V., Yaremchuk, I., Bendzyak, A., & Bobitski, Y. (2017, April). Modified RCWA method for studying the resonance diffraction phenomena on metal gratings. *37th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO)* (pp. 170-174). IEEE.

32. Yaremchuk, I., Petrovska, H., Karelko, I., Fitio, V., & Bobitski, Y. (2017, April). Optimization of the grating-based structures for the efficient SERS substrates. *37th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO)* (pp. 119–123). IEEE.

33. Yaremchuk, I., Fitio, V., Meškinis, Š., Tamulevičius, S., & Bobitski, Y. (2017, July). Design of Thin Film Nanocomposite Grating Based Sensors. *Nano-Optics: Principles Enabling Basic Research and Applications* (pp. 565–566). Springer, Dordrecht.

34. Petrovska, H.A., Yaremchuk, I.Y., Fitio, V.M., Suriadova, O.D., & Bobitski, Y.V. (2016, September). Optimization metal-coated gratings for sensors applications. *13th International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling (LFNM)* (pp. 30–31). IEEE.

35. Bulavinets, T.O., Yaremchuk, I.Y., Kotsko, A.Y., & Bobitski, Y.V. (2016, September). Modeling absorption and scattering cross sections of the multilayer nanoshells in the near infrared spectrum region. *13th International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling (LFNM)* (pp. 35–37). IEEE.

36. Yaremchuk, I., Fitio, V., & Bobitski, Y. (2016, February). Shape effect of silver nanoparticles on plasmon properties of DLC: Ag nanocomposites. *13th International Conference on Modern Problems of Radio Engineering, Telecommunications and Computer Science (TCSET)*, (pp. 392–394). IEEE.

37. Yaremchuk, I.Y., Mineckiy, P.S., Fitio, V.M., Bobitski, Y.V., & Lesyuk, R.I. (2015, April). Plasmon resonance of the silver nanoparticles with different shape. *35th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO)* (pp. 185–187). IEEE.

38. Yaremchuk, I., Tamuleviciené, A., Tamulevicius, T., Šlapikas, K., Andrulevicius, M., & Tamulevicius, S. (2015, July). Optical Properties Nanocomposite Composed of Ag Nanoparticles Embedded in a DLC Film. *Nano-*

*Structures for Optics and Photonics. Series: NATO Science for Peace and Security Series B: Physics and Biophysics* (pp. 565–566). Springer, Dordrecht

39. Petrovska, H.A., Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Y., & Bobitski, Y.V. (2013, August). Properties of prismatic structures consisting dielectric waveguide. *12th International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling (LFNM)* (pp. 71–73). IEEE.

40. Yaremchuk, I.Y., Fitio, V.M., & Bobitski, Y.V. (2013, August). High transmission of light through metallic grating limited by dielectric layers. *12th International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling (LFNM)* (pp. 74–76). IEEE.

41. Yaremchuk, I., Fitio, V., & Bobitski, Y. (2012, May). Silver nanoparticles under plasmon resonance conditions. *28th International Conference on Microelectronics (MIEL)* (pp. 297–300). IEEE.

42. Kurylo, P., & Yaremchuk, I. (2012, February). Optical properties of silver-silica nanoshells. *International Conference on Modern Problems of Radio Engineering Telecommunications and Computer Science (TCSET)* (pp. 520–520). IEEE.

43. Yaremchuk, I., Fitio, V., & Bobitski, Y. (2012, February). Waveguide-based resonance sensor design. *International Conference on Modern Problems of Radio Engineering Telecommunications and Computer Science (TCSET)* (pp. 508–508). IEEE.

44. Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Y., & Bobitski, Y.V. (2011, September). Optical properties of the Ag and Au nanowires gratings. *11th International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling (LFNM)* (pp. 1–2). IEEE.

45. Yaremchuk I., Fitio V., Andrela V., & Bobitski Ya. (2017, August) Influence of temperature on the surface-plasmon resonance sensor elements. *International research and practice conference: Nanotechnology and nanomaterials (NANO 2017)*, (p. 478). SME Burlaka, Kiev.

46. Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Ya., Vernyhor, O.L., & Bobitski Ya.V. (2017, August) Plasmon resonance in the periodic square nanowires on dielectric substrates. *International research and practice conference: Nanotechnology and nanomaterials (NANO 2017)*, (p. 578). SME Burlaka, Kiev.

47. Yaremchuk, I. (2017, Серпень) Influence Of Temperature On The Sensitivity Surface-Plasmon Resonance Sensor. *IX-а Українсько-польська науково-практична конференція «Електроніка та інформаційні технології», (ЕЛІТ-2017)* (с. 249-250). Видавництво ЛНУ ім. І. Франка, Львів.

48. Bobitski, Ya., Yaremchuk, I., Sheregii, E., & Wojnarowska-Nowak, R. (2016, September) Gold-Coated Gratings for SERS Applications. *7<sup>th</sup> International Conference on Advanced Optoelectronics and Lasers CAOL\*2016* (pp.46-47). Odessa, Ukraine

49. Яремчук, І.Я. (2015, Серпень) Моделювання оптичних характеристик алмазоподібних вуглецевих плівок допованих сріблом. *VII-а Українсько-польська науково-практична конференція «Електроніка та інформаційні технології», (ЕЛІТ -2015)* (с. 208). Видавництво ЛНУ ім. І. Франка, Львів.

50. Barylyak A., Yaremchuk I., Wojnarowska R., Sheregii E., & Bobitski Ya. (2015, June) Characterization and plasmonic effect of Ag-TiO<sub>2</sub>:S nanocomposites.

*Materials of scientific and technical conference “Laser technologies. Laser and their application”*, (pp. 125–127) Truskavets, Ukraine

51. Yaremchuk I., Fitio V., Volos V., & Bobitski Ya. (2015, August) Plasmon effects in DLC-Ag nanocomposite structures. *Proc. 17<sup>th</sup> International Conference School Advanced Materials and Technologies*, (pp. 52) Palanga, Lithuania

52. Yaremchuk, I, Fitio, V., Meškinis, Š., Tamulevičius, S., & Bobitski, Ya. (2015, October). Thin-film nanocomposites grating based sensors. *International meeting Clusters and Nanostructured materials* (p. 138) Uzhhorod, Vodogray, Ukraine

53. Yaremchuk, I., Fitio, V., Velska, K., & Bobitski, Ya. (2014, August) Effective dielectric permittivity of plasmonic nanocomposite materials. *Summer school and International research and practice conference: Nanotechnology and nanomaterials (NANO 2014)* (p. 316) Eurosvit, Lviv.

54. Fitio, V., Yaremchuk, I.Ya., Romakh, V.V., & Bobitski, Ya.V. (2014, August) One-dimensional Stationary Schrödinger Equation with the Fourier Transformation. *International Conference Nanomaterials: Applications and Properties* (pp. 02NAESF07-1 - 02NAESF07-2) Lviv, Ukraine.

55. Yaremchuk, I., Tamulevičienė, A., Tamulevičius, T., Šlapikas, K., Andrulevicius, & M., Tamulevičius, S. (2013, August) Optical absorption properties of the DLC-Ag nanocomposite films. *15<sup>th</sup> International Conference School Advanced Materials and Technologies* (p. 97) Palanga, Lithuania.

56. Yaremchuk, I., Tamulevičienė, A., Tamulevičius, T., Andrulevicius, M., & Tamulevičius, S. (2013, November) Nanocomposite DLC-Ag based periodic structures for sensing applications. *International Conference NanotechItaly 2013* (p. 107). Venice, Italy.

57. Fitio, V., Yaremchuk, I., & Bobitski, Ya. (2012, August) Interaction light with nanowires grating on dielectric substrate. *14<sup>th</sup> International Conference School Advanced Materials and Technologies* (p. 45) Palanga, Lithuania.

58. Yaremchuk, I., Fitio, V., Andrulevicius, M., & Tamulevicius, S. (2012, August) Rigorous Coupled-Wave Analysis of Multilayered Grating Structures. *14<sup>th</sup> International Conference School Advanced Materials and Technologies* (p. 70) Palanga, Lithuania

59. Yaremchuk, I. (2012, October) Guided-mode resonant grating filters. *13<sup>th</sup> International Young Scientists Conference Optics and High Technology Material Science SPO 2012*, (p. 261) Kyiv, Ukraine

60. Фітьо, В., Яремчук, І., & Бобицький, Я. (2011, Вересень). Резонанс плазмонів в ґратках з нанодротоми з срібла та золота. *III Науково-практична конференція «Електроніка та інформаційні технології», (ЕЛІТ-2011)* (с.143) Видавництво ЛНУ ім. І. Франка, Львів

61. Atamanyuk, N.V. Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Y., & Bobitski, Ya.V. (2011, October) Waveguide resonance in a prism structure. *3<sup>th</sup> International Conference «Electronics and applied physics»* (pp. 47–48) Kyiv, Ukraine

62. Yaremchuk, I.Ya., Fitio, V.M., & Bobitski, Ya.V. (2011, October) Metallic nanowires gratings under plasmon resonance condition. *12<sup>th</sup> International Young Scientists Conference Optics and High Technology Material Science SPO 2011* (p. 261) Kyiv, Ukraine.

63. Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Ya., Bobitski, Ya.V. (2010, May) Resonance absorption of energy of waveguide modes in prismatic structure with metallic film and dielectrics layer. *8<sup>th</sup> International conference on Electronic Processes In Organic And Inorganic Materials*, (p. 148) Synyogora, Ukraine.

64. Yaremchuk, I.Ya., Fitio, V.M., Bobitski, Ya.V. (2010, September) Surface Plasmon-polaritons and waveguide modes in prismatic structures. *10<sup>th</sup> International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling LFNM\*2010* (pp. 63-65) Sevastopol, Ukraine.

65. Yaremchuk I. (2010, October) Refractive index sensitivity the prismatic structures. *11<sup>th</sup> International Young Scientists Conference Optics and High Technology Material Science SPO 2010* (p. 103) Kyiv, Ukraine.

## ABSTRACT

Yaremchuk I.Ya. Waveguide, plasmon-polariton and plasmon resonance effects by micro- and nanostructures for the sensor's electronics. - Qualifying scientific work on the rights of manuscript.

Thesis for a scientific degree of a Doctor of Technical Sciences on the specialty 01.04.07 – Solid State Physics. Lviv Polytechnic National University, The Ministry of Education and Science of Ukraine, Lviv 2018.

Thesis is devoted to the study and generalization of the physics of resonance phenomena that arise under interaction of the electromagnetic waves with micro- and nanostructures in conditions of optical diffraction, waveguide plasmon-polariton and plasmon resonances. The mathematical modeling of such phenomena for the search the structures parameters with a maximum manifestation of the resonance of the electromagnetic field with the next experimental confirmation is the basis for the development and manufacturing of various devices of the modern sensor electronics.

In this work mathematical models of interaction of the electromagnetic wave with micro- and nanostructures have been developed for the calculation of their spectral characteristics and the determination optimal conditions of the resonance effects. The features of the waveguide and plasmon-polariton resonances in prism and grating based structures were studied. In order to produce prototype samples for optoelectronic systems the optimization of their structural and optical characteristics was carried out. The spectral characteristics of the metallic nanoparticles and their ensembles have been investigated. The influence of metallic nanoinclusions, taking

into account their size, shape and filling factor, on the optical and electronic properties of the nanocomposite structures have been researched. The optimal parameters of the submicron structures, which can be used as plasmon-polariton resonance sensors and can be used in Raman spectroscopy due to the appearance of the plasmon resonance and correspondingly significant field amplification were determined.

The first chapter of this thesis provides an overview of the literature on the analysis of the physical aspects of modeling and the development of micro- and nanostructures for modern practical applications. The main directions, advantages and experience of using resonant micro- and nanostructures in problems of analysis and synthesis of the optoelectronic systems have been considered. There are shown the current state of research methods and problems of improving existing and creating new effective photonics and electronics elements and possible directions and methods for improving the performance characteristics of solid-state elements.

The second chapter of the thesis is devoted to the mathematical models of the interaction of the electromagnetic waves with micro- and nanostructures. The rigorous method of coupled waves is improved by the new numerical implementation of the S-matrix algorithm to relief diffraction gratings which is based on aggregation between the expression of vectors, containing the expansion coefficients of electric and magnetic fields by additional constant coefficients, and the S-matrix algorithm and also due to the new representation of the functional dependence of the dielectric permittivity of the periodic structure material in the form of a modified Fourier series. The accuracy of optical diffraction analysis on the example of periodic structures have been researched. The solution of the wave equation in frequency domain by numerical methods have been presented. The mathematical model of the interaction of laser radiation with nanoparticles and elements on their basis is described in detail.

In the third chapter, a study of waveguide resonance characteristics of the prism structures, properties of prism structures under conditions of the surface plasmon-polariton resonance, as well as a comparative analysis of the resonance of surface plasmon-polaritons and waveguide modes were performed. The interaction of electromagnetic radiation with plasmon structures in high temperature conditions on

the example of the prism sensor was researched. New relationships determining the connection between the parameters of the prism sensor system and its sensitivity have been established. It is shown that the highest sensitivity of the change of the minimum angle of reflection on the change in the refractive index of researched medium is possible in the prism structure without the waveguide layer under the surface plasmon-polariton resonance. Sensitivity increases with decreasing refractive index of prism material, and this conclusion applies to both types of polarization. The sensitivity determined by changing the reflection coefficient, depending on the refractive index, is higher for TE polarization waves than for TM polarization, and it increases with the approach of the minimum reflection angle to the angle of total internal reflection

In the fourth chapter the conditions of waveguide, plasmon-polariton, and plasmon resonances occurrence in grating micro- and nanostructures, and factors influencing their spectral characteristics have been considered. Knowledge about waveguide resonance grating structure is developed, which consists in the fact that the reflection spectrum is characterized by a high reflection coefficient in narrow spectral bands. It is shown that reflection spectra of such structure have single peak at the normal incidence and two peaks at the oblique incidence. The transmission spectrum of a multilayer structure of type dielectric layer/metal grating/dielectric layer/substrate was investigated for TE polarization was modeled. The single peak of transmission in the spectral range from 1 to 10 microns with a spectral width of 200 nm was founded. The interaction of optical radiation with the system of periodically arranged a square gold and silver nanowires on the dielectric substrate has been analyzed. It is established that the spectral position of the absorption peaks at the resonance of localized surface plasmons of an array of periodically arranged metallic nanowires is close to the resonant wavelengths of the metallic nanoparticles.

In the fifth chapter, the properties of metallic nanoparticles under conditions of localized plasmon resonance have been studied. An analytical representations of dielectric permittivity of the copper, gold, silver and aluminum in a wide spectral range have been propoused. It is additionally confirmed that it is possible to shift the spectral position of the peak of surface plasmon absorption from visible wavelength

range to the near-infrared spectrum by changing the thickness of the metal shell on the dielectric or semiconductor core. Influence of the dielectric permittivity of the surrounding media on the optical character of the nanoparticles have been researched.

In the sixth chapter, the features of the interaction of electromagnetic radiation with nanocomposite materials have been researched. It is shown that effective dielectric permittivity of the nanocomposite material based on a diamond-like carbon film with dispersed silver nanoparticles the best describes by the Maxwell-Garnett effective medium theory. The influence of the volume concentration of the silver, the increase of the electromagnetic interaction between the nanoparticles and the change of the dielectric constant of the matrix on the position of the plasmon absorption peak have been researched. The optical properties of the diamond-like carbon film with dispersed silver nanoparticles, depending on the temperature of annealing, were simulated. It is shown that the plasmon peaks are shifted to the long-wave region, broadened and become pronounced quadrupole additional absorption peaks after the annealing of the nanocomposite. The changes in the spectral parameters of annealed nanocomposite films are due to the change in the size and shape of nanoparticles, the change in the relative permittivity of the medium, and the increase in the interaction between nanoclusters.

The seventh chapter contains the results of simulation and optimization of submicron structures as optical elements for optoelectronics systems. It is shown the possibility use the grating as antireflective coating at the boundary dielectric-air. The geometric parameters of the metallized gratings have been optimized and the sensors element has been created on its basis. It is shown that the position of the peak of the plasmon resonance is linearly dependent on the wavelength of excitation and the change of the grating period, and such structure is more sensitive to the change in the refractive index in liquid media than in gas media. Modeling and optimization of rectangular grating structures based on polycarbonate/silver and silver/silver has been carried out in order to obtain maximum gain of combining signals. It is shown that the achievement of the maximum amplification of a certain excitation wavelength is possible only for given combinations of the grating period, depth and filling factor

corresponding to the resonance of localized surface plasmons on the metal interface. It is established that completely metal periodic structures are more suitable for their effective application as SERS substrates, since using them, it is possible to significantly increase the electromagnetic field in comparison with metal-dielectric periodic structures.

Key words: waveguide resonance, surface plasmon-polariton resonance, localized plasmon resonance, diffraction grating, waveguide, nanoparticles, nanocomposite materials, sensors.

The list of author's publication:

*Papers where basic scientific results of thesis were published:*

1. Fitio, V., Yaremchuk, I., Vernyhor, O., & Bobitski, Y. (2018). Resonance of surface-localized plasmons in a system of periodically arranged gold and silver nanowires on a dielectric substrate. *Applied Nanoscience*, 8(5), 1015–1024. <https://doi.org/10.1007/s13204-018-0686-z>.

2. Yaremchuk, I., Petrovska, H., Fitio, V., & Bobitski, Y. (2017). Optimization and Fabrication of the Gold-Coated GaAs Diffraction Gratings for Surface Plasmon Resonance Sensors. *Optik-International Journal for Light and Electron Optics*, 158 535–540. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2017.12.148>.

3. Meškiniš, Š., Peckus, D., Vasiliauskas, A., Čiegis, A., Gudaitis, R., Tamulevičius, T., Yaremchuk I., & Tamulevičius, S. (2017). Photovoltaic Properties and Ultrafast Plasmon Relaxation Dynamics of Diamond-Like Carbon Nanocomposite Films with Embedded Ag Nanoparticles. *Nanoscale Research Letters*, 12(1), 288-1–288-10. <https://doi.org/10.1186/s11671-017-2065-1>.

4. Fitio, V.M., Bendzyak, A.V., Yaremchuk, I.Y., & Bobitski, Y.V. (2017). Wave equation solution for multilayer planar waveguides in a spatial frequency domain. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*, 20(4), 424–429. <https://doi.org/10.15407/spqeo20.04.424>.

5. Yaremchuk, I.Y., Fitio, V.M., & Bobitski, Y.V. (2017). Resonance phenomena in one-dimensional grating-based structures. *Semiconductor Physics Quantum Electronics & Optoelectronics*, 20(1), 85–90. <https://doi.org/10.15407/spqeo20.01.085>.

6. Яремчук І.Я., Петровська Г.А., Фітьо В.М., & Бобицький Я.В. (2017). Детальний аналіз елемента призмового сенсора, що працює на явищі поверхневого плазмонного резонансу. *Вісник Національного університету "Львівська політехніка". Серія "Радіоелектроніка та телекомунікації"*, 885, 97–102. <http://science.lpnu.ua/srt/all-volumes-and-issues>.

7. Петровська Г.А., Яремчук І.Я., Мурвай І.М., Фітьо В.М., & Бобицький Я.В. (2017) Підсилення електромагнітного поля періодичними



структурами для застосування у раманівській спектроскопії. *Вісник Національного університету "Львівська політехніка". Серія "Радіоелектроніка та телекомунікації"*, 885, 141–146 <http://science.lpnu.ua/srt/all-volumes-and-issues>.

8. Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Y., Romakh, V.V., & Bobitski, Y.V. (2017). Numerical Solution of One-Dimensional Stationary Schrödinger Equation in the Frequency Domain. *International Conference on Nanotechnology and Nanomaterials* (pp. 3–17). Springer, Cham. [https://doi.org/10.1007/978-3-319-56422-7\\_1](https://doi.org/10.1007/978-3-319-56422-7_1).

9. Meškinis, Š., Yaremchuk, I., Grigaliūnas, V., Vasiliauskas, A., & Čiegis, A. (2016). Plasmonic Properties of Nanostructured Diamond Like Carbon/Silver Nanocomposite Films with Nanohole Arrays. *Materials Science*, 22(4), 467–471. <http://dx.doi.org/10.5755/j01.ms.22.4.13193>.

10. Meškinis, Š., Čiegis, A., Vasiliauskas, A., Šlapikas, K., Gudaitis, R., Yaremchuk, I., Fitio, V., Bobitski, Ya. & Tamulevičius, S. (2016). Annealing effects on structure and optical properties of diamond-like carbon films containing silver. *Nanoscale Research Letters*, 11(1), 146-1–146-9. <https://doi.org/10.1186/s11671-016-1362-4>.

11. Bulavinets, T., Yaremchuk, I., & Bobitski, Y. (2016). Modeling Optical Characteristics of Multilayer Nanoparticles of Different Sizes for Applications in Biomedicine. *Nanophysics, Nanophotonics, Surface Studies, and Applications* (pp. 101–115). Springer, Cham. [https://doi.org/10.1007/978-3-319-30737-4\\_9](https://doi.org/10.1007/978-3-319-30737-4_9).

12. Ivanov, S., Barylyak, A., Besaha, K., Bund, A., Bobitski, Y., Wojnarowska-Nowak, R., Yaremchuk I. & Kus-Liškiewicz, M. (2016). Synthesis, characterization, and photocatalytic properties of sulfur-and carbon-codoped TiO<sub>2</sub> nanoparticles. *Nanoscale Research Letters*, 11(1), 140-1–140-12. <https://doi.org/10.1186/s11671-016-1353-5>.

13. Yaremchuk, I.Y., Fitio, V.M., & Bobitski, Y.V. (2016). Enhanced optical transmission of the triple-layer resonant waveguide structure. *Semiconductor Physics Quantum Electronics & Optoelectronics*, 19(2), 156–161. doi: 10.15407/spqeo19.02.156.

14. Яремчук, І.Я., Фітьо, В.М., & Бобицький, Я.В. (2016). Моделювання плазмонних властивостей нанокмпозитних матеріалів на основі алмазоподібної вуглецевої плівки та наночастинок срібла. *Вісник Національного університету "Львівська політехніка". Серія "Радіоелектроніка та телекомунікації"*, 849, 292–299. <http://science.lpnu.ua/srt/all-volumes-and-issues>.

15. Yaremchuk, I., Meškinis, Š., Fitio, V., Bobitski, Y., Šlapikas, K., Čiegis, A., Valevičius Z., Selskis A. & Tamulevičius, S. (2015). Spectroellipsometric characterization and modeling of plasmonic diamond-like carbon nanocomposite films with embedded Ag nanoparticles. *Nanoscale Research Letters*, 10(1), 157-1–175-7. <https://doi.org/10.1186/s11671-015-0854-y>.

16. Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Y., Romakh, V.V., & Bobitski, Y.V. (2015). A solution of one-dimensional stationary Schrödinger equation by the Fourier transform. *ACES*, 30(5), 534–539. Retrieved from <http://www.aces-society.org/search.php?vol=30&no=5&type=2>.

17. Yaremchuk, I., Tamulevičienė, A., Tamulevičius, T., & Tamulevičius, S. (2014). Optical Properties of DLC-Ag Nanocomposite and Grating Structures on their

Base. *Applied Mechanics and Materials*, 490, 53–57. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMM.490-491.53>.

18. Yaremchuk, I., Tamulevičienė, A., Tamulevičius, T., Šlapikas, K., Balevičius, Z., & Tamulevičius, S. (2014). Modeling of the plasmonic properties of DLC-Ag nanocomposite films. *Physica Status Solidi (a)*, 211(2), 329–335. <https://doi.org/10.1002/pssa.201330067>.

19. Yaremchuk, I., Tamulevičius, T., Fitio, V., Gražulevičiūtė, I., Bobitski, Y., & Tamulevičius, S. (2013). Guide-mode resonance characteristics of periodic structure on base of diamond-like carbon film. *Optics Communications*, 301, 1-6. <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2013.03.032>.

20. Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Y., & Bobitski, Y.W. (2013). Accuracy of coupled-wave analysis of relief diffraction gratings in optical range. *Telecommunications and Radio Engineering*, 72(8), 661–671. DOI: 10.1615/TelecomRadEng.v72.i8.20.

21. Yaremchuk, I., Tamulevičius, T., Fitio, V., Gražulevičiūtė, I., Bobitski, Y., & Tamulevičius, S. (2013). Numerical implementation of the S-matrix algorithm for modeling of relief diffraction gratings. *Journal of Modern Optics*, 60(20), 1781–1788. <https://doi.org/10.1080/09500340.2013.861032>.

22. Yaremchuk, I.Y., Fitio, V.M., & Bobitski, Y.V. (2011). New design of interference band-pass infrared filter. *Opto-Electronics Review*, 19(2), 193–197. <https://doi.org/10.2478/s11772-011-0008-4>.

23. Fitio, V., Yaremchuk, I., & Bobitski, Y. (2011). Optical excitation of surface plasmon polariton and waveguide modes resonances on prismatic structures. *Optica Applicata*, 41(4), 929–939. [http://direct.dbc.wroc.pl/Content/17198/OA\\_vol41\\_2011\\_4.pdf#page=135](http://direct.dbc.wroc.pl/Content/17198/OA_vol41_2011_4.pdf#page=135)

24. Фітьо, В.М., Яремчук, І.Я., Ромах, В.В., & Бобицький, Я.В. (2010). Резонанс поверхневих плазмонів та хвилеводних мод у призмових структурах. *Вісник Національного університету „Львівська політехніка”. Електроніка*, 681, 160–166. <http://ena.lp.edu.ua/handle/ntb/24074>.

25. Фітьо, В., & Яремчук, І. (2010). Просвітлення ґраткою межі прозорий діелектрик-повітря. *Теоретична електротехніка*, 61, 180–187. [http://elit.lnu.edu.ua/pdf/61\\_23.pdf](http://elit.lnu.edu.ua/pdf/61_23.pdf).

26. Яремчук, І.Я., Фітьо, В.М., & Бобицький, Я.В. (2009). Модель інфрачервоних тонкоплівкових фільтрів на основі інтерференційного дзеркала. *Вісник Національного університету „Львівська політехніка”. Електроніка*, 646, 218–225. [http://vlp.com.ua/files/21\\_36.pdf](http://vlp.com.ua/files/21_36.pdf).

*Proceedings that certify an improvement of thesis materials:*

27. Fitio, V., Vernygor, O., Yaremchuk, I., & Bobitski, Y. (2018, February). Analytical approximations of the noble metals dielectric permittivity. *14th International Conference on Advanced Trends in Radioelectronics, Telecommunications and Computer Engineering (TCSET)* (pp. 426–430). IEEE

28. Yaremchuk, I., Petrovska, H., Fitio, V., Bobitski, Y., Sheregii, E., & Wojnarowska-Nowak, R. (2017, May). Sensors element on base of the relief Au-

coated GaAs grating. *First Ukraine Conference on Electrical and Computer Engineering (UKRCON)* (pp. 709–712). IEEE.

29. Yaremchuk, I., Petrovska, H., Bobitski, Y., Sheregii, E., & Wojnarowska-Nowak R. (2017, May). Gold-coated polycarbonate grating-based substrates for Raman spectroscopy. *First Ukraine Conference on Electrical and Computer Engineering (UKRCON)* (pp. 717–720). IEEE.

30. Fitio, V., Yaremchuk, I., Bendzyak, A., & Bobitski, Y. (2017, May). Application RCWA for studying plasmon resonance under diffraction by metal gratings. *First Ukraine Conference on Electrical and Computer Engineering (UKRCON)*, (pp. 667–670). IEEE.

31. Fitio, V., Yaremchuk, I., Bendzyak, A., & Bobitski, Y. (2017, April). Modified RCWA method for studying the resonance diffraction phenomena on metal gratings. *37th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO)* (pp. 170–174). IEEE.

32. Yaremchuk, I., Petrovska, H., Karelko, I., Fitio, V., & Bobitski, Y. (2017, April). Optimization of the grating-based structures for the efficient SERS substrates. *37th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO)* (pp. 119–123). IEEE.

33. Yaremchuk, I., Fitio, V., Meškinis, Š., Tamulevičius, S., & Bobitski, Y. (2017, July). Design of Thin Film Nanocomposite Grating Based Sensors. *Nano-Optics: Principles Enabling Basic Research and Applications* (pp. 565–566). Springer, Dordrecht.

34. Petrovska, H.A., Yaremchuk, I.Y., Fitio, V.M., Suriadova, O.D., & Bobitski, Y.V. (2016, September). Optimization metal-coated gratings for sensors applications. *13th International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling (LFNM)* (pp. 30–31). IEEE.

35. Bulavinets, T.O., Yaremchuk, I.Y., Kotsko, A.Y., & Bobitski, Y.V. (2016, September). Modeling absorption and scattering cross sections of the multilayer nanoshells in the near infrared spectrum region. *13th International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling (LFNM)* (pp. 35–37). IEEE.

36. Yaremchuk, I., Fitio, V., & Bobitski, Y. (2016, February). Shape effect of silver nanoparticles on plasmon properties of DLC: Ag nanocomposites. *13th International Conference on Modern Problems of Radio Engineering, Telecommunications and Computer Science (TCSET)*, (pp. 392–394). IEEE.

37. Yaremchuk, I.Y., Mineckiy, P.S., Fitio, V.M., Bobitski, Y.V., & Lesyuk, R.I. (2015, April). Plasmon resonance of the silver nanoparticles with different shape. *35th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO)* (pp. 185–187). IEEE.

38. Yaremchuk, I., Tamulevicienė, A., Tamulevicius, T., Šlapikas, K., Andrulevicius, M., & Tamulevicius, S. (2015, July). Optical Properties Nanocomposite Composed of Ag Nanoparticles Embedded in a DLC Film. *Nano-Structures for Optics and Photonics. Series: NATO Science for Peace and Security Series B: Physics and Biophysics* (pp. 565–566). Springer, Dordrecht

39. Petrovska, H.A., Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Y., & Bobitski, Y.V. (2013, August). Properties of prismatic structures consisting dielectric waveguide. *12th*

*International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling (LFNM)* (pp. 71–73). IEEE.

40. Yaremchuk, I.Y., Fitio, V.M., & Bobitski, Y.V. (2013, August). High transmission of light through metallic grating limited by dielectric layers. *12th International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling (LFNM)* (pp. 74–76). IEEE.

41. Yaremchuk, I., Fitio, V., & Bobitski, Y. (2012, May). Silver nanoparticles under plasmon resonance conditions. *28th International Conference on Microelectronics (MIEL)* (pp. 297–300). IEEE.

42. Kurylo, P., & Yaremchuk, I. (2012, February). Optical properties of silver-silica nanoshells. *International Conference on Modern Problems of Radio Engineering Telecommunications and Computer Science (TCSET)* (pp. 520–520). IEEE.

43. Yaremchuk, I., Fitio, V., & Bobitski, Y. (2012, February). Waveguide-based resonance sensor design. *International Conference on Modern Problems of Radio Engineering Telecommunications and Computer Science (TCSET)* (pp. 508–508). IEEE.

44. Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Y., & Bobitski, Y.V. (2011, September). Optical properties of the Ag and Au nanowires gratings. *11th International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling (LFNM)* (pp. 1–2). IEEE.

45. Yaremchuk I., Fitio V., Andrela V., & Bobitski Ya. (2017, August) Influence of temperature on the surface-plasmon resonance sensor elements. *International research and practice conference: Nanotechnology and nanomaterials (NANO 2017)*, (p. 478). SME Burlaka, Kiev.

46. Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Ya., Vernyhor, O.L., & Bobitski Ya.V. (2017, August) Plasmon resonance in the periodic square nanowires on dielectric substrates. *International research and practice conference: Nanotechnology and nanomaterials (NANO 2017)*, (p. 578). SME Burlaka, Kiev.

47. Yaremchuk, I. (2017, Серпень) Influence Of Temperature On The Sensitivity Surface-Plasmon Resonance Sensor. *IX-а Українсько-польська науково-практична конференція «Електроніка та інформаційні технології», (ЕлІТ-2017)* (с. 249-250). Видавництво ЛНУ ім. І. Франка, Львів.

48. Bobitski, Ya., Yaremchuk, I., Sheregii, E., & Wojnarowska-Nowak, R. (2016, September) Gold-Coated Gratings for SERS Applications. *7<sup>th</sup> International Conference on Advanced Optoelectronics and Lasers CAOL\*2016* (pp.46-47). Odessa, Ukraine

49. Яремчук, І.Я. (2015, Серпень) Моделювання оптичних характеристик алмазоподібних вуглецевих плівок допованих сріблом. *VII-а Українсько-польська науково-практична конференція «Електроніка та інформаційні технології», (ЕлІТ-2015)* (с. 208). Видавництво ЛНУ ім. І. Франка, Львів.

50. Barylyak A., Yaremchuk I., Wojnarowska R., Sheregii E., & Bobitski Ya. (2015, June) Characterization and plasmonic effect of Ag-TiO<sub>2</sub>:S nanocomposites. *Materials of scientific and technical conference “Laser technologies. Laser and their application”*, (pp. 125–127) Truskavets, Ukraine

51. Yaremchuk I., Fitio V., Volos V., & Bobitski Ya. (2015, August) Plasmon effects in DLC-Ag nanocomposite structures. *Proc. 17<sup>th</sup> International Conference School Advanced Materials and Technologies*, (pp. 52) Palanga, Lithuania
52. Yaremchuk, I, Fitio, V., Meškinis, Š., Tamulevičius, S., & Bobitski, Ya. (2015, October). Thin-film nanocomposites grating based sensors. *International meeting Clusters and Nanostructured materials* (p. 138) Uzhhorod, Vodogray, Ukraine
53. Yaremchuk, I., Fitio, V., Velska, K., & Bobitski, Ya. (2014, August) Effective dielectric permittivity of plasmonic nanocomposite materials. *Summer school and International research and practice conference: Nanotechnology and nanomaterials (NANO 2014)* (p. 316) Eurosvit, Lviv.
54. Fitio, V., Yaremchuk, I.Ya., Romakh, V.V., & Bobitski, Ya.V. (2014, August) One-dimensional Stationary Schrödinger Equation with the Fourier Transformation. *International Conference Nanomaterials: Applications and Properties* (pp. 02NAESF07-1 - 02NAESF07-2) Lviv, Ukraine.
55. Yaremchuk, I., Tamulevičienė, A., Tamulevičius, T., Šlapikas, K., Andrulėvicius, & M., Tamulevičius, S. (2013, August) Optical absorption properties of the DLC-Ag nanocomposite films. *15<sup>th</sup> International Conference School Advanced Materials and Technologies* (p. 97) Palanga, Lithuania.
56. Yaremchuk, I., Tamulevičienė, A., Tamulevičius, T., Andrulėvicius, M., & Tamulevičius, S. (2013, November) Nanocomposite DLC-Ag based periodic structures for sensing applications. *International Conference NanotechItaly 2013* (p. 107). Venice, Italy.
57. Fitio, V., Yaremchuk, I., & Bobitski, Ya. (2012, August) Interaction light with nanowires grating on dielectric substrate. *14<sup>th</sup> International Conference School Advanced Materials and Technologies* (p. 45) Palanga, Lithuania.
58. Yaremchuk, I., Fitio, V., Andrulėvicius, M., & Tamulevicius, S. (2012, August) Rigorous Coupled-Wave Analysis of Multilayered Grating Structures. *14<sup>th</sup> International Conference School Advanced Materials and Technologies* (p. 70) Palanga, Lithuania
59. Yaremchuk, I. (2012, October) Guided-mode resonant grating filters. *13<sup>th</sup> International Young Scientists Conference Optics and High Technology Material Science SPO 2012*, (p. 261) Kyiv, Ukraine
60. Фітьо, В., Яремчук, І., & Бобицький, Я. (2011, Вересень). Резонанс плазмонів в ґратках з нанодротоми з срібла та золота. *III Науково-практична конференція «Електроніка та інформаційні технології», (ЕЛІТ-2011)* (с.143) Видавництво ЛНУ ім. І. Франка, Львів
61. Atamanyuk, N.V. Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Y., & Bobitski, Ya.V. (2011, October) Waveguide resonance in a prism structure. *3<sup>th</sup> International Conference «Electronics and applied physics»* (pp. 47–48) Kyiv, Ukraine
62. Yaremchuk, I.Ya., Fitio, V.M., & Bobitski, Ya.V. (2011, October) Metallic nanowires gratings under plasmon resonance condition. *12<sup>th</sup> International Young Scientists Conference Optics and High Technology Material Science SPO 2011* (p. 261) Kyiv, Ukraine.
63. Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Ya., Bobitski, Ya.V. (2010, May) Resonance absorption of energy of waveguide modes in prismatic structure with metallic film and

dielectrics layer. *8<sup>th</sup> International conference on Electronic Processes In Organic And Inorganic Materials*, (p. 148) Synyogora, Ukraine.

64. Yaremchuk, I.Ya., Fitio, V.M., Bobitski, Ya.V. (2010, September) Surface Plasmon-polaritons and waveguide modes in prismatic structures. *10<sup>th</sup> International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling LFNM\*2010* (pp. 63-65) Sevastopol, Ukraine.

65. Yaremchuk I. (2010, October) Refractive index sensitivity the prismatic structures. *11<sup>th</sup> International Young Scientists Conference Optics and High Technology Material Science SPO 2010* (p. 103) Kyiv, Ukraine.

## ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ ТА ПОЗНАЧЕНЬ.....	29
ВСТУП.....	30
РОЗДІЛ 1. Аналіз фізичних аспектів моделювання та створення композитних мікро- та наноструктур для сучасних практичних застосувань.....	42
1.1. Резонансні оптичні ефекти в мікро- та наноструктурах.....	42
1.1.1. Хвилеводний ефект.....	40
1.1.2 Поверхневий плазмон-поляритонний резонанс.....	45
1.1.3. Локалізований поверхневий плазмонний резонанс.....	48
1.2. Огляд основних напрямків, переваг і досвіду застосування резонансних мікро-та наноструктур в задачах аналізу і синтезу оптико-електронних систем.....	51
1.2.1. Призмові структури як елементи сенсорних систем.....	55
1.2.2. Граткові структури та пристрої на їх основі.....	53
1.2.3. Наночастинки та перспективи їх застосування.....	58
1.2.4. Перспективи застосування нанокомпозитних матеріалів в оптико-електронних системах.....	61
1.3. Сучасний стан методів дослідження та проблем вдосконалення наявних і створення нових ефективних елементів електроніки та фотоніки .....	63
1.4. Можливі напрямки та методи покращення експлуатаційних характеристик твердотільних елементів.....	69
1.5. Висновки до першого розділу.....	74
РОЗДІЛ 2. Математичні моделі дослідження взаємодії електромагнітного випромінювання з мікро- та наноструктурами.....	76
2.1. Математична модель взаємодії лазерного випромінювання з періодичними мікро- та наноструктурами.....	76
2.1.1. Представлення діелектричної проникності в структурах з прямокутним рельєфом.....	76
2.1.2. Представлення діелектричної проникності в структурах з синусоїдальним рельєфом.....	82
2.1.3. Алгоритм розрахунку оптичних характеристик періодичних структур.....	82

2.1.4 Порівняння результатів моделювання та експериментальних даних.....	85
2.2. Точність аналізу оптичної дифракції на прикладі періодичних структур.....	89
2.2.1. Точність аналізу оптичної дифракції на металевих ґратках.....	91
2.2.2. Точність аналізу оптичної дифракції на діелектричних ґратках.....	96
2.3. Модифікація асимптотично точного методу зв'язаних хвиль для вивчення резонансних явищ при взаємодії електромагнітного випромінювання з плазмонними мікро- та наноструктурами .....	98
2.3.1. Представлення діелектричної проникності в методі зв'язаних хвиль	99
2.3.2. Дослідження діелектричних структур за допомогою модифікованого методу зв'язаних хвиль.....	103
2.3.3. Дослідження металевих структур за допомогою модифікованого методу зв'язаних хвиль.....	104
2.4. Розв'язок чисельними методами хвильового рівняння в частотній області.....	113
2.4.1. Чисельне моделювання багат шарових хвилеводних структур.....	113
2.4.2. Хвильове рівняння для планарних хвилеводів та одновимірне стаціонарне рівняння Шредингера в частотній області.....	117
2.4.3. Чисельне моделювання одновимірного кристалу.....	121
2.4.4. Чисельне моделювання квантової багат шарової структури.....	124
2.5. Математична модель взаємодії лазерного випромінювання з наночастинками та елементами на їх основі.....	125
2.5.1. Перерізи поглинання та розсіяння випромінювання наночастинками та нанооболонками.....	125
2.5.2. Ефективна діелектрична проникність нанокомпозитних матеріалів.....	128
2.6. Висновки до другого розділу.....	132
РОЗДІЛ 3. Резонансні явища в призмових структурах.....	134
3.1. Взаємодія оптичних хвиль з мікро- та наноструктурами в умовах хвилеводного резонансу.....	134
3.1.1. Введення оптичної хвилі в планарний хвилевід за допомогою призми.....	134



3.1.2. Підсилення та поглинання в умовах хвилеводного резонансу у призмовій структурі.....	135
3.1.3. Хвилевід на призмі як сенсорний елемент.....	141
3.2. Резонанс поверхневих плазмон-поляритонів у призмових структурах...	145
3.2.1 Чисельний аналіз оптичних характеристик призмового сенсора, що працює на явищі поверхневого плазмонного резонансу.....	145
3.2.2. Чутливість призмових плазмонних сенсорів до зміни показника заломлення навколишнього середовища.....	148
3.2.3. Порівняння теоретично розрахованих спектрів відбивання призмової структури з експериментально визначеними.....	150
3.3 Порівняльний аналіз резонансу поверхневих плазмон-поляритонів та хвилеводних мод у призмових структурах.....	152
3.3.1. Особливості кутових залежностей коефіцієнта відбивання у призмових структурах.....	153
3.3.2 Чутливість зміщення мінімуму коефіцієнта відбивання до зміни показника заломлення навколишнього середовища.....	156
3.3.3. Чутливість коефіцієнта відбивання від металевої плівки до зміни показника заломлення навколишнього середовища.....	159
3.4. Взаємодія електромагнітного випромінювання з плазмонними структурами в умовах високих температур на прикладі призмового сенсора.....	162
3.4.1. Математична модель температурної залежності параметрів сенсорного елемента.....	162
3.4.2. Вплив температури на параметри матеріалів сенсора.....	165
3.4.3. Вплив температури на оптичний відгук призмового сенсора.....	167
3.5. Висновки до третього розділу.....	171
РОЗДІЛ 4. Резонансні явища в ґраткових мікро- та наноструктурах.....	173
4.1. Хвилеводний та плазмон-поляритонний резонанси в періодичних мікро- та наноструктурах.....	173
4.2. Хвилеводно-резонансні характеристики періодичних структур на прикладі ґратки з хвилеводним шаром.....	175
4.2.1 Залежність спектральних характеристик ґратки з хвилеводним шаром від геометричних параметрів.....	176

4.2.2	Порівняння результатів чисельного моделювання з експериментальними даними.....	179
4.2.3	Хвилеводна ґратка як сенсорний елемент.....	184
4.3.	Резонансні явища в дифракційних структурах на основі металевих ґраток.....	185
4.3.1.	Спектральні характеристики одновимірних дифракційних ґраток в умовах ТЕ і ТМ поляризацій.....	187
4.3.2	Дослідження особливостей розподілу електромагнітного поля металевими мікроструктурами в умовах ТЕ і ТМ поляризацій.....	194
4.3.3.	Високе оптичне пропускання тришаровою резонансною хвилеводною структурою.....	196
4.4	Резонансні характеристики масиву металевих нанодротів, розміщених на діелектричній підкладці.....	200
4.4.1.	Дифракція на металевих ґратках з параметрами, за яких реалізується резонанс локалізованих плазмонів.....	201
4.4.2.	Резонанс поверхневих локалізованих плазмонів у системі періодично розташованих золотих та срібних нанодротів на діелектричній підкладці.....	204
4.5.	Висновки до четвертого розділу.....	215
РОЗДІЛ 5. Локалізовані поверхневі плазмони в металевих наночастинках.....		217
5.1.	Оптичні властивості благородних металів.....	217
5.1.1.	Аналітичне представлення спектральної залежності діелектричної проникності срібла, золота, міді та алюмінію.....	217
5.1.2.	Діелектрична проникність металевих наночастинок.....	227
5.2.	Спектральні характеристики окремих металевих наночастинок в умовах плазмонного резонансу.....	229
5.2.1.	Локалізований поверхневий плазмонний резонанс сферичних металевих наночастинок.....	229
5.2.2.	Локалізований поверхневий плазмонний резонанс металевих наночастинок різної симетрії.....	231
5.3.	Резонансне поглинання та розсіяння електромагнітного випромінювання багат шаровими наночастинками.....	235

5.3.1. Залежність спектральних характеристик наночастинок типу діелектричне ядро/металева оболонка від розмірів ядра та оболонки.....	236
5.3.2. Чутливість двошарових наночастинок до зміни показника заломлення навколишнього середовища.....	241
5.3.3. Моделювання оптичних характеристик багатошарових наночастинок типу металеве ядро/діелектрична оболонка.....	243
5.4. Висновки до п'ятого розділу.....	246
<b>РОЗДІЛ 6. Особливості взаємодії електромагнітного випромінювання з нанокompозитними матеріалами.....</b>	<b>248</b>
6.1. Оптичні характеристики нанокompозитного матеріалу .....	248
6.1.1. Вплив параметрів матриці на оптичні характеристики нанокompозитного матеріалу.....	249
6.1.2. Залежність діелектричних констант нанокompозиту від розміру та концентрації наночастинок.....	252
6.2. Особливості поглинання плазмонним нанокompозитним матеріалом....	257
6.2.1. Дослідження впливу форми наночастинок та їх взаємної орієнтації у ансамблі наночастинок на оптичний відгук.....	258
6.2.2. Близькопольова взаємодія між наночастинками в нанокompозитних матеріалах.....	261
6.2.3. Порівняння теорій визначення ефективного показника заломлення.....	265
6.3. Моделювання оптичних властивостей нанокompозитного матеріалу в залежності від температури.....	272
6.3.1 Залежність оптичних властивостей нанокompозитного матеріалу від параметрів матриці, розміру та форми нановключень.....	272
6.3.2 Поглинання алмазоподібною вуглецевою плівкою з диспергованими в неї наночастинками срібла за різних температур відпалу.....	277
6.4. Моделювання сенсорних елементів на базі дифракційних нанокompозитних ґраток.....	278
6.4.1. Одновимірні періодичні структури на основі композитного матеріалу.....	279

6.4.2. Двовимірні періодичні структури на основі композитного матеріалу.....	280
6.5. Висновки до шостого розділу.....	282
РОЗДІЛ 7. Моделювання та оптимізація субмікронних структур як оптичних елементів для фотонних систем.....	285
7.1. Просвітлення ґраткою границі прозорий діелектрик–повітря.....	285
7.2. Періодичні мікроструктури для синтезу спеціальних оптичних елементів.....	289
7.2.1 Оптичні сенсори на основі металізованих прямокутних ґраток.....	290
7.2.2. Оптимізація та виготовлення сенсорного елемента на основі рельєфних ґраток.....	295
7.3. Моделювання та оптимізація субмікронних структур для застосування в спектроскопії комбінаційного розсіяння світла.....	303
7.3.1. Оптимізація ґраткових структур для застосування в підкладках для спектроскопії комбінаційного розсіяння світла.....	305
7.3.2. Підсилення електромагнітного поля на періодичних структурах для застосування в спектроскопії комбінаційного розсіяння світла.....	311
7.3.3. Прямокутна полікарбонатна ґратка, покрита шаром золота, як ефективна підкладка для спектроскопії комбінаційного розсіяння світла.....	313
7.4 Прикладні аспекти застосування плазмонних мікро- та наноструктур...	318
7.5. Висновки до сьомого розділу.....	319
ВИСНОВКИ.....	322
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	327
ДОДАТОК А. Акти використання результатів дисертаційної роботи.....	385
ДОДАТОК Б. Список публікацій здобувача за темою дисертації та відомості про апробацію результатів дисертації.....	388

**ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ ТА ПОЗНАЧЕНЬ**

ППП – поверхневий плазмон-поляритон

ПППР – поверхневий плазмон-поляритонний резонанс

ЛППР – локалізований поверхневий плазмонний резонанс

ППР – поверхневий плазмонний резонанс

АТМЗХ – асимптотично точний метод зв'язаних хвиль

НЧ – наночастинка

КРС – комбінаційне розсіяння світла

АВП – алмазоподібна вуглецева плівка

СЕМ – скануюча електронна мікроскопія

$N$  – кількість зв'язаних хвиль

## ВСТУП

**Актуальність теми.** Розвиток сучасних оптико-електронних та фотонних технологій приладобудування неухильно ведуть до необхідності створення, дослідження та використання мікро/нанорозмірних об'єктів, нанокompatитних структур. На резонансних явищах взаємодії електромагнітного випромінювання з такими елементами ґрунтується робота низки сучасних оптоелектронних приладів, а саме різноманітних фільтрів, антен, сенсорів, сонячних елементів та інше. Ефекти резонансу також виступають як потужний енергетичний та інформаційний чинник у новітніх нанофотонних технологіях, а перспектива керування електромагнітним випромінюванням у взаємодії з наноструктурами є одним з пріоритетів сучасної прикладної фізики. Особливу роль вказана проблема відіграє в фізиці твердого тіла, де розглядаються проблеми сумісного використання оптичних та електронних методів оброблення, передавання, зберігання та трансформації енергії. Використання резонансних мікро- та наноструктур дозволяє вийти на новий рівень характеристик оптичних та електронних елементів сенсорних, фотовольтаїчних, фотокаталітичних, біофотонних та інших систем.

Сьогодні рівень технології дозволяє створювати мікро- та наноструктури з керованими оптичними властивостями і характерними розмірами порядку декількох десятків та менше нанометрів. Структури на основі нанокompatитних матеріалів демонструють екстраординарні властивості оптичного відбивання та поглинання за рахунок просторової модифікації нановключень. Особливий інтерес представляють локалізовані плазмони і плазмон-поляритони з точки зору їх можливого застосування для різного роду інтегральних давачів. Фізичним підґрунтям тут є фактори збудження плазмон-поляритонів і резонансна частота локалізованих плазмонів у реальному середовищі, де електромагнітне поле збудженого плазмона перебуває у функціональній залежності з його оточенням.

Застосування таких структур дозволяє керувати характеристиками оптичного випромінювання в наномасштабах. Підвищення ефективності

керування досягається, головним чином, за рахунок мікро/наноstrukturування, а не добором хімічного складу матеріалів. Цілеспрямоване керування параметрами таких систем є неможливим без вивчення фізики резонансних явищ, які виникають в процесі взаємодії електромагнітної хвилі з мікро- та нанооб'єктами та структурами на їх основі. Ключову роль тут відіграють дослідження та розроблення теорії взаємодії лазерного випромінювання з мікро/наноstrukturами і архітектоніка фотонних елементів, що визначає їх оптичні властивості. Однак, на даний час не існує єдиної теорії, що описує відомі резонансні явища в широкому діапазоні спектру для практичного використання в інженерії таких елементів, немає аналітичних співвідношень, які б відображали залежність частоти резонансу від геометрії та інших параметрів структур.

Отже, основна гіпотеза роботи полягає у існуванні просторових конструкцій мікро- та наноstruktur, що містять тонкі плівки, наногратки, мікро/наночастинки та нанокомполітні матеріали, структури, що включають металеві фрагменти, а їх функціональність визначається особливостями структурування матеріалу – архітектонікою, тобто природою металу, розмірами, формою і внутрішньою будовою окремих нановключень. В таких структурах можливі резонансні явища, що призведуть до значного підсилення або керованого перерозподілу електромагнітного поля. Математичне моделювання таких явищ, для пошуку параметрів реальних структур з максимальним проявом резонансу електромагнітного поля з наступним експериментальним підтвердженням стане підґрунтям для розроблення та виготовлення елементів сучасної фотоніки та електроніки.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Дисертація виконана на кафедрі фотоніки Національного університету «Львівська політехніка». Тема дисертації відповідає науковому напрямку кафедри «Дослідження взаємодії фотонних потоків з гетерогенними системами, розроблення лазерних технологій та фотонних систем». Дисертація виконана в межах науково-дослідних робіт: «Резонанс плазмонів та хвилеводних мод в

наноструктурах та їх застосування» ДБ/ПЛАЗМА (№ державної реєстрації 0110U001118), «Мікролазери з розподіленим зворотнім зв'язком при виконанні умов Брегга другого порядку на основі хвилеводних структур» ДБ/Мікролазер (№ державної реєстрації 0113U003190), «Архітектоніка мікро- та наноструктур в умовах оптичної дифракції та плазмонного резонансу для потреб сучасної фотоніки» ДБ/ТЕКТОН (№ державної реєстрації 0115U000427), «Моделювання і експериментальна верифікація плазмонно-резонансних наноструктур для ефективного керування електромагнітним випромінюванням широкого спектрального діапазону» ДБ/МЕВ (№ державної реєстрації 0118U000267), в яких автор дисертації була виконавцем; в міжнародних проектах № М/118-2014 «Розробка і створення сенсорних елементів на базі дифракційних нанокompatитних ґраток», (№ державної реєстрації 0114U005151) та № М/124-2015 «Розробка і створення сенсорних елементів на базі дифракційних нанокompatитних ґраток», (№ державної реєстрації 0115U004876), в яких автор дисертації була відповідальним виконавцем, та науково-дослідної роботи «Резонансні процеси трансформації енергії електронного збудження плазмонними наноструктурами в задачах та пристроях фотоніки» ДБ/Фотоніка (№ державної реєстрації 0117U007176); гранта Президента України для підтримки наукових досліджень молодих учених Ф 36/411-2012 «Нанооптичні фільтри на основі металевих елементів» (№ державної реєстрації 0112U007332); гранта Національного університету «Львівська політехніка» для підтримки наукових досліджень молодих учених № ГЛП-12/5 «Селективні оптичні фільтри на основі металевих елементів», грант Національного університету «Львівська політехніка» (№ державної реєстрації 0112U001202), в яких автор дисертації була науковим керівником.

**Мета і завдання досліджень.** *Метою роботи* є вивчення резонансних явищ, які виникають в процесі взаємодії електромагнітної хвилі з мікро- та наноструктурами в умовах оптичної дифракції та плазмонного, плазмон-поляритонного і хвилеводного резонансів та моделювання і оптимізація оптоелектронних елементів на їх основі.



Для реалізації цієї мети в роботі необхідно було вирішити *такі завдання*:

- аналіз фізичних аспектів моделювання та створення композитних мікро- та наноструктур для сучасних практичних застосувань;

- розроблення математичної моделі взаємодії електромагнітної хвилі з періодичними мікро- та наноструктурами, наночастинками та елементами на їх основі;

- визначення умов виникнення резонансних ефектів в композитних мікро- та наноструктурах;

- вивчення особливостей хвилеводного та плазмон-поляритонного резонансів у призмових структурах з метою створення сенсорних елементів на їх основі;

- дослідження особливостей розподілу електромагнітного поля металевими мікроструктурами в умовах ТЕ і ТМ поляризацій;

- дослідження резонансних характеристик масиву металевих нанодротів, розміщених на діелектричній підкладці;

- дослідження спектральних характеристик оптичного відгуку металевих, наночастинок та їх ансамблів;

- вивчення особливостей взаємодії електромагнітного випромінювання з вибраними нанокompозитними матеріалами;

- встановлення характеру впливу металевих нановключень з врахуванням їх розміру, форми та концентрації на оптичні та електронні властивості нанокompозитних структур;

- моделювання та визначення оптимальних параметрів субмікронних структур, сенсорів, що працюють на основі плазмон-поляритонного резонансу;

- моделювання та визначення оптимальних параметрів субмікронних структур для спектроскопії комбінаційного розсіяння світла за рахунок виникнення резонансу плазмонів і, відповідно, значного підсилення поля.

*Об'єкт дослідження* – взаємодія електромагнітного випромінювання з мікро- та наноструктурами в умовах хвилеводного, плазмон-поляритонного та плазмонного резонансів.

*Предметом дослідження є просторова структура (архітектоніка) і оптичні властивості композитних мікро- та наноструктур, що містять металеві фрагменти, та фізичні моделі, які їх описують.*

*Методи дослідження – моделювання та оптимізація досліджуваних періодичних та багатошарових мікро- та наноструктур проводились за допомогою асимптотично точного методу зв'язаних хвиль, точного матричного методу та методу скінченних елементів. Теорія розсіювання Мі, теорія електропровідності металів Друде, теорії ефективного середовища Максвелла-Гарнетта та метод дипольної еквівалентності були використані для дослідження оптичних характеристик металевих наночастинок та композитних матеріалів. Експериментальні дані одержані з використанням стандартних методик та сучасних методів досліджень.*

**Наукова новизна одержаних результатів.** У дисертації розв'язано низку завдань, які у сукупності вирішили науково-технічну проблему фізики твердого тіла, а саме встановлено роль специфічних резонансних явищ взаємодії електромагнітного випромінювання із твердотільними мікро- та наноструктурами, проведено комплексні дослідження, що включають моделювання таких взаємодій з мікро/наноструктурами та їх експериментальну верифікацію, що стало основою для розроблення та виготовлення окремих елементів сучасної сенсорної електроніки.

Новими є такі наукові результати:

1. Вперше вивчено спектр пропускання для хвиль ТЕ поляризації багатошарової структури діелектричний шар/металева ґратка/діелектричний шар/підкладка та встановлено умови виникнення єдиного піку пропускання в спектральному діапазоні від 1 до 10 мкм зі спектральною шириною 200 нм. Така структура є ефективним широкосмуговим оптичним фільтром в інфрачервоній області спектру. Доведено, що аномально високе пропускання можливе на довжині хвилі, на якій реалізується два резонанси: хвилеводний резонанс у діелектричних шарах та резонанс у діелектричній щілині металевої ґратки.

2. Вперше встановлено, що при резонансі локалізованих поверхневих плазмонів в наноструктурах з масивом періодично розташованих металевих нанодротів спектральне розташування піків поглинання близьке до резонансних довжин хвиль металевих наночастинок. Резонансний пік у випадку срібних нанодротів розщеплюється на декілька піків на відміну від одного піку для золотих нанодротів. Ця відмінність є результатом інтерференції поля падаючої хвилі та розсіяного поля на сусідніх нанодротах за рахунок того, що уявна частина діелектричної проникності срібла суттєво менша за уявну частину діелектричної проникності золота. Встановлено, що тангенціальні складові напруженості поля на срібних нанодротах в декілька разів більші, ніж поля на нанодротах із золота. Такі структури можуть використовуватися як чутливі елементи сенсорів реєстрації зміни показника заломлення навколишнього середовища.

3. Вперше на основі експериментальних даних запропоновано аналітичне представлення діелектричних проникностей металів (золото, срібло, мідь та алюміній) в широкому спектральному діапазоні, за допомогою яких додатково підтверджено, що зміною товщини оболонки металу на діелектричному чи напівпровідниковому ядрі можна налаштувати спектральне розташування піку поверхневого плазмонного поглинання в інтервалі довжин хвиль видимої і ближньої інфрачервоної області спектру. Оцінено вплив відносної діелектричної проникності навколишнього середовища на оптичні резонансні характеристики таких наноструктур.

4. Вперше встановлено, що для моделювання оптичних характеристик нанокompозитного матеріалу на основі алмазоподібної вуглецевої плівки з диспергованими в неї наночастинками срібла серед відомих теорій (теорія Мі, теорія Бруггемана, теорія Максвелла-Гарнетта, та ін. ) найбільш придатною є теорія ефективного середовища Максвелла-Гарнетта, оскільки вона добре узгоджується з експериментальними даними. Встановлено визначальний вплив об'ємної концентрації срібла та діелектричної проникності матриці на спектральне положення піку плазмонного поглинання. Показано, що

температура відпалу такого нанокompозиту призводить до утворення додаткової смуги поглинання за рахунок дипольної та квадрупольної природи колективних плазмонних мод металевих нановключень, що утворилися в результаті термічної модифікації, а двосмуговий плазмонний резонанс може бути використаний також для виготовлення сенсорних елементів.

5. Удосконалено метод зв'язаних хвиль шляхом нового представлення зв'язку між векторами електричних і магнітних полів за допомогою додаткових постійних коефіцієнтів та  $S$ -матриць, які пов'язують напруженості полів між сусідніми шарами ґратки, а також, завдяки новому представленню функціональної залежності діелектричної проникності матеріалу періодичної структури у вигляді модифікованого комплексного ряду Фур'є, що дозволяє в простій математичній формі визначити умови виникнення резонансних ефектів в періодичних мікро-та наноструктурах сучасної оптоелектроніки.

6. Встановлені нові закономірності зв'язку між параметрами оптоелектронної призмової сенсорної системи та її чутливістю в умовах хвилеводного та плазмон-поляритонного резонансів. Показано, що високу чутливість зміни кута мінімального відбивання до зміни показника заломлення навколишнього середовища можна отримати в призмовій структурі без хвилеводного шару при реалізації поверхневого плазмон-поляритонного резонансу. Чутливість зростає при зменшенні показника заломлення матеріалу призми, причому цей висновок стосується обох типів поляризації. Чутливість, яка визначається за зміною кута мінімального відбивання в залежності від показника заломлення, є вищою для хвиль  $TE$  поляризації, ніж для  $TM$  поляризації, і вона зростає при наближенні кута мінімального відбивання до кута повного внутрішнього відбивання.

7. Встановлено оптимальні параметри металізованих ґраток як елементів сенсорів реєстрації зміни показника заломлення та структур для раманівської спектроскопії. Показано, що сенсорні елементи на основі ґраток з арсеніду галію, покритих тонким шаром золота, є більш чутливими до зміни показника заломлення рідкого середовища у порівнянні з газовим середовищем.

Використання полікарбонатних прямокутних ґраток, покритих шаром золота, дозволяє отримати максимальне підсилення сигналів комбінаційного розсіяння світла у  $10^4$  разів.

8. Розвинуто знання про хвилеводно-резонансні ґраткові структури як елементи окремого класу сенсорної електроніки, яке полягає у тому, що спектри відбивання характеризуються високим коефіцієнтом відбивання у вузьких спектральних смугах, причому при нормальному падінні наявний один пік і два піки при падінні променя під кутом. Встановлено особливі закономірності спектральної чутливості: зміщення другого піку в спектрі відбивання менш чутливе до зміни певних структурних параметрів і більш чутливе до зміни показника заломлення навколишнього середовища.

**Практичне значення одержаних результатів** є наступним. Детально представлено математичне формулювання точної системи рівнянь зв'язаних хвиль та алгоритму S-матриці, які адаптовані до простої матричної форми для використання у сучасних мовах програмування чи стандартному математичному програмному забезпеченні, дозволяє легко проводити моделювання спектральних характеристик мікро- та наноструктур та елементів на їх основі, що спрощує апаратний та зменшує часовий ресурси. Запропоноване нове представлення функціональної залежності діелектричної проникності матеріалу періодичної структури в точному методі зв'язаних хвиль приводить до зменшення осциляцій в залежностях коефіцієнтів відбивання та пропускання від кількості використаних зв'язаних хвиль, а також покращується збіжність комп'ютерного розрахунку. Розуміння та вивчення фізики резонансних явищ, таких як збудження резонансу хвилеводних мод в планарному хвилеводі з допомогою призми або ґратки, збудження резонансу плазмонів та плазмон-поляритонів з допомогою ґратки на плоскій поверхні дає можливість запропонувати і створити різноманітні твердотільні елементи сенсорної електроніки на основі мікро- і наноструктур. Найбільш вірогідним є застосування наноґраток, в яких можливий широкосмуговий резонанс локалізованих поверхневих плазмонів при взаємодії з електромагнітним полем.

Тут можливе підсилення поля в декілька сотень разів, що можна ефективно використати в системах підсилення комбінаційного розсіяння світла, які мають важливі застосування в біологічних науках. Зміна параметрів ґратки, навколишнього середовища та геометрії взаємодії оптичної хвилі з ґраткою призводить до порушення резонансу, тим самим до зміни коефіцієнта відбивання від ґратки, коефіцієнта пропускання та поглинання, що є основою для побудови різноманітних сенсорів. Багат шарова структура діелектричний шар/металева ґратка/діелектричний шар/підкладка може бути успішно використана як широкосмуговий оптичний фільтр в інфрачервоній області спектру. Дослідження взаємодії оптичного випромінювання з масивом періодично розміщених металевих нанодротів дає можливість створювати на їх основі плазмонні наномасштабні лазерні джерела; застосовувати їх в задачах фотокаталізу у біотехнологіях та медицині, перетворенні сонячної енергії, а також в галузі сенсорної електроніки.

Значна увага в роботі приділена реалізації та дослідженню нанооб'єктів у вигляді наночастинок, нанооболонки та нанокомпозитних матеріалів, що дає можливість керувати положенням піку поглинання поверхневого плазмона чи плазмон-поляритона у видимій та ближній інфрачервоній області спектру. Слід зазначити, що відпал нанокомпозитного матеріалу спричиняє появу додаткового плазмонного піку і це явище може бути корисним у різних застосуваннях. Зокрема, це може призвести до підсилення комбінаційного розсіяння світла. Двосмуговий плазмонний резонанс може бути використаний також для виготовлення хімічних сенсорів, а звуження ширини плазмонних піків призводить до збільшення роздільної здатності сенсора.

Результати роботи використано у науково-виробничому підприємстві «Електрон-Карат», при виконанні держбюджетних науково-дослідних робіт та у навчально-науковому процесі кафедри фотоніки Національного університету «Львівська політехніка».

**Особистий внесок здобувача.** Основні наукові результати дисертаційної роботи отримано автором самостійно, здійснено вибір наукового напрямку

досліджень, запропоновано мету та завдання роботи, вибрано об'єкт і предмет досліджень, здійснено пошук, аналіз та систематизацію літературних даних щодо основних напрямків, переваг і досвіду застосування резонансних мікро-та наноструктур в задачах аналізу і синтезу оптико-електронних систем. У працях, опублікованих у співавторстві, авторів належать: у роботах [330, 331, 337, 341] – вдосконалення асимптотично точного методу зв'язаних хвиль шляхом нового представлення зв'язку між векторами електричних і магнітних полів за допомогою додаткових постійних коефіцієнтів та  $S$ -матриць; у роботах [347, 348] – моделювання спектральних характеристик ґраткових структур за допомогою модифікованого асимптотично точного методу зв'язаних хвиль; у роботах [359, 367–369] – проведення числового моделювання багатопарових хвилеводних структур; у роботах [381, 382, 386–389, 391, 394] – дослідження хвилеводно-резонансних характеристик та резонансу поверхневих плазмон-поляритонів у призмових структурах; у роботах [397, 398] – дослідження впливу температури на оптичний відгук призмового сенсора; у роботі [406] – моделювання спектральних характеристик хвилеводної ґратки як сенсорного елемента; у роботах [355, 413 – 416, 418] – дослідження аномально високого пропускання ґратковими структурами; у роботах [417 – 420] – моделювання спектральних характеристик металевих нанодротів, періодично розміщених на діелектричній підкладці; у роботах [436, 437, 439, 441, 442, 446 – 448] – моделювання спектральних характеристик металевих наночастинок та нанооболонок; у роботах [452, 454, 455, 457 – 463, 470, 475] – моделювання ефективної діелектричної проникності нанокомпозитних матеріалів та їх спектральних характеристик в залежності від розміру, форми та концентрації нановключень; у роботах [476, 479] – моделювання одновимірних та двовимірних періодичних структур на основі нанокомпозитного матеріалу; у роботі [483] – моделювання спектрів відбивання прямокутних ґраток; у роботах [488, 490, 492] – оптимізація геометричних параметрів сенсорних елементів на основі металізованих ґраток; у роботах [496–498] – моделювання спектральних характеристик ґраткових структур.

**Апробація результатів дисертації.** Основні результати дисертаційної роботи доповідалися й обговорювалися на вітчизняних і міжнародних наукових конференціях, семінарах та школах, з них особисто здобувачкою у формі усних та стендових доповідей: NATO International School of Atomic and Molecular Spectroscopy, Course “Bio-photonics Spectroscopy, Imaging, Sensing and Manipulation” (Erice, Sicily, Italy: 2-17.07.2009), 14<sup>th</sup> International Conference School Advanced Materials and Technologies (Palanga, Lithuania: 27-31.08.2012), Summer School 2012 on Nano-Photonic (Bad Herrenalb, Germany: 10-13.09.2012), International Conference EMRS (Strasbourg, France:27-31.05.2013), NATO International School of Atomic and Molecular Spectroscopy, Course “Nano-structures for optics and photonics”(Erice, Sicily, Italy: 4-19.07.2013), 15<sup>th</sup> International Conference-school “Advanced Materials and Technologies” (Palanga, Lithuania: 27-31.08.2013), International Conference NanotechItaly’2013 (Venice, Italy: 27-29.11.2013), 4th International Conference on Nanotechnology and Biosensors(ICNB 2013) (Paris, France: 19-22.12. 2013), Conference organized by Research Council of Lithuania under the project “Postdoctoral Fellowship implementation in Lithuania” (Vilnius, Lithuania: 26-28.02.2014), International Conference “Nanotechnology and Nanomaterials –2014” NANO-2014 (Lviv, Ukraine: 27-30.08.2014), NATO International School of Atomic and Molecular Spectroscopy, Course “Nano–optics: principles enabling basic research and applications”(Erice, Sicily, Italy: 4-19.07.2015), International Conference “Nanotechnology and Nanomaterials –2015” NANO-2015 (Lviv, Ukraine: 26-29.08.2015), XII<sup>th</sup> International Conference “Modern Problems of Radio Engineering, Telecommunications, and Computer Science” (TCSET’2016)(Lviv-Slavsko, Ukraine: 23 – 27.02.2016), 13<sup>th</sup> International Conference on Laser and Fiber Optical Networks Modeling LFNМ\*2016 (Odessa, Ukraine: 13–15.08.2016), 7<sup>th</sup> International Conference on Advanced Optoelectronics and Lasers CAOL\*2016 (Odessa, Ukraine: 12–15.08.2016), International research and practice conference: Nanotechnology and nanomaterials (NANO 2016 (Lviv, Ukraine: 24-27.08.2016), IEEE 37th International Conference on Electronics and Nanotechnology ELNANO-2017 (Kyiv, Ukraine: 18-20.04.2017), IEEE First Ukraine Conference on Electrical



and Computer Engineering (UKRCON), (Kyiv, Ukraine: 29.05-02.04.2017), International research and practice conference: Nanotechnology and nanomaterials NANO 2017 (Chernivtsi, Ukraine: 23-26.08. 2017), IX-а Українсько-польська науково-практична конференція «Електроніка та інформаційні технології», ЕЛІТ-2017 (Львів-Чинадієво:28–31.08.2017), 14<sup>th</sup> International Conference on Advanced Trends in Radioelectronics, Telecommunications and Computer Engineering (TCSET'2018)(Lviv-Slavsko, Ukraine: 20- 24.02.2018)

**Публікації.** Основні результати дисертації викладені в 65 наукових працях, зокрема у 9 статтях у наукових фахових виданнях України, у 15 статтях у наукових періодичних виданнях інших держав із напрямку, з якого підготовлена дисертація, включених до міжнародних наукометричних баз Scopus та Web of Science, 2 розділах у книгах та збірках наукових праць, виданих за кордоном, які включено в наукометричні бази Scopus та Web of Science, 18 статтях в матеріалах конференцій, які індексовані у наукометричних базах Scopus та Web of Science, 21 праці, що опубліковані в збірниках тез доповідей міжнародних та всеукраїнських конференцій.

**Структура та обсяг дисертації.** Дисертація складається зі вступу, семи розділів, висновків, списку використаних джерел літератури (499 найменувань) та 2 додатків; містить 159 рисунків та 10 таблиць. Робота викладена на 297 сторінках основного тексту. Обсяг, що займають анотація, зміст, список використаних джерел літератури і додатки – 99 сторінок.

## **РОЗДІЛ 1. АНАЛІЗ ФІЗИЧНИХ АСПЕКТІВ МОДЕЛЮВАННЯ ТА СТВОРЕННЯ КОМПОЗИТНИХ МІКРО- ТА НАНОСТРУКТУР ДЛЯ СУЧАСНИХ ПРАКТИЧНИХ ЗАСТОСУВАНЬ**

### **1.1. Резонансні оптичні ефекти в мікро- та наноструктурах**

Резонансне підсилення оптичних ефектів у мікро- та наноструктурах різної розмірності викликане різними фізичними механізмами. Резонансні оптичні ефекти в періодичних та призмових структурах виникають завдяки резонансним збудженням поверхневих плазмон-поляритонів чи хвилеводних мод. Резонансне збудження відбувається за умови фазового синхронізму між тангенціальною складовою падаючої електромагнітної хвилі і хвильовим вектором поверхневого плазмон-поляритона. Ці умови виражаються в резонансних особливостях залежності коефіцієнта відбивання таких структур від кута падіння променя чи довжини хвилі. У разі металевих наночастинок (НЧ) підсилення оптичних ефектів обумовлено збудженням локальних плазмонів. Оптична частота резонансу визначається розмірами частинок, матеріалом частинок і їх оточенням. Плазмонний резонанс вкрай чутливий до найближчого оточення частинок і може застосовуватися, зокрема, в різних хімічних сенсорах для детектування ультрамалих концентрацій речовин.

#### **1.1.1. Хвилеводний ефект**

Навіть незважаючи на те, що принципи дифракції були відомі ще з часів Ньютона, вперше несподівані коливання інтенсивності світла, відбитого металевією ґраткою у відповідь на невеликі зміни кута падіння та довжини хвилі, у 1902 році помітив Вуд [1]. У своїх експериментах він зазначив, що при освітленні ґратки лампою розжарювання, перпендикулярно ґратковим канавкам, дифрагований спектр демонстрував швидке збільшення інтенсивності і ці аномальні ефекти стали називатися аномаліями Вуда, оскільки їх не можна пояснити звичайною теорією дифракції. У своїй спробі пролити світло на ці аномалії Релей теоретично проаналізував структуру ґратки і зауважив, що

аномалії Вуда відповідають довжинам хвиль, при яких з'являються нові порядки дифракції за падіння хвилі під кутом (тобто поширюються вздовж поверхні), що призводить до швидкого перерозподілу повної потужності в різних дифракційних порядках [2]. Релей використав ідеально провідний з високим відбиванням матеріал ґратки, але Фано в роботі [3], припускаючи, що матеріал ґратки характеризується втратами, виявив два типи аномалій: тип Релея, що характеризується "краєм" в інтенсивності і другий тип "дифузний", який характеризується мінімумом і максимумом інтенсивності [4]. Пізніше у роботі [5] було застосовано новий теоретичний підхід до пояснення аномалій Вуда на основі хвилеводних мод, а не в наближенні розсіювання, яке використовувалося до цього часу, і показано, що другий тип аномалії був резонансним явищем внаслідок "хвилеводних складних хвиль, що підтримуються ґраткою", тобто витікаючі хвилі зі складними хвильовими числами.

У роботах [6,7] представлено два теоретичні дослідження дифрагованого світла неметалевими ґратковими структурами, що складаються з діелектричного хвилевода, покритого гофрованим фоторезистом. Показано, що ці структури виявляють резонансну реакцію щодо кута падіння як при поляризації падаючого світла перпендикулярно, так і паралельно до канавок ґратки, і автори пояснювали цю поведінку існуванням оптичних мод у хвилеводі. Збудження хвилеводних хвиль у гофрованому хвилеводі може привести до значного збільшення відбивання структури у вузькій області довжин хвиль [8], причому, повне відбивання або пропускання світла можуть бути отримані на різних частотах для діелектричної періодичної структури плити, що складається з повторюваних матеріалів з різними показниками заломлення [9] та для діелектричних [10] та металевих [11] ґраткових структур. Ванг і Магнуссон опублікували декілька робіт з дифракційної ефективності субмікронних планарних повністю діелектричних ґраткових хвилеводів. Вони продемонстрували, що 100% -ний обмін оптичної енергії між пройденими та відбитими дифракційними порядками може бути досягнутий в межах вузьких діапазонів довжин хвиль або інтервалів кута падіння через взаємодію зовнішніх

поширюваних дифрагованих хвиль з випромінювальними модами хвилеводу [12-18]. Термін "хвилеводний резонанс (guided-mode resonance – GMR)" був запропонований у 1990 році і вперше з'явився в роботі [13]. Клас пристроїв, що базуються на цьому принципі можна розглядати як такі, що працюють у режимах концентрації, зберігання та передавання світла. Ефект хвилеводного резонансу поєднує в собі теорії дифракційної ґратки, планарного хвилеводу, тонкоплівкової оптики та теорію ефективних середовищ для отримання заданих спектральних властивостей. У роботі [19] опубліковано як теоретичні, так і експериментальні дослідження, які продемонстрували, що резонансне відбивання не є винятковим для одновимірних хвилеводних ґраток, але є також особливістю двовимірних структур. Показано, що в двовимірній діелектричній хвилеводній ґратці виникають два резонансні піки в спектрі відбивання при нормальному падінні променя, коли в при такому ж падінні викає один пік у випадку одновимірних структур.

Отже, узагальнюючи, можемо сказати, що після роботи Вуда [1] з'явилась нова галузь досліджень у фізиці, яка в кінцевому підсумку дала поштовх дослідженню резонансних хвилеводних структур, здатних виявляти високоефективне резонансне відбивання у вузьких спектрах довжин хвиль. Через довгу історію, в якій багато незалежних груп та окремих осіб сприяли їх розумінню, такі резонансні хвилеводні структури стали відомі кількома різними типами приладів, такими як хвилеводно-резонансні фільтри, фотонні кристали або фотоннокристалічні резонансні відбивачі. Це частково залежить від того, яким методом вони описані та зрозумілі, наприклад, асимптотично точним аналізом зв'язаних хвиль або теорією фотонного кристала. Та незважаючи на те, що хвилеводні структури стабільно досліджувалися протягом останніх років, багато питань залишаються відкритими, для прикладу, підвищення інтенсивності відбивання фільтрів на основі хвилеводних структур, які характеризуються двома резонансними піками відбивання. Цей тип оптичних фільтрів є важливим у вивченні спектральних параметрів, що мають потенційне застосування в галузі біології.

### 1.1.2 Поверхневий плазмон-поляритонний резонанс

Практично в один час з роботою Вуда [1], що стосувалася дослідження спектрів відбивання дифракційних ґраток, були опубліковані роботи Зоммерфельда [20] та Зеннека [21], в яких продемонстровано поширення хвилеводних електромагнітних хвиль уздовж поверхні провідників з обмеженою провідністю, але лише через декілька десятків років вони були між собою пов'язані в роботі Фано [3]. Він припустив, що аномалії Вуда є результатами еванесцентних електромагнітних хвиль, збуджених на поверхні дифракційної ґратки. Плазмонні втрати в тонких металевих плівках, значно збільшені по відношенню до втрат у товстих металевих плівках, були пояснені Річі [22] як наслідок збудження поверхневих хвиль. Тюрбадар, досліджуючи відбивання світла від тонких металевих плівок на підкладках [23], спостерігав глибокі провали у спектрах відбивання, але не відносив це до поверхневих плазмонів. Отто працював над результатами Тюрбадара і пояснив, що ці провали за повного внутрішнього відбивання обумовлені збудженням поверхневих плазмонів [24]. Відразу після формулювання Отто в цьому ж році Кречманн і Ратер, змінюючи конфігурацію повного внутрішнього відбивання, запропонували поверхневу плазмонно-резонансну систему, яка є найбільш поширеним на сьогодні комерційно доступним сенсором, що працює на явищі плазмонного резонансу [25]. Отже, було продемонстровано збудження поверхневої хвилі Зоммерфельда, використовуючи взаємодію видимого світла з призмою і як результат електромагнітні ефекти цих робіт були об'єднані з описом поверхневих плазмон-поляритонів (ППП), що стало основою плазмоніки.

Поверхневі плазмон-поляритони – це поверхневі хвилі, які існують на інтерфейсі між металом та діелектриком. За певних умов, внаслідок позитивної діелектричної проникності діелектричного матеріалу та негативної діелектричної поведінки металу на оптичних частотах, падаюче світло поєднується з поверхневими плазмонами, створюючи тим самим самостійні та поширювані електромагнітні хвилі. Висока концентрація енергії

електромагнітної хвилі для цього інтерфейсу дає змогу здійснювати підсилення поля в субхвильових масштабах, а хвилі можуть поширюватися уздовж інтерфейсу на кілька сотень довжин хвиль [26]. Оскільки ППП виникають у провідниках через колективні коливання вільних електронів, вони утворюють гібридну хвилю, що забезпечує перспективу об'єднання як фотонних, так і електронних елементів на тій же платформі. ППП згасають експоненціально з відстанню в обох напрямках від інтерфейсу, але поширюються вздовж інтерфейсу [27]. Отже, ППП переносять поглинену електромагнітну енергію вздовж межі розділу і за певних умов можуть перевипромінювати електромагнітну хвилю. Ці особливості - можливість реалізації перетворення світло - хвиля на поверхні - світло і висока локалізація електромагнітної енергії поблизу поверхні - роблять плазмон-поляритони перспективними для подальшої мініатюризації інтегральних та оптоелектронних схем і збільшення їх швидкодії.

Застосування ППП зазвичай привертає увагу дослідників через ряд причин. Першою і найважливішою з них є субхвильове застосування плазмоніки [28]. Оскільки поверхневі плазмонні коливання походять від зв'язку між коливаннями електронної плазми та оптичними хвилями, довжина хвилі плазмонів, як правило, менша за довжину хвилі опромінення. Ця функція є дуже корисною особливо для електроніки [29]. Люди в електронній промисловості завжди бажали інтегрувати оптику в електроніку через проблеми з частотою переключення в мікросхіпах. Однак, технологія виготовлення в електроніці дає можливість для масового виробництва 45 нм транзисторів сьогодні. За допомогою звичайних методів неможливо подолати дифракційну межу світла на приладах [30]. З цієї причини більшість дослідників, які працюють в області оптоелектроніки, направляли свої дослідження в напрямку плазмоніки. Іншою причиною такої великої популярності є висока інтенсивність еванесцентних хвиль на межі метал-діелектрик і високі фактори добротності, досягнуті при умовах поверхневого плазмон-поляритонного резонансу (ПППР). Висока інтенсивність на поверхні відкриває шлях до нелінійних застосувань поверхневих плазмонів [31]. З іншого боку, різкий резонансний стан дозволяє

виготовляти високочутливі сенсори, які зазвичай використовуються для біологічного або хімічного детектування [32]. Ці сенсори, як правило, працюють за принципом вимірювання зміни показника заломлення, а найсучасніші з них мають дуже високу точність та чутливості менше, ніж  $1 \cdot 10^{-5}$  одиниць показника заломлення (RIU) [33]. Підсилення електромагнітного поля за рахунок ПППР дозволяє підсилити такі явища як комбінаційне розсіювання світла (КРС), генерація другої гармоніки, флуоресценція, тощо [34]. Крім цього, плазмон-поляритони представляють інтерес для різного роду інтегральних давачів, що ґрунтуються на тому, що на збудження плазмон-поляритонів впливає оточуюче середовище (його діелектрична проникність), а електромагнітне поле збудженого плазмона, в свою чергу, може взаємодіяти з його оточенням.

Крім цих основних застосувань ПППР також використовуються у системах пропускання та хвилеводних структурах. Починаючи з роботи Еббесена [35] властивість пропускання за рахунок плазмон-поляритонного резонансу було продемонстровано різними геометріями [36, 37]. І з технічної точки зору з'явилася нова концепція оптичного фільтра. Хвилеводні моди теж дуже важливі з технічної точки зору, адже за допомогою них світлові хвилі можна передавати через субхвильові структури в інтегральних схемах [38, 39]. Мініатюризація у високошвидкісних схемах та системах, що базуються на структурах ПППР, може бути досягнута шляхом видалення небажаних схем фільтрування. В роботі [40] продемонстровано, що при зміні глибини канавки дисперсійні криві демонструють відповідне відсікання частоти. Коли робоча частота стає більшою за частоту відсічення, через плазмонний хвилевід більше не можна поширювати ПППР хвилі, що відповідає різкому зниженню спектра пропускання. Отже, явище ПППР сприяє фільтруванню і використовується для мініатюризації плазмонних пристроїв [41].

Оскільки технологія розвивається, електронні пристрої швидко наближаються до основних обмежень швидкості та пропускнуої спроможності, то на даний час докладаються значні зусилля обійти ці обставини [42]. Одним з потенційних рішень є використання фотонних схем, за допомогою яких

поширювані електромагнітні хвилі перетворюються в поверхневі плазмон-поляритонні хвилі, обробляються за допомогою логічних пристроїв та перетворюються назад у електромагнітні хвилі. Іншими словами, ППП можуть бути використані для забезпечення функціональних можливостей оптичних схем через фотоніку [43].

Починаючи з 80-х рр. 20 століття кількість публікацій, які стосуються основних принципів і застосування поверхневих плазмон-поляритонів, росте як лавина. Однак, це ще дедалі зростаючий предмет дослідження і в цій темі ще багато чого можна зробити.

### **1.1.3. Локалізований поверхневий плазмонний резонанс**

Необхідно відрізнити поверхневі плаزمони, що замкнені в об'ємі металевих наночастинок (так звана перша фрьоліхівська мода – дипольна- та мультипольні коливання електронного газу біля поверхні наночастинок) та поверхневі плазмонні поляритони, що поширюються вздовж протяжної межі поділу метал–діелектрик і являють собою еванесцентні електромагнітні хвилі [44]. Точніше кажучи, ППП є суперпозицією електромагнітної хвилі і хвилі поляризації обмеженого поверхнею газу вільних електронів. Коли світло падає на металеву наноструктуру розміром, що дорівнює або менше довжини хвилі падаючого світла, електрони зони провідності в металі коливаються в резонансі на певних довжинах хвиль. Це явище називається локалізованим поверхневим плазмонним резонансом (ЛППР). Існування локалізованих плазмонів обумовлено резонансним збудженням електронів в наночастинках металу, що проявляється в резонансному поглинанні і розсіянні електромагнітних хвиль, формуванні сильних електричних полів поблизу наночастинок.

Глибина проникнення електромагнітних хвиль в металах становить 30 нм, тому падаюче світло здатне проникати до наночастинок і просторово зміщувати провідний електрон по відношенню до позитивних іонів ґратки [45]. Це створює повертаючу силу між електронами і позитивними іонами, і сила змушує електрони коливатися в резонансі з падаючим світлом. Ця резонансна реакція



сильно залежить від розміру, форми та діелектричної проникності середовища, що оточує металеву НЧ [46].

Збудження плазмонів електричним полем електромагнітного випромінювання не допускається для об'ємної речовини, тобто нижче глибини скін-шару металу, де криві дисперсії плазмонів та фотонів ніколи не перетинаються одна з одною [46]. З іншого боку, наявність поверхні в реальних матеріалах дозволяє існувати специфічним плазмонним модам, які можуть бути збуджені зовнішнім електричним полем електромагнітного випромінювання [47], що викликає переміщення електронного газу щодо їх рівноважного положення навколо позитивно заряджених іонів. Найбільш ефективно світло, що падає під великим кутом падіння (тобто з хвильовим вектором, майже паралельним поверхні) взаємодіє з вільним електронним газом, так, як в конфігурації повного внутрішнього відбивання (Кречманна або Отто) [24, 25]. У випадку з металевими НЧ, тобто з розміром, співмірним з глибиною скін-шару металу, електричне поле падаючого світла може проникати в метал та впливати на електрони провідності, а отже плазмонні коливання розподіляються по всьому об'єму частинок [46]. Такий когерентний зсув електронів з позитивно зарядженої решітки генерує повертальну силу, яка витягує електрони назад до решітки, тобто НЧ діють так само, як "наноантена" [48]

Резонанс електронів з дискретними частотами часто називають дипольним плазмонним резонансом, або, як зазначалось вище. ЛППР, щоб диференціювати його зі збудженням об'ємних або поверхневих плазмонів [27]. Вище наведені дослідження призвели до народження динамічної та активної області плазмоніки, яка охоплює науку та інженерію оптичної взаємодії з наноструктурами. Що більш важливо, плазмоніка унікальна в тому сенсі, що вона може використовувати наноструктури різного розміру (10-100 нм). Тому вивчення плазмоніки може з'єднати проміжок між мікрометричними та нанометричними матеріалами. Наприклад, Ag-нанодропи можуть пропускати світло в широкій області довжин хвиль [49]. Таким чином, плазмоніка є новим

підрозділом нанорозмірних наук та технологій, метою якого є керування світлом, використовуючи металеві наноструктури в новий спосіб.

За рахунок електромагнітного поля, обмеженого та локалізованого на поверхні металевих конструкцій, поверхневі плазмони є дуже чутливими до локальних змін в діелектричній проникності оточуючого середовища. Металеві структури можуть бути тонкими металевими плівками та смугами, наночастинками металів, отворами, щілинами, канавками або гофрами в металевих плівках тощо.

Через значну локалізацію та підсилення світлового поля можлива також і спектроскопія або детектування молекул [50, 51]. В даний час давачі, що працюють на ефекті поверхневого плазмонного резонансу, є комерційно доступними. Оскільки довжина хвилі поверхневого плазмону для заданої частоти коротша ніж у повітрі, поверхневі плазмони можуть бути використані для подолання класичної межі дифракції та для наномасштабного зображення [52]. Висока локалізація світла може бути використана для ефективного захоплення та концентрації сонячного світла, тому поглинання у фотоелектричних пристроях значною мірою збільшується. Це збільшення може дозволити значне зменшення фізичної товщини сонячних фотоелектричних шарів поглинача і може знизити ціну сонячних елементів у майбутньому [53]. Хвилеводні характеристики роблять поверхневі плазмони дуже корисними для інтеграції оптики до нанорозмірів, особливо для передачі енергії та інформації за межами дифракційної межі [54].

Незважаючи на ці досягнення та корисні застосування в області плазмоніки, все ще існують важливі відкриті питання та проблеми. Наприклад, як ефективно збуджувати плазмони з нанорозмірним розділенням? До теперішнього часу збудження поверхневих плазмонів здійснюється в основному за допомогою оптичних методів далекого поля, які мають роздільну здатність більшу ніж досліджувані явища плазмону, та використання оптичних методів ближнього поля (наприклад, сканування ближньої польової оптичної мікроскопії), які

мають кращу роздільну здатність як для збудження поверхневого плазмонного резонансу (ППР), так і для виявлення ППР [55].

## **1.2. Огляд основних напрямків, переваг і досвіду застосування резонансних мікро-та наноструктур в задачах аналізу і синтезу оптико-електронних систем**

Розвиток сучасних технологій та мініатюризація оптико-електронних приладів неухильно ведуть до необхідності створення, дослідження та використання нано- та мікророзмірних об'єктів, таких як нанокомпозитні системи, мікро- та наноструктури, квантові точки і т.д. На резонансних явищах ґрунтується робота низки сучасних фотонних елементів, таких як різноманітні фільтри, антени, сенсори, сонячні елементи та інше. Ефекти резонансу також виступають як потужний енергетичний та інформаційний чинник у новітніх нанофотонних технологіях в енергетиці та біомедицині. Використання ефекту плазмонного резонансу, що виникає на металевих НЧ та наноструктурах різної форми і природи, дає змогу прогнозовано розсіювати світло певного спектрального діапазону в заданих напрямках, а також локалізувати електромагнітне поле, тим самим створюючи умови для максимального поглинання та генерації світла. В свою чергу резонансні характеристики конкретних нанокомпозитних структур залежать як від властивостей самого металу, в першу чергу – значення плазмової резонансної частоти коливань електронів, так і від широкого набору факторів, що характеризують інтерфейс метал-напівпровідник і саму наноструктуру.

### **1.2.1. Призмові структури як елементи сенсорних систем**

Резонансна спектральна характеристика ППП резонансу до зміни показника заломлення навколишнього середовища, як результат біомолекулярної взаємодії, відіграє вирішальну роль у технології хімічного та біологічного детектування, оскільки характеризується відмінними характеристиками, які є вигідними для використання в чутливих та неруйнівних біохімічних аналізах. Можливості

плазмонних сенсорів розширюються завдяки значному прогресу, досягнутому останнім часом в технологіях мікро- і нановиготовлення [56, 57]. Тим часом дослідники зараз намагаються розробити нові пристрої, здатні подолати обмеження традиційних сенсорів, що працюють на основі ППП резонансу. Для покращення аналітичних показників давачів плазмонних систем необхідно зрозуміти основний механізм та правила, що використовуються при проектуванні параметрів у попередніх системах таких сенсорів.

Як уже зазначалось, світлова хвиля може взаємодіяти з поверхневим плазмоном на межі розділу метал-діелектрик, якщо компонент хвильового вектора світла, паралельний межі розділу, співпадає з константою поширення поверхневого плазмона. Оскільки константа поширення поверхневого плазмона в метал-діелектричному інтерфейсі більша за хвильове число світлової хвилі в діелектрику, поверхневі плазмони не можуть бути збуджені безпосередньо за рахунок світла, що падає на поверхню гладкого металу. Хвильовий вектор світла може бути збільшений до рівня, близького до поверхневого плазмона, за рахунок повного внутрішнього відбивання або дифракції. Це підсилення, а згодом і зв'язок світла з поверхневим плазмоном, виконується за допомогою з'єднувального пристрою. Найпоширеніші з'єднувачі, що використовуються в ПППР давачах, включають в себе призмове збудження, хвилеводне збудження та ґраткове збудження. Тут ми детально розглянемо сенсори на основі призмового збудження плазмонної хвилі.

Застосування призм є найбільш часто використовуваним методом оптичного збудження поверхневих плазмонів [24, 25, 58]. У конфігурації Кречмана світлова хвиля проходить через призму з високим показником заломлення і повністю відбивається на основі призми, утворюючи еванесцентну хвилю, що проникає в тонку металеву плівку. Еванесцентна хвиля поширюється вздовж інтерфейсу з константою поширення, яка може бути відрегульована так, щоб вона відповідала рівню поверхневого плазмона шляхом регулювання кута падіння. Таким чином, умова відповідності:

$$\frac{2\pi}{\lambda} n_n \sin(\theta) = \text{Re}(\beta_{\text{ППП}}) \quad (1.1)$$

може бути виконана, що дозволяє еванесцентній хвилі з'єднатися з поверхневим плазмоном.  $\theta$  – це кут падіння променя,  $n_n$  – це показник заломлення призми,  $\beta_{\text{ППП}}$  – це константа поширення поверхневого плазмона.

У процесі оптичного збудження поверхневого плазмона частина енергії світлової хвилі переноситься в енергію поверхневого плазмона і розсіюється в металевій плівці, що призводить до провалу на спектральній характеристиці відбивання. На додаток до зміни інтенсивності, світлова хвиля, що збуджує поверхневий плазмон, зазнає змін у фазі [59]. Призмове збудження зручне і може бути реалізоване за допомогою простих і звичайних оптичних елементів.

Для збільшення чутливості інтенсивності модульованих сенсорів ПППР в роботі [60] запропоновано використовувати призму з низьким показником заломлення, оптимальну товщину металевієї плівки і досить великий резонансний кут на відповідній довжині хвилі. Хоча в більшості випадків в конфігурації Кречмана використовують призму з високим показником заломлення [33]. Незважаючи на те, що система є громіздкою, завдяки своїй простій структурі легко виготовити практичні сенсори, а високу чутливість можна легко отримати провівши теоретичні розрахунки коефіцієнтів пропускання та відбивання на плоскій металевій плівці [61, 62]. Для побудови сенсора на основі конфігурації Кречмана, слід враховувати вплив геометричних параметрів. Товщина металевих шарів є фізичним параметром сенсорних структур і може регулюватися для покращення спектру відбивання [63]. Крім того, спектральні характеристики сенсорної системи залежать від довжини хвилі падаючого випромінювання та показника заломлення призми [64].

У ПППР сенсорах з кутовою модуляцією монохроматичного світла для освітлення можуть використовуватися джерела з різними довжинами хвилі. Коли для опромінення використовується джерело світла більшої довжини хвилі, то кутовий спектральний огляд показує кращу роздільну здатність з вузькою смугою пропускання [65]. Проте, коли довжина хвилі падаючого джерела світла

збільшується, чутливість зменшується. Збільшення чутливості в короткохвильовому режимі пов'язане з ефективним показником заломлення поверхневого плазмона, що наближається до показника заломлення призми [59]. Виходячи з того самого принципу, чутливість також залежить від матеріалу, який використовується при побудові призми. Коли показник заломлення призми збільшується, смуга пропускання спектру відбивання звужується з невеликим кутом резонансу, однак чутливість зменшується. На відміну від цього, якщо показник заломлення призми менший, смуга пропускання резонансної кривої ширша [66].

Типовим прикладом високопродуктивного ППР сенсора є сенсор ППР-зображення [67-69]. У типовій схемі ППР-зображення промінь монохроматичного світла проходить крізь призму і попадає на тонку металеву плівку під кутом падіння близьким до кута повного внутрішнього відбивання. Інтенсивність відбитого світла залежить від зв'язку між падаючою хвилею світла і хвилею поверхневого плазмона, тому може бути співвіднесена з розподілом показника заломлення на поверхні металевієї плівки [68].

У сенсорах, що базуються на спектроскопії поверхневих плазмонів, вимірюється кут або довжина світлової хвилі, пов'язаної з поверхневим плазмоном, і відгук сенсора пов'язаний із зміною позиції кута або довжини хвилі спектру відбивана ППР [58, 70, 71]. З метою підвищення чутливості детектування були досліджені різні схеми, для прикладу, з використанням додаткових діелектричних шарів [72, 73] та біметалевих шарів [74], з використанням масиву наноотворів в металевій плівці [75], нанопористих матеріалів [76] чи періодичних структур [77, 78], використанням різних матеріалів призми [79, 80]. Такі схеми, як правило, характеризуються чутливістю приблизно  $5 \cdot 10^{-7}$  одиниць показника заломлення (RIU) [33]

В ППР сенсорах, що характеризуються модуляцією довжини хвилі, детектування отримується за довжиною хвилі при фіксованому куті падіння, а оптичний відгук показує зміну досліджуваного середовища, коли змінюється довжина хвилі. Коли резонансна довжина хвилі зміщується в область більших

довжин хвиль, чутливість ППР сенсорів покращується [59]. Оптимізація цього підходу дозволяє отримати чутливість 7,500 нм/RIU [81]. Довжина хвилі резонансу визначається кутом падіння білого світла в умовах, коли інші геометричні параметри постійні. Якщо кут падіння пучка білого світла встановлений на невелике значення, резонанс відбувається на більшій довжині хвилі та з вищою чутливістю. Крім того, ця властивість може бути застосована для багатоканальних сенсорних систем [82, 83].

Отже, для вибору оптичної схеми сенсорів та їх проектування потрібно провести фундаментальні дослідження взаємодії електромагнітних хвиль TE і TM поляризацій з ґратковими та призмовими структурами в режимі резонансу плазмонів та резонансу хвилеводних мод і на основі цих досліджень вибрати оптимальні структури максимальної чутливості.

### 1.2.2. Ґраткові структури та пристрої на їх основі

Останнім часом високу зацікавленість вчених і інженерів викликають різноманітні періодичні структури, а також дифракція та різноманітні резонансні явища на таких структурах. Наприклад, діелектрична ґратка на металевій підкладці, в якій виникає поверхневий плазмон-поляритонний, хвилеводний резонанси або повне поглинання енергії електромагнітної хвилі; металева ґратка з резонансним поглинанням за рахунок ППП резонансу у вузькій смузі з максимумом на довжині хвилі відповідно до рівняння:

$$\frac{2\pi}{\Lambda} \cong \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\frac{\epsilon_m \epsilon_d}{\epsilon_m + \epsilon_d}}, \quad (1.2)$$

де  $\Lambda$  – період ґратки,  $\epsilon_m$  – діелектрична проникність металу,  $\epsilon_d$  – діелектрична проникність середовища, прилеглого до підкладки.

Такі періодичні структури стають основою для створення оптичних приладів нового типу. В даний час вони широко використовуються в оптичних пристроях, наприклад, у спектрометрах [84–91], де дифракційна ґратка використовується для розділення спектральних компонентів джерела світла. Оптичні властивості ґратки завдяки її високій ефективності, низькій чутливості

до поляризації та низькому рівню розсіяння світла, підвищують співвідношення сигнал/шум і спектральне розділення спектрометра. Гратки часто використовуються при лазерній селекції довжин хвиль [92–94], стисканні оптичних імпульсів [95–97], в системах мультиплексування з поділом довжин хвиль [98–102], лазерних сканерах та лазерних системах [103–107]. Їх широке використання в оптичних компонентах було привабливим через їх особливі оптичні властивості, отримані внаслідок дифракції світла, викликані періодичною структурою. Наприклад, гратки використовуються для забезпечення високої відбивної здатності з низькими втратами, необхідними для лазерних систем. Прикладом цих ґраток є добре відомі Бреґівські гратки [108–110].

Велике число публікацій в західних періодичних виданнях стосуються періодичних структур та ґраток, які мають в своєму складі благородні метали (срібло, золото), тобто такі метали, які мають високий коефіцієнт відбивання. Наприклад, металеві гратки з вузькими щілинами мають аномально високе пропускання у вузькій спектральній області [111–113]. На теперішній час не існує єдиного пояснення цього явища. Загальновизнано, що аномально високе пропускання такої металевої ґратки зумовлене, в основному, збудженням поверхневих плазмонів на верхньому та нижньому інтерфейсах ґратки [114–117]. Однак, в роботі [118] показано, що вклад поверхневого плазмону не є головним ефектом і що хвилеводний режим резонансу та дифракції відповідає за аномальне пропускання. Можна також сконструювати гратки з металом, які практично повністю поглинають енергію електромагнітної хвилі у вузькому спектральному діапазоні [119–122]. Це явище можна пояснити резонансом електромагнітного поля, який виникає в таких періодичних структурах, наприклад резонансом зв'язаних хвиль або плазмон-поляритонним резонансом.

Очевидно, що такі періодичні структури, в яких виникають резонансні явища у вузькому спектральному діапазоні, можуть служити основою для розроблення оптичних фільтрів нового типу, а також різноманітних сенсорів фізичних величин.



Налаштовувані оптичні фільтри мають широкий спектр застосувань, зокрема, спектроскопія, оптичні мережі зв'язку, дистанційне зондування та біомедичні зображення та діагностика [123] завдяки їх простоті конструкції та сумісності з іншими елементами. Найбільш успішними конструкціями фільтрів є смугові фільтри, що працюють на явищі хвилеводного ефекту [14, 15, 124–128], на основі Бреггівських ґраток [129–133], висококонтрастних ґраткових структур [134–136], голографічних ґраток [137–140], поляризаційних ґраток [141–142] та ін. Оскільки методи виготовлення та моделювання для таких пристроїв стали більш витонченими, були описані численні інші ефекти, які можуть бути досягнуті. Наприклад, вводячи деяку неперіодичну варіацію в структуру ґратки, стає можливим створення фокусуєчого ефекту для відбитого або пройденого променя [143]. Незважаючи на свою популярність, ці конструкції в багатьох випадках є дорогими для реалізації, можуть мати високі втрати на виході, проявляти сильну чутливість до поляризації або їх важко мініатюризувати.

ґраткові сенсорні елементи не так широко використовуються як призмові, проте їх сумісність із масовим виробництвом (зокрема, реплікація в пластик) робить ґраткові структури привабливими для виготовлення недорогих сенсорів. Наприклад, на основі плазмон-поляритонного резонансу можна розробити біосенсор для контролю біорозчинів, який працюватиме в реальному масштабі часу [144–147]. Підвищена чутливість в плазмонних сенсорах на основі ґраток забезпечується, наприклад, за допомогою металевої [148, 149] чи діелектричної ґратки [150] разом з призмовою структурою; використовуючи двошарові металеві ґратки [151, 152], діелектричні ґратки з металевими покриттями [153–155], ґратки на основі металу [156] або напівпровідникових нанодротів [157], напівпровідникових ґраток [158] або ґратки на основі композитних матеріалів [159] та наночастинок [160, 161] та інших. Крім того, чутливість сенсора на основі ґратки може бути підсилена шляхом оптимізації геометричних параметрів ґратки, таких як період, глибина, фактор заповнення та рельєф [162]. Наприклад, у роботі [163] було показано, що оптимізація прямокутної металевої

ґратки привела до підсилення чутливості більш ніж у 3 рази в порівнянні зі стандартним сенсором.

Беручи до уваги вище написане, слід наголосити, що для того, щоб зробити оптико-електронні пристрої доступними, з високим розділенням та чутливістю необхідно проводити подальші дослідження ґраткових структур, оскільки вони є критичними елементами, які визначають роботу таких приладів в цілому.

### **1.2.3. Наночастинки та перспективи їх застосування**

Металеві наночастинки формують окремий клас матеріалів з унікальними властивостями, вивчення яких становить значну наукову та практичну цінність через можливість використання таких матеріалів у всіх областях науки та техніки, як діючих елементів, зокрема, як сенсори, фотоелектричні пристрої та хвилеводи, фільтри, хімічні каталізатори, та ін.

Поверхневий натяг і поверхнева енергія наночастинок суттєво впливають на їх різнобічні властивості в залежності від розміру частинок, зокрема на термодинамічні властивості наноструктур, а також умови їх фазових перетворень. Зі зменшенням розміру в наночастинках створюються фази, яких немає у вихідній речовині, збільшується їхня поверхнева енергія. Перехід від макророзмірів до наночастинок супроводжується зміною міжатомної відстані та періоду кристалічної решітки, що зумовлює виникнення нових незвичних властивостей наноструктур. Основною причиною зміни термодинамічної характеристики нанокристалів у порівнянні з речовинами звичних розмірів є зміни виду та границь фононного спектру, тобто зміни функції розподілу частот атомних коливань, яку в науковій літературі називають «функція розподілу частот». В нанокристалічних матеріалах істотно змінюються механічні властивості. За певних умов ці матеріали можуть бути надтвердими або надпластичними. Для прикладу, твердість нанокристалічного нікелю при переході до нанорозмірних розмірів збільшується у декілька разів, а міцність на розтяг зростає в 5 разів. Так в нанокристалічних і нанопористих матеріалах різко збільшується питома поверхня, тобто доля атомів, що знаходяться в тонкому

(~1 нм) приповерхневому шарі. Це приводить до підвищення реакційної здатності нанокристалів, оскільки атоми, що знаходяться на поверхні, мають ненасичені зв'язки на відміну від тих, що знаходяться в об'ємі.

Резонанс поверхневих плазмонів є найбільш вираженою оптичною властивістю металевих наноструктур, що проявляється у колективному коливанні електронів провідності збуджених електромагнітним полем. У випадку металевих НЧ, де електрони знаходяться в трьох вимірах, електронні коливання викликають електричне поле навколо НЧ, яке може бути набагато інтенсивнішим за падаюче світло. Плазмонний резонанс є одним із найкращих прикладів того, як властивості речовини в наномасштабі відрізняються від об'ємної речовини. Коли розмір металевої НЧ зменшується до кількох нанометрів, оптичні властивості різко модифікуються за рахунок появи плазмонного резонансу і повністю відрізняються від об'ємного металу.

Металеві НЧ представляють інтерес завдяки своїм унікальним електронним, оптичним та магнітним властивостям [46, 164, 165]. Зокрема, НЧ благородних металів, таких як золото та срібло, привертають більше уваги [166–169], оскільки вони характеризуються різним кольором у видимій області за рахунок плазмонного резонансу. Довжина хвилі резонансу сильно залежить від розміру та форми наночастинок, відстані між частинками та діелектричних властивостей навколишнього середовища [46, 170].

ППР відкриває можливість підсилення, концентрації та маніпулювання світлом в наномасштабі, подолання дифракційної межі традиційної оптики, збільшення роздільної здатності та чутливості оптичних зондів [170, 171]. Отже, плазмонні НЧ можна використовувати у різних галузях, у тому числі біомедичній [172–174], енергетичній [175–177], захисту навколишнього середовища [178–180], сенсоричній [181–184] та інформаційних технологіях [46,170,185].

Досягнення у технології синтезу частинок [186, 187] дозволили вивчати упорядковані масиви НЧ благородного металу. У таких масивах кожна НЧ з діаметром значно меншим за довжину хвилі збуджуючого світла діє як

електричний диполь. Таким чином, можна виділити два типи електромагнітних взаємодій між частинками залежно від відстані між суміжними частинками. Для НЧ, розміщених між собою на відстанях порядку довжини хвилі опромінення, переважає біполярна взаємодія далекого поля [188]. Застосування таких упорядкованих масивів, наприклад, полягає в можливості підсилення комбінаційного розсіювання адсорбованих молекул за рахунок поверхневого плазмонного резонансу [189–191]. Для НЧ, розміщених між собою на відстанях значно менших за довжину хвилі опромінення, переважає біполярна взаємодія ближнього поля [192]. Одним із застосувань ближньопольової взаємодії між частинками в упорядкованих масивах є використання таких структур як хвилеводи для електромагнітних енергій на оптичних частотах з профілем поперечної моди нижче дифракційної межі світла [193, 194].

Локалізовані збудження плазмонів, опосередковані взаємодією частинок, також відбуваються у випадково наноструктурованих металевих поверхнях. У цьому випадку процеси багаторазового розсіяння можуть призвести до "гарячих точок" надзвичайно великого підсилення поля, що дозволило використовувати такі структури для одномолекулярної спектроскопії [195, 196].

Підсилення ближнього поля навколо металевих наноструктур, індуковане опроміненням у видимому та ближньому інфрачервоному діапазонах, дозволяє використовувати їх у різних прикладних задачах оптоелектроніки. Оскільки підсилене поле локалізується на поверхні наноструктур, вони служать локальним зондом діелектричного середовища в межах декількох нанометрів від поверхні частинок. Цей факт, наприклад, був використаний при вивченні варіацій локального показника заломлення в світлі біологічних сенсорних застосувань [197, 198]. Крім того, локальна реакція металевих наноструктур може служити для підсилення вхідних і сформованих полів за нелінійних процесів [199].

Іншим класом НЧ, що характеризується плазмонним резонансом, є нанооболонки (діелектричне чи напівпровідникове ядро, покрите металевою оболонкою, або навпаки) [200–202], які забезпечують можливість точного

спектрального налаштування частот поверхневого плазмонного резонансу за допомогою їх геометрії. Це можливо завдяки керованій плазмонній взаємодії сфери та порожнини через розміри ядра/оболонки. Крім того, очікується, що нанооболонки проявляють більшу чутливість до зміни діелектричного середовища, дозволяють кероване перенаправлення електромагнітного випромінювання, сприяють вивченню мультипольних поверхневих плазмонних резонансів [203]. Варто відмітити зростаючий інтерес до використання оптичних властивостей плазмонних наноболонок в якості функціонального компонента в різних оптичних, біомедичних системах [204–207]. Розвиток технології синтезу НЧ за останні роки дав можливість дослідникам вивчати НЧ різної форми, починаючи від нанострижнів [208] і закінчуючи екзотичними структурами типу нанозірка чи нанорис [209, 210].

В останні роки привернуло увагу дослідників вивчення молекулярних екситон-металевих наноструктурних комплексів і дослідження плазмон-екситонної взаємодії, які набули небаченого імпульсу [211–214]. Отже, на сьогоднішній день існує багато добре вивчених застосувань наночастинок, проте, зі швидким розвитком можливостей виготовляти та обробляти наноматеріали з'являються нові задачі, які потребують детального вивчення.

#### **1.2.4. Перспективи застосування нанокompозитних матеріалів в оптико-електронних системах**

Все більшу зацікавленість знаходять оптичні елементи, створені на основі штучних матеріалів – нанокompозитів. Нанокompозити – це матеріали, які включають нанорозмірні частинки в матрицю стандартного матеріалу. Особливість застосування таких матеріалів виходить з того, що зі зменшенням розмірів структурних елементів вони набувають принципово нових властивостей, якими не володіють уже існуючі матеріали [215, 216], і їх використання є корисними в цілому ряді прикладних задач науки і техніки. До них відноситься фотовольтаїка і термофотовольтаїка [217, 218],

фотодетектування [219], генерація гарячих електронів [220], термоплазмоніка [221] та багато інших.

Як відомо, наночастинки мають надзвичайно високе співвідношення між поверхнею та об'ємом, яке різко змінює їх властивості у порівнянні з їх об'ємними еквівалентами. Це також змінює спосіб, у який наночастинки зв'язуються з основним матеріалом. Результат полягає в тому, що композит може бути в багато разів покращений відносно властивостей його складників [222]. Результатом додавання наночастинок може бути різке покращення таких властивостей, як: механічні властивості [223], електропровідність [224], зменшена проникність газу, води та вуглеводнів [225], термостабільність [226], хімічна стійкість [227], оптичні властивості [228], антимикробна дія [229] та інші.

Композити, що складаються з металевих НЧ, диспергованих в діелектричні середовища, можуть проявляти великий нелінійно-оптичний відгук за рахунок електронних переходів в наночастинках. Створення нанокompозитних матеріалів з високими нелінійно-оптичними характеристиками дає можливість використати їх в оптоелектроніці, оптичному зв'язку, виготовленні логічних елементів оптичних обчислювальних машин і елементів комутації для оптоелектроніки, запису і зберігання інформації [230].

Варто зазначити, що нанокompозити широко використовують в сенсоріці [231]. Найширше використання знайшли композити на основі полімерних матеріалів [232–234]. Однак, чутливість та селективність наноструктур, що демонструють сенсори на основі полімерів, все ще залишають можливості для покращення. Для прикладу, нанокompозити на основі провідного полімеру отримали величезне визнання в області сенсорів для підсилення чутливості та селективності за рахунок синергетичного ефекту зменшення розмірів нановключень та високої електропровідності провідного полімеру в нанокompозитах [235]. Варто зазначити, що і інші матеріали, такі як матриця нанокompозиту, займають належне місце в сучасних дослідженнях: це скло, алмазоподібні вуглецеві плівки, кераміка, метал та інші [236–239].

Потрібно окремо згадати можливість зміни резонансних властивостей наноструктур за допомогою варіювання їх конфігурації. Найпростішим випадком є отримання композитів на основі НЧ різної форми. Варто зазначити що, форма НЧ та відстань між ними впливає на довжину хвилі плазмонного резонансу і при певних умовах на структурні неоднорідності, такі як шорсткість поверхні, неоднорідність форми наноструктур. Крім того, електромагнітні поля плазмонів можуть досягати особливо високої інтенсивності, утворюючи так звані «гарячі точки». Такі дослідження представляють зацікавленість, зокрема, тому, що такі ефекти, як підсилення комбінаційного розсіювання, люмінесценції, оптичної нелінійності будуть проявлятися набагато сильніше.

Неухильно зростає зацікавленість до плазмонних властивостей нанокompозитів [240–242], оскільки нанокompозити складаються з металевих НЧ в діелектричній матриці, малих у порівнянні з довжиною хвилі світла. Отже, в них практично немає розсіювання, і композити прозорі навіть при високих коефіцієнтах заповнення металів. Таким чином, показник заломлення може бути налаштований у широкому діапазоні.

Маючи такі спеціальні матеріали, можна значно збільшити ступінь свободи при проектуванні оптичних приладів. Для прикладу, використання лише природно доступних матеріалів є строгим обмеженням при проектуванні багатьох оптичних пристроїв. Плазмонні нанокompозити обіцяють подолати це обмеження за рахунок їх здатності створювати матеріали з регульованими та перебудовуваними властивостями. Однак, щоб розглянути плазмонні нанокompозити в процесі проектування функціональних оптичних пристроїв, надзвичайно важливо визначити ефективні властивості цих матеріалів, які дозволяють надійно прогнозувати оптичний відгук.

### **1.3. Сучасний стан методів дослідження та проблем вдосконалення наявних і створення нових ефективних елементів електроніки та фотоніки**

Особливості протікання процесів при взаємодії електромагнітного випромінювання із металевими наноструктурами різної будови зумовили

виникнення принципово нових галузей сучасних високих технологій, таких як плазмоніка та нанофотоніка. Одним із основних чинників, що визначає прикладні застосування цих галузей, є значне підсилення електричного та магнітного полів в околі наноструктурних елементів. Саме завдяки підсиленню локального поля сфера застосування наноструктур благородних металів є різноманітною та невпинно розширюється.

Дифракція електромагнітних хвиль на ґратках інтенсивно вивчається протягом багатьох років. Ефективне використання дифракційних ґраток у оптичних системах вимагає розуміння того, як параметри ґратки впливають на можливості і продуктивність системи. Точне знання ефективності дифракції по всьому діапазону довжин хвиль (або іншого параметра) є необхідним для точного аналізу продуктивності та оптимізації дизайну багатьох застосувань на основі ґраток. Ефективність дифракції може бути проаналізована різними чисельними методами, такими як метод кінцевих різниць [243], метод кінцевих елементів [244], та модальні методи [245]. Серед існуючих модальних методів найпопулярнішим є модальний метод Фур'є [246, 247], також відомий як асимптотично точний аналіз зв'язаних хвиль (rigorous coupled wave analysis, RCWA) АТМЗХ. Багато досліджень були присвячені підсиленню збіжності [248–250] та стабільності [251–254] цього методу. В даний час існує безліч стабільних числових алгоритмів та декілька варіантів їх реалізації, виражених різними термінологіями, які застосовуються до різних моделей ґраток [255, 256]. Серед цих алгоритмів та їхніх варіантів є очевидні подібності і тонкі відмінності. Одним з найвагоміших перших досліджень був ефективний і стабільний метод власних мод, представлений для аналізу діелектричних ґраток довільних профілів і товщин [257]. Для вивчення дифракційних ґраток довільного профілю, глибини та діелектричної проникності Лі запропонував багатошаровий модальний метод [258], в якому використовується числова процедура, відома як алгоритм R-матриці, для розрахунку поширення модальних полів через шари. За результатами [257] Лі описав метод R-матриці для моделювання дифракційних ґраток на основі матриць відбивання та пропускання [259]. Пізніше він



запропонував рекурсивний та чисельно стійкий S-матричний алгоритм для моделювання шаруватих дифракційних ґраток і представив його у формі [260, 261], яка не залежить від основних моделей ґратки та геометрії. У цих дослідженнях представлено декілька різних варіантів чисельного впровадження алгоритмів S-матриці, але не описані підматриці S-матриці, тобто матриці відбивання та пропускання. Тому, для успішного використання запропонованих алгоритмів (побудови комп'ютерних програм) необхідно враховувати багато додаткових літературних ресурсів. Звичайно, останнім часом доступні багато різних програм, які працюють на основі алгоритму АТМЗХ та S-матриці, де кількість правильних обчислюваних цифр залежить лише від пам'яті комп'ютера та часу розрахунку. Одними з кращих в даний час комерційними програмними продуктами для вирішення задач дифракції дифракційними ґратками є GSolver (Grating Solver Development Co, Texas, США, [www.gsolver.com](http://www.gsolver.com)) та PCGrate (Міжнародна інтелектуальна група, Inc [www.pcgrate.com](http://www.pcgrate.com)). Проте ці програми мають ряд недоліків і дослідження в галузі розроблення нових програм для проектування та моделювання дифракційних ґраток в рамках точної електромагнітної теорії проводяться і надалі [262, 263].

Дослідженню дифракції на металевих ґратках з параметрами, при яких реалізується резонанс локалізованих плазмонів, опубліковано відносно невелике число робіт порівняно з величезним масивом праць, які присвячені дифракції світла на ґратках. Для прикладу можна навести статті [264– 267]. При резонансі поверхневих плазмон–поляритонів виникають великі поля, проте резонанс проявляється у вузькій спектральній області. Але при практичному виготовленні таких ґраток, в яких проявляється вузькосмуговий резонанс, результати експерименту суттєво відрізняються від теоретичних передбачень. Це пояснюється тим, що при виготовленні ґраток не реалізується їх строга періодичність. Проте можна очікувати, що резонанс локалізованих плазмонів в металевих наногратках буде спектрально широкосмуговим, тому невелике порушення періодичності не суттєво вплине на резонанс в експериментальних зразках.

Дослідження взаємодії електромагнітних хвиль з періодичними та призмовими наноструктурами можна повністю описати рівняннями Максвелла при встановленні точних крайових умов. На основі АТМЗХ [246] та матричних методів [268–270] можна проводити з високою точністю числові експерименти, які дозволяють оптимізувати конструкції відповідних елементів. Ідея матричних методів полягає в розбитті структури на елементарні шари вздовж певного напрямку та аналізу властивостей кожного шару окремо. По суті, характеристична матриця зв'язує поля з одного боку шару з полями з другого боку. Тоді загальна матриця всієї структури є простим впорядкованим множенням матриць для кожного окремого фрагмента, а оптичні властивості структури можна отримати з цієї загальної матриці.

Матричний метод може бути використаний для обчислення оптичних властивостей структур, що містять декілька шарів, однак він є чисельно нестійким для товстих структур, які слід розкласти на велику кількість шарів [260]. Нестабільність зумовлена множенням величин, що експоненціально зростають чи зменшуються, які входять у характеристичні матриці для кожного окремого фрагмента. Проблема вирішується за допомогою розсіюючої матриці у зворотному просторі в площині шару і така матриця може бути розрахована за допомогою методу пройденої плоскої хвилі [271, 272]. Цей метод ідеально узгоджується з періодичною структурою, яка діє як дифракційна ґратка розсіюючи (відбивання і пропускання) падаюче світло в ряд напрямків (дифракційні порядки) [273].

На даний час розроблений цілий ряд ефективних числових підходів до розв'язку рівнянь Максвелла у присутності наночастинок та наноструктур, які дають можливість знайти плазмонні резонанси, відбите поле, а отже спектроскопічні характеристики як самих наночастинок, так і молекул поблизу них. До основних числових методів варто віднести дискретну дипольну апроксимацію (discrete dipole approximation) ДДА [274, 275], метод Т-матриці [276, 277], метод багатьох диполів (multiple multipole methods) [278], метод кінцевих різниць) [279], метод об'ємних інтегральних рівнянь) [280]. Всі ці

методи мають як недоліки, так і переваги. Для прикладу, той факт, що в ДДА зазвичай використовуються об'ємні діелектричні константи, перешкоджає його застосуванню до наночастинок квантового розміру. Нещодавно Дженсен та його колеги розробили атомістичну версію ДДА, яка називається моделлю дискретної взаємодії, що залежить від координації (cd-DIM) [281]. Вона розглядає різні локальні середовища кожного атома на поверхні, вводячи координатно-залежні діелектричні константи. Як результат, даний метод міг би ефективно описати тенденцію зсуву ліній локалізованого плазмонного резонансу в голубу область.

Найчастіше НЧ, які співмірні з довжиною хвилі, досліджуються за допомогою теорії розсіювання Мі [282]. Ця методика була успішно використана як для моделювання окремих НЧ [283, 284], так і для моделювання масиву плазмонних НЧ [285, 286]. Періодичні металеві структури НЧ мають важливе потенційне застосування як мініатюрні хвилеводи, що несуть сигнали поверхневими плазмонами, а також для покращення та налаштування ЛППР з метою біологічного та хімічного детектування [287–289]. Вивчення взаємодії світла з поверхневими плазмонами НЧ на основі періодичних структур має вирішальне значення для розуміння передачі сигналу та резонансних властивостей [290, 291].

Особливої уваги заслуговують дослідження резонансних ефектів взаємодії екситонів з локалізованими плазмонами, оскільки такі дослідження представляють інтерес для сучасної оптоелектроніки. Екситони і плазмони є двома типами колективних електронних збуджень в конденсованому середовищі. Екситони, які вивчаються в оптичній спектроскопії напівпровідникових наноструктур [292], дуже перспективні для багатьох практичних застосувань. Поверхневі плазмони в металевих частинках і їх агрегатах теж збуджуються в оптичному діапазоні і широко використовуються в якості наноконцентраторів електромагнітної енергії і оптичних сенсорів [293]. Роль плазмонів при резонансній взаємодії з екситонами може бути двоякою: вони можуть гасити екситонне випромінювання або посилювати його в залежності від характеру взаємодії. В останні роки значний інтерес пов'язаний зі

створенням різноманітних наноструктур "метал-напівпровідник" і вивченням в них оптичних явищ, обумовлених взаємодією екситонів великого радіусу з плазмонами [294]. Показано, що під час відсутності електронного переносу поляризаційна взаємодія екситонів і плазмонів істотно прискорює спонтанне випромінювання екситонів [295, 296], може призводити до утворення зв'язаних станів [297, 298], до концентрації електромагнітної енергії в нанометровому масштабі та електромагнітного енергоперенесення в наноструктурах [299] і т. д.

Що стосується матеріалів, які включають декілька компонентів, то основною ідеєю при побудові фізичних моделей їх оптичних властивостей є метод ефективного середовища, що з успіхом застосовується при вивченні оптичних ефектів у нанокompозитах. Протягом останніх десяти років з'явився величезний інтерес до різних матеріалів, допованих металевими НЧ. У багатьох практичних випадках можна вважати форму цих частинок близькою до сферичної і користуватися добре відомою теорією Мі [282]. Однак, як відомо, в рамках цієї теорії неможливо розрахувати взаємодію між частинками. Багато цікавих результатів можна отримати в квазістатичному наближенні при розгляді систем, що складаються з розсіювачів малих розмірів.

Найбільш відомою і широко використовуваною є теорія Максвелла-Гарнетта [300]. Тут ефективні властивості накладаються на середовище, виконане із сферичних включень в матеріалі-матриці. Вільними параметрами в теорії є фактор заповнення і внутрішні властивості матеріалів складових частин. Однак, хоча така теорія корисна для опису основних властивостей плазмонних нанокompозитів, вона перестає бути надійною, якщо фактор заповнення є великим. З часом було розроблено та застосовано багато розширень та альтернативних теорій для вирішення цієї проблеми, але всі вони мають свої обмеження [301–305]. Наприклад, вони добре описують властивості нанокompозиту, що містить періодично розташовані металеві НЧ [306], або вказують межі застосування ефективної діелектричної проникності [307]. Крім того, вони, як правило, не дуже добре працюють у випадку високих факторів заповнення нановключень.

Однак, плазмонні нанокompозити з високим фактором заповнення є важливими для багатьох застосувань [308–310]. Високий фактор заповнення передбачає набагато більш сильну дисперсію і тягне за собою те, що матеріали характеризуються або надзвичайно великою, або малою пропускнуою здатністю. Це має першорядне значення для зменшення розміру багатьох пристроїв, наприклад, нанопокриття. Обмежуючись міркуванням щодо невисоких факторів заповнення, ефективна діелектрична проникність нанокompозиту в основному визначається властивостями матеріалу-матриці і характеризується лише слабкою дисперсією. Це не дозволяє використовувати матеріал для багатьох застосувань [311].

Останнім часом методи ефективного середовища суттєво модернізуються. При цьому береться до уваги розподіл частинок за формою та розміром, вплив ефектів нелокальності та ін. А отже, технологія отримання нових нанокompозитів, таких як метал-напівпровідникова матриця чи напівпровідник-полімерна матриця з неоднорідним контрольованим розподілом частинок, потребує розроблення простих методів контролю параметрів розподілу таких нанокompозитів.

У підсумку можна зауважити, що задача розроблення теоретичних моделей взаємодії електромагнітного випромінювання та методики комп'ютерного моделювання ґраткових, призмових та хвилеводних структур, наночастинок та нанооболонки, композитних матеріалів, а також створення числових алгоритмів і конкретних програм розрахунку їх різноманітних фізичних параметрів залишається актуальною. Це стосується, в першу чергу, адаптації вже розроблених числових методів розв'язку задач з метою дослідження, вдосконалення наявних і створення нових ефективних засобів фотоніки.

#### **1.4. Можливі напрямки та методи покращення експлуатаційних характеристик твердотільних елементів**

Зацікавленість мікро- та наноструктурами на сучасному етапі розвитку фізики твердого тіла формується в основному за рахунок досліджень, пов'язаних

з розробленням нових твердотільних елементів та приладів на їх основі, принцип дії яких ґрунтується на резонансних явищах, оскільки такі структури забезпечують контроль поширення і взаємодії світла з речовиною.

У випадку плазмон-поляритонного резонансу здебільшого використовують призмове збудження резонансу. В цих приладах визначають кут, при якому спостерігається мінімум коефіцієнта відбивання, причому, кут визначається параметрами (показник заломлення, показник поглинання) досліджуваного середовища. Але сучасні прилади такого типу мають ряд недоліків, серед яких основними є недостатня чутливість за рахунок тонкого проміжного шару між чутливим елементом (тонка металева плівка) і досліджуваним середовищем, зміна характеристик з часом експлуатації за рахунок старіння чутливого елемента під впливом досліджуваних середовищ. Розуміння принципу дії таких приладів показує можливість створення резонансних явищ інших типів: збудження резонансу плазмонів з допомогою ґратки на плоскій металевій поверхні, збудження резонансу хвилеводних мод в планарному хвилеводі з допомогою призми або ґратки [312, 313]. Але на даний час не існує єдиної теорії різноманітних типів резонансних явищ оптичного діапазону, які можна використати для створення приладів динамічного (у реальному масштабі часу) контролю параметрів досліджуваних середовищ. Створення такої теорії дасть можливість проектувати відповідні пристрої з характеристиками, кращими ніж в існуючих приладах.

Можна також сконструювати ґратки з металом, які практично повністю поглинають енергію електромагнітної хвилі у вузькому спектральному діапазоні. Це явище можна пояснити резонансом електромагнітного поля, який виникає в таких періодичних структурах, наприклад, резонансом зв'язаних хвиль або плазмон-поляритонним резонансом. Очевидно, що такі періодичні структури, в яких виникають резонансні явища у вузькому спектральному діапазоні, можуть служити основою для розроблення оптичних фільтрів нового типу, а також різноманітних сенсорів фізичних величин [314–316]. Наприклад,

на основі плазмонно-поляритонного резонансу можна розробити біосенсор для контролю біорозчинів, який працюватиме в реальному масштабі часу.

Теоретично передбачено і експериментально встановлено, що на основі металевих ґраток можливо виготовляти поляризатори, які покращують свої “поляризаційні властивості” при зменшенні відношення періоду ґратки до довжини хвилі [317]. Слід сподіватися, що такі структури будуть представляти інтерес для терагерцового діапазону довжин хвиль.

Також доцільно дослідити структури, в яких можуть збуджуватися колективні плазмонні моди у пласких (2D) масивах наночастинок срібла, пов'язаних із взаємодією між локалізованими поверхневими плазмонними резонансами у сусідніх наночастинках. Оптичним проявом колективної плазмонної моди є інтенсивна вузька смуга у спектрі екстинкції плаского масиву наночастинок. Такі пласкі 2D масиви наночастинок срібла можна розмістити в низькочастотному електричному полі і керувати взаємодією між оптичною хвилею і наноструктурою. Тут може проявлятися модуляція оптичного випромінювання та нелінійні оптичні ефекти.

Завдяки таким оптичним властивостям як резонансне збільшення перерізу поглинання металевою НЧ, яке може багаторазово перевищувати її геометричні розміри, підсилення поля поблизу поверхні металевої НЧ в порівнянні з полем падаючої хвилі, а також просторова локалізація поля в масштабах, значно менших за довжину хвилі оптичного випромінювання, і можливість передачі плазмонного збудження між частинками, металеві НЧ знайшли своє застосування в мікроскопії, біосенсорах, оптиці ближнього поля, інформатиці. Крім того, встановлено факт можливості введення плазмонних НЧ металу (в основному НЧ срібла та золота) в хворі органи живих об'єктів, при цьому НЧ можуть прикріплюватися до мікроорганізмів, які викликають захворювання. За рахунок резонансу локально підвищується температура, що приводить до знищення хвороботворного мікроорганізму [318]. Рівномірно дисперговані НЧ в твердій фазі можна використати для виготовлення оптичних фільтрів [319].

В останні роки вчені світу приділяють увагу металевим нанооболонкам, унікальність яких полягає у наявності вираженого поверхневого плазмонного резонансу і ще ефективнішій можливості його застосування [320]. Така перспектива пов'язана з можливістю керувати оптичними і плазмонними властивостями структурномодифікованих нанооб'єктів прогнозованої геометрії. Положення смуги плазмонного резонансу можна варіювати в широких межах від видимої до ближньої інфрачервоної області шляхом зміни морфології і розміру частинок, створення їх агрегатів і більш складних наноструктур, зміни діелектричної проникливості навколишнього середовища. Контрольована зміна параметрів дозволяє налаштовувати плазмонні наноструктури для конкретних завдань практичного застосування, для прикладу, "оптичне вікно" живого організму. Тому, з точки зору фундаментальної науки, ключову роль відіграватимуть дослідження та розроблення теорії взаємодії лазерного випромінювання з наноструктурами та синтезу на їх основі оптичних елементів із заданими геометричними параметрами і, відповідно, необхідними оптичними властивостями. І в цьому випадку також не існує єдиної теорії взаємодії монохроматичного випромінювання з наночастинками металів, немає аналітичних співвідношень, які встановлюють частоту резонансу з розмірами та іншими характеристиками наночастинок.

Отже, основна гіпотеза полягає у існуванні ймовірних просторових конструкцій наноструктур на основі наночастинок благородних металів (золота та срібла), а також з наногратками, що мають у своєму складі фрагменти з періодичною топологією нанодротин на діелектричній чи металевій підкладці. В таких структурах можливі сильні резонансні явища, що приводять до значного підсилення або керованого перерозподілу електромагнітного поля. Математичне моделювання таких явищ для пошуку параметрів структур з максимальним проявом резонансу електромагнітного поля з наступним експериментальним підтвердженням стане підґрунтям для розроблення та виготовлення різноманітних приладів сучасної фотоніки нового типу (сенсорів, сонячних елементів, фотокаталізаторів, енергетичних комірок, наноантен і ін.).



Важливим є створення таких структур, які б локалізували якомога більшу кількість світла у заданих конфігураціях. Для досягнення цієї мети використовують нанорозмірні та нанокмпозитні структури, здатні підтримувати особливі типи коливань: локалізовані поверхневі плазмонні резонанси та плазмон-поляритони. Насамперед йдеться про структури із благородних металів (Ag, Au, Cu), адже саме у цих металах плазмонні властивості проявляються найсильніше [321–324]. Сильний зв'язок між напівпровідниковими екситонами і локалізованими поверхневими плазмонами, який спричиняє гібридизацію станів, в яких енергія когерентно і оборотно обмінюється між компонентами, є особливо важливим в області перетворення енергії [325]. Часто використовують органічні барвники і квантові точки для отримання сильного зв'язку з металевими наночастинками та плівками [326]. В останні роки все більша увага приділяється металевим наночастинкам та нанооболонкам різної форми, унікальність яких полягає у наявності вираженого поверхневого плазмонного резонансу і ще ефективнішій можливості його застосування [327, 328]. Така перспектива пов'язана з можливістю керувати оптичними і плазмонними властивостями структурно-модифікованих нанооб'єктів прогнозованої геометрії.

Варто зазначити, що структури на основі нанокмпозитних матеріалів демонструють екстраординарні властивості коефіцієнта відбивання та поглинання за рахунок модифікації електронних і оптичних характеристик наночастинок. Можливості нанокмпозитних структур можуть бути значно розширені за допомогою плазмон-екситонних ефектів, зокрема для керування швидкістю спонтанної рекомбінації переходів екситонів в квантових точках за допомогою явища плазмонного резонансу. Є підстави очікувати підвищення фотодинамічних властивостей, для прикладу, такого композиту як діоксид титану з благородним металом завдяки плазмон-поляритонній резонансній взаємодії.

Отже, сучасні технології та наномасштабність електронних приладів вимагають створення, дослідження та використання нано- та мікророзмірних

об'єктів таких як, нанокompозитні системи, мезочастинки, нанолазери, квантово-розмірні структури, періодичні структури і т.д. Таким чином, теоретичне та експериментальне дослідження плазмонних наноструктур є актуальним завданням, яке сьогодні вирішує нанофотоніка. Плазмонні методи дають змогу керування і локалізації світла на нанорівні, що значно нижче шкали довжини хвилі світла у вільному просторі. Пропоновані нові підходи до управління електронних систем і пов'язаних з ними плазмонних ефектів в наноструктурах відкривають абсолютно нові можливості для розвитку ширококутового фотокаталізу, вдосконалення оптоелектронних пристроїв, розроблення нанорозмірних джерел електричних і магнітних полів, візуалізації, діагностики та лікування в біомедицині та багато інших завтрашніх технологій.

Однак, незважаючи на широке обговорення даної тематики, багато питань залишаються ще недостатньо вивченими і потребують подальшого дослідження.

### **1.5. Висновки до першого розділу**

Відзначено, що на сучасному етапі розвитку сучасних технологій та мініатюризації оптико-електронних приладів саме на резонансних явищах ґрунтується робота низки сучасних твердотільних елементів, таких як різноманітні фільтри, антени, сенсори, сонячні елементи та інше. Ефекти резонансу також виступають як потужний енергетичний та інформаційний чинник у новітніх нанофотонних технологіях в енергетиці та біомедицині, а проблема керування електромагнітним випромінюванням в наноструктурах є одним з пріоритетів сучасної прикладної фізики.

Проаналізовано резонансні оптичні ефекти в мікро- та наноструктурах, а саме хвилеводний ефект, поверхневий плазмон-поляритонний резонанс та локалізований поверхневий плазмонний резонанс. Показано, що виходячи за межі макроскопічних ефектів плазмонної дії, пов'язаних лише з підсиленням електромагнітного поля, прикладна проблема полягає в тому, щоб зрозуміти, визначити кількісні показники та отримати контроль над фундаментальними фізико-хімічними процесами, що виникають в резонансних умовах, оскільки

контролювання резонансних процесів в наноструктурах є необхідним для розроблення основ архітектури і синтезу спеціальних плазмонних елементів в різноманітних сучасних застосуваннях нанофотоніки, оптоелектроніки, каталізу, фотохімії, біофотоніки та енергетики.

Проведено огляд основних напрямків, переваг і досвіду застосування резонансних мікро- та наноструктур в задачах аналізу і синтезу оптико-електронних систем. Показано, що в призмових структурах, як елементах сенсорних систем, високу чутливість можна отримати, оптимізуючи їх геометричні параметри. Показано, що ґраткові структури, в яких виникають резонансні явища у вузькому спектральному діапазоні, демонструють екстраординарні характеристики і можуть служити основою для розроблення оптичних фільтрів нового типу, а також різноманітних сенсорів фізичних величин. Розглянуто технологічні підходи застосування металевих наночастинок та нанокомпозитних матеріалів, оскільки підсилення ближнього поля навколо металевих наноструктур, індуковане опроміненням у видимому та ближньому інфрачервоному діапазонах, дозволяє використовувати їх у різних прикладних задачах оптоелектроніки.

Розглянуто сучасний стан методів дослідження та проблем вдосконалення наявних і створення нових ефективних елементів електроніки та фотоніки. Показано, що проблема розроблення теоретичних моделей взаємодії електромагнітного випромінювання та методики комп'ютерного моделювання ґраткових, призмових та хвилеводних структур, наночастинок та нанооболонки, композитних матеріалів, а також створення стійких числових алгоритмів і конкретних програм розрахунку їх різноманітних фізичних параметрів залишається актуальною. Це стосується, в першу чергу, адаптації вже розроблених числових методів розв'язку задач з метою дослідження, вдосконалення наявних і створення нових ефективних елементів електроніки.

## **РОЗДІЛ 2. МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ ДОСЛІДЖЕННЯ РЕЗОНАНСНОЇ ВЗАЄМОДІЇ ЕЛЕКТРОМАГНІТНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ З МІКРО- ТА НАНОСТРУКТУРАМИ**

### **2.1. Математична модель взаємодії лазерного випромінювання з періодичними мікро- та наноструктурами**

Серед численної кількості методів чисельного моделювання дифракції електромагнітних хвиль на періодичних мікро- та наноструктурах, важливу роль відіграє асимптотично точний метод зв'язаних хвиль (АТМЗХ) [246, 247]. Для прямокутної ґратки за допомогою АТМЗХ можна легко розділити просторові змінні, використовуючи комплексний ряд Фур'є для просторово періодичної частини розв'язку. Розв'язок задачі описується похідними в системі звичайних лінійних диференціальних рівнянь для Фур'є-амплітуд. Розв'язок системи диференціальних рівнянь в результаті може бути записаний у вигляді елементарних функцій матриці, де розв'язки шукаються за допомогою типових операцій лінійної алгебри. Очевидно, виникає запитання, чи розв'язок задачі збігається з достатньою точністю.

#### **2.1.1. Представлення діелектричної проникності в структурах з прямокутним рельєфом**

Спочатку розглянемо задачу дифракції для простої прямокутної ґратки, представлену на рисунку 2.1, що розв'язується за допомогою АТМЗХ. Простота моделі дозволяє більш ясно побачити взаємозв'язок між фізичною моделлю, розділенням змінних, формулюванням алгебраїчних задач і, нарешті, можливі підходи до її ефективного чисельного розв'язку.

В першому середовищі з діелектричною сталою  $\varepsilon_1$  в площині поширюється плоска хвиля під кутом  $\theta_0$  до осі  $z$  на ґратку. Внаслідок дифракції світла на ґратці в першому середовищі поширюються вторинні плоскі хвилі з амплітудами  $r_j$  (відбивання ґратки), а в третьому середовищі з діелектричною сталою  $\varepsilon_3$  поширюються хвилі з амплітудами  $t_j$  (пропускання ґратки).

Діелектрична проникність у другому середовищі залежить від двох змінних  $z$  і  $x$  та є періодичною функцією від  $x$  з періодом  $\Lambda$ .

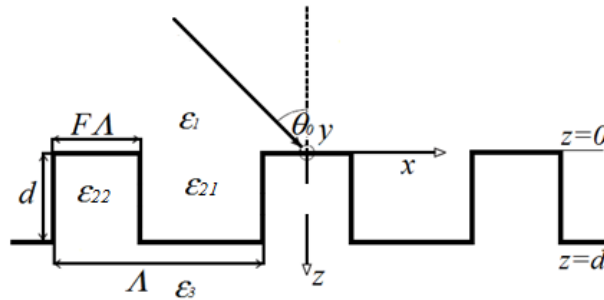


Рис. 2.1. Геометрія плоскої ґратки:  $F$  – фактор заповнення,  $\Lambda$  – період ґратки,  $\epsilon_1$  діелектрична проникливість навколишнього середовища,  $\epsilon_{22}$ ,  $\epsilon_{21}$  – діелектрична проникливість шару з ґраткою,  $\epsilon_3$  – діелектрична проникливість підкладки,  $\theta_0$  – кут падіння плоскої хвилі,  $d$  – товщина ґратки

Далі опишемо метод АТМЗХ і подамо відповідні розв'язки диференціальних рівнянь для ТЕ і ТМ поляризації хвиль, що в основному базуються на роботах [329, 330].

Розглянемо випадок ТЕ поляризації, коли вектор напруженості електричного поля співпадає з напрямом осі  $y$ . Електричне і магнітне поле в середині ґратки можна записати:

$$E(x, z) = \sum_j e_y G_{j,y}(z) \exp(-ik_{j,x}x), \quad (2.1)$$

$$H(x, z) = \sum_j (-e_x F_{j,x}(z) + e_z F_{j,z}(z)) \exp(-ik_{j,x}x), \quad (2.2)$$

де  $e_x, e_y, e_z$  - це одиничні вектори вздовж осей  $Ox, Oy, Oz$  відповідно;  $G_{j,y}(z)$  - електричне поле зв'язаної хвилі з індексом  $j$ ,  $F_{j,x}(z), F_{j,z}(z)$  є  $x$  і  $z$  компоненти магнітного поля зв'язаної хвилі з індексом  $j$ .

Хвильовий вектор  $k_{j,x}$  відноситься до хвильового вектора  $k_{0,x}$  як:

$$k_{j,x} = k_{0,x} - j \frac{2\pi}{\Lambda}, \quad (2.3)$$

де  $k_{0,x} = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\varepsilon_1} \sin \theta_0$ ,  $\theta_0$  – кут падіння плоскої хвилі.

Підставляючи рівняння (2.1) і (2.2) в систему рівнянь Максвелла, використавши рівняння (2.3) та прирівнявши всі коефіцієнти біля експоненти до нуля, отримаємо систему рівнянь зв'язаних хвиль:

$$\begin{cases} \frac{dG_j(z)}{dz} = -ik_0 F_j(z), \\ \frac{dF_j(z)}{dz} = i \frac{k_{j,x}^2}{k_0} G_j - ik_0 \sum_p \|\varepsilon\|_{jp} G_p(z), \end{cases} \quad (2.4)$$

де  $k_0 = 2\pi/\lambda$ ,  $\|\varepsilon\|_{jp} = \begin{vmatrix} \varepsilon_0 & \varepsilon_{-1} & \varepsilon_{-2} \\ \varepsilon_1 & \varepsilon_0 & \varepsilon_{-1} \\ \varepsilon_2 & \varepsilon_1 & \varepsilon_0 \end{vmatrix}$  – матриця Теплиця, що складається з

коефіцієнтів розподілу діелектричної сталої ґратки в комплексний ряд Фур'є.

В загальному випадку ціле число  $j$  змінюється від  $-\infty$  до  $+\infty$ . В конкретному випадку обчислень ми повинні використати скінчену систему рівнянь, тобто беремо до уваги кількість зв'язаних хвиль  $N$  і будемо мати систему рівнянь, що складатиметься з  $2N$  рівнянь. Рівняння (2.4) можна записати в матричній формі:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial G}{\partial z} \\ \frac{\partial F}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & B_1 \\ B_2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G \\ F \end{bmatrix}, \quad (2.5)$$

де  $B_1 = -ik_0 I$ ,  $B_2 = i \frac{1}{k_0} \|k\|_j^2 - ik_0 \|\varepsilon\|_{jp}$ ,  $I$  – одинична матриця,  $\|k\|_j^2$  – діагональна матриця, елементи якої рівні  $k_{jx}^2$ .

Відповідна система диференціальних рівнянь для ТМ поляризації матиме вигляд:

$$\begin{cases} \frac{dG_j(z)}{dz} = -ik_0 F_j(z) + i \frac{k_{j,x}}{k_0} \sum_p \|\varepsilon\|_{jp}^{-1} k_{p,x} F_p(z), \\ \frac{dF_j(z)}{dz} = -ik_0 \sum_p \left\| \frac{1}{\varepsilon} \right\|_{jp}^{-1} G_p(z). \end{cases} \quad (2.6)$$

Рівняння (2.6) може бути записане в матричній формі подібно до випадку ТЕ поляризації:

$$\begin{bmatrix} \frac{dF}{dz} \\ \frac{dG}{dz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{B}_2 \\ \mathbf{B}_1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{F} \\ \mathbf{G} \end{bmatrix}, \quad (2.7)$$

де матриці  $\mathbf{B}_1$  і  $\mathbf{B}_2 \in \mathbf{B}_1 = -ik_0 \mathbf{I} + ik_0^{-1} \mathbf{k}_j \|\varepsilon\|_{jp}^{-1} \mathbf{k}_j$ ,  $\mathbf{B}_2 = -ik_0 \left\| \frac{1}{\varepsilon} \right\|_{jp}^{-1}$ .

Рівняння (2.5) і (2.7) можуть бути записані як система диференціальних рівнянь другого роду:

$$\text{TE: } \frac{\partial^2 \mathbf{G}}{\partial z^2} = \mathbf{B}_1 \mathbf{B}_2 \mathbf{G}, \quad (2.8)$$

$$\text{TM: } \frac{\partial^2 \mathbf{F}}{\partial z^2} = \mathbf{B}_2 \mathbf{B}_1 \mathbf{F}. \quad (2.9)$$

Розв'язки рівнянь (2.8) і (2.9) можна отримати за допомогою матричної алгебри, якщо діелектрична стала ґратки в межах товщини  $d$  не залежить від координати  $z$  і можуть бути представлені як:

$$\begin{aligned} \text{TE: } \mathbf{G}(z) &= \exp(-\mathbf{A}z) \mathbf{C}_1 + \exp(-\mathbf{A}(d-z)) \mathbf{C}_2, \\ \mathbf{F}(z) &= -\mathbf{B}_1^{-1} \mathbf{A} \exp(-\mathbf{A}z) \mathbf{C}_1 + \mathbf{B}_1^{-1} \mathbf{A} \exp(-\mathbf{A}(d-z)) \mathbf{C}_2, \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} \text{TM: } \mathbf{F}(z) &= \exp(-\mathbf{A}z) \mathbf{C}_1 + \exp(-\mathbf{A}(d-z)) \mathbf{C}_2, \\ \mathbf{G}(z) &= -\mathbf{B}_2^{-1} \mathbf{A} \exp(-\mathbf{A}z) \mathbf{C}_1 + \mathbf{B}_2^{-1} \mathbf{A} \exp(-\mathbf{A}(d-z)) \mathbf{C}_2, \end{aligned} \quad (2.11)$$

де  $\exp(\mathbf{A}d) = \mathbf{U} \exp(\mathbf{\Gamma}d) \mathbf{U}^{-1}$ ,  $\mathbf{A} = \mathbf{U} \mathbf{\Gamma} \mathbf{U}^{-1}$ , власні вектори матриці  $\mathbf{B}_1 \mathbf{B}_2$  ( $\mathbf{B}_e$ ) чи  $\mathbf{B}_2 \mathbf{B}_1$  ( $\mathbf{B}_m$ ) формують матрицю  $\mathbf{U}$ , власні значення матриці  $\mathbf{B}_1 \mathbf{B}_2$  (чи  $\mathbf{B}_2 \mathbf{B}_1$ ) є  $\mu_j$

.  $\Gamma$  - це діагональна матриця з елементами  $\sqrt{\mu_j}$ . Коефіцієнти  $C_1, C_2$  є невідомими константами, які визначаються разом з  $r_j$  і  $t_j$ , прирівнюючи тангенціальні складові електричного і магнітного полів на двох границях ( $z = 0$  і  $z = d$ ).

Отримання точного опису поля всередині ґратки є важливим першим кроком в дослідженні дифракції на ґратці. Тим не менш, найбільш очевидною особливістю дифракційної ґратки є поширення відбитого і пройденого світла. Сумарне електричне поле в області 1 є сумою падаючої і відбитої хвиль. Нормоване повне електричне поля в області 1 може бути виражене як:

$$E_1 = \exp(-ik_0 \cdot \mathbf{r}) + \sum_{j=-\infty}^{\infty} r_j \exp(-i\mathbf{k}_{1j} \cdot \mathbf{r}), \quad (2.12)$$

де  $r_j$  – нормована амплітуда  $j$ -ї відбитої хвилі в області 1 з хвильовим вектором  $\mathbf{k}_{1,j}$ . Подібним чином можна виразити нормоване сумарне електричне поле в області 3:

$$E_3 = \sum_{j=-\infty}^{\infty} t_j \exp(-i\mathbf{k}_{3j} \cdot (\mathbf{r} - dz)), \quad (2.13)$$

де  $t_j$  – нормована амплітуда  $j$ -ї пройденної хвилі в області 3 з хвильовим вектором  $\mathbf{k}_{3,j}$ .

Кожне  $j$  поле в областях 1 і 3 повинно бути узгоджене з  $j$ -ю просторовою гармонікою поля всередині ґратки. Таким чином,  $x$  компонента хвильового вектора  $j$ -ї хвилі (області 1 і 3) і  $x$  компонента хвильового вектора  $j$ -ї гармоніки поля (область 2) повинні бути однаковими. Отже:

$$k_{1j} \cdot x = \sigma_j \cdot x = k_{3j} \cdot x \quad (2.14)$$

де  $k_{3j} = k\sqrt{\varepsilon_3}$  і  $k_{1j} = k\sqrt{\varepsilon_1}$ .

Розв'язки цього виразу дають «рівняння ґратки» для назад дифрагованих хвиль:

$$n_1 \sin \theta_{1j} = n_1 \sin \theta_0 - j \left( \frac{\lambda}{\Lambda} \right) \quad (2.15)$$



і вперед дифрагованих хвиль

$$n_3 \sin \theta_{3j} = n_1 \sin \theta_0 - j \left( \frac{\lambda}{\Lambda} \right). \quad (2.16)$$

Кути дифракції поширення дифрагованих порядків визначаються цими рівняннями.

Амплітуди полів в областях 1 і 3 (рисунок 2.1) повинні бути такими, щоб електромагнітні граничні умови з рівнянь Максвелла задовольняли двом граничним умовам ( $z=0$  і  $z=d$ ). Для кожної величини  $j$ , чотири змінних повинні бути узгодженими, це означає, що тангенціальні складові електричного і магнітного полів є неперервними вздовж двох границь.

Граничні умови для хвиль ТЕ поляризації рівні:

$$\begin{aligned} r_j - G_j(0) &= -\delta_{j,0}, \\ \sqrt{\varepsilon_1} \cos \theta_{1,j} r_j - F_j(0) &= \sqrt{\varepsilon_1} \cos \theta_{1,j} \delta_{j,0}, \\ t_j - G_j(d) &= 0, \\ \sqrt{\varepsilon_3} \cos \theta_{3,j} t_j - F_j(d) &= 0, \end{aligned} \quad (2.17)$$

де  $\delta_{j,0}$  - дельта-функція Кронекера,  $r_j$ ,  $t_j$  - амплітуди відбитої і пройденної хвиль відповідно.

Граничні умови для випадку ТМ поляризації можна записати наступним чином:

$$\begin{aligned} \cos \theta_{1,j} r_j - G_j(0) &= \delta_{j,0} \cos \theta_{1,j}, \\ \sqrt{\varepsilon_1} r_j - F_j(0) &= -\sqrt{\varepsilon_1} \delta_{j,0}, \\ \cos \theta_{3,j} t_j - G_j(d) &= 0, \\ \sqrt{\varepsilon_3} t_j - F_j(d) &= 0. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Дифракційна задача практично розв'язана, якщо обчислені амплітуди  $r_j$ ,  $t_j$ .

Таким чином дифракційна ефективність в областях 1 і 3 є:

$$DE_{1j} = \operatorname{Re} \left( r_j (r_j \cos \theta_{1j})^* / \cos \theta_{1j} \right), \quad (2.19)$$

$$DE_{3j} = \operatorname{Re} \left( t_j (t_j n_3 \cos \theta_{3j})^* / (n_1 \cos \theta_{1j}) \right). \quad (2.20)$$

### 2.1.2. Представлення діелектричної проникності в структурах з синусоїдальним рельєфом

Основне векторне наближення для знаходження поля дифракційної рельєфної ґратки полягає у розв'язку рівнянь Максвелла, які зв'язують граничні умови електромагнітного поля в області падіння та передавання випромінювання. Це в основному включає в себе три етапи: поділ ґратки на багато тонких шарів (рис. 2.2); число шарів має бути достатнім, щоб наблизитись до реального профілю ґратки; обмеження внутрішньої області кожного шару точним методом зв'язаних хвиль; відповідність електромагнітних полів на границі між різними шарами і різними середовищами.

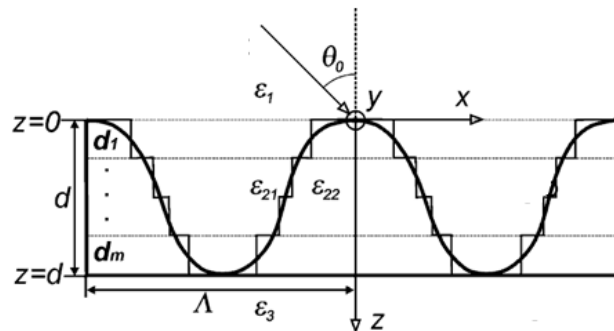


Рис. 2.2 Схема рельєфної ґратки

Розділимо товщину ґратки на  $m$  тонких шарів. У цьому випадку кожний шар має свою окрему товщину. Кількість шарів залежить від функції  $\varepsilon_2(z, x)$ , що описує рельєф ґратки. У кожному шарі відносна діелектрична проникність може бути як завгодно модульована в  $x$ -напрямку, припускаючи, що в напрямку  $z$  вона є постійною.

### 2.1.3. Алгоритм розрахунку оптичних характеристик періодичних структур

Розглянемо випадок ТЕ поляризації на прикладі чисельностейкого S-алгоритму. В локальній системі координат  $z$  змінюється від 0 до  $d_m$  для кожного шару. Використовуючи рівняння (2.10) та (2.11)  $\mathbf{G}_m(0)$ ,  $\mathbf{F}_m(0)$ ,  $\mathbf{G}_m(d_m)$ ,  $\mathbf{F}_m(d_m)$  можна записати в матричній формі:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{G}_m(0) \\ \mathbf{F}_m(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{r}_{11}^{(m)} & \mathbf{r}_{12}^{(m)} \\ \mathbf{r}_{21}^{(m)} & \mathbf{r}_{22}^{(m)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1^{(m)} \\ \mathbf{C}_2^{(m)} \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{G}_m(d_m) \\ \mathbf{F}_m(d_m) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{t}_{11}^{(m)} & \mathbf{t}_{12}^{(m)} \\ \mathbf{t}_{21}^{(m)} & \mathbf{t}_{22}^{(m)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1^{(m)} \\ \mathbf{C}_2^{(m)} \end{pmatrix}, \quad (2.22)$$

Де субматриці  $\mathbf{r}_{ij}^{(m)}$  і  $\mathbf{t}_{ij}^{(m)}$  визначаються рівняннями (2.10) та (2.11). Для першого шару рівняння (2.21) та (2.22) в  $\mathbf{R}_{ij}^{(1)}$  і  $\mathbf{T}_{ij}^{(1)}$  матимуть вигляд:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{G}_1(0) \\ \mathbf{F}_1(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{11}^{(1)} & \mathbf{R}_{12}^{(1)} \\ \mathbf{R}_{21}^{(1)} & \mathbf{R}_{22}^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1^{(1)} \\ \mathbf{C}_2^{(1)} \end{pmatrix}, \quad (2.23)$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{G}_1(d_1) \\ \mathbf{F}_1(d_1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{T}_{11}^{(1)} & \mathbf{T}_{12}^{(1)} \\ \mathbf{T}_{21}^{(1)} & \mathbf{T}_{22}^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1^{(1)} \\ \mathbf{C}_2^{(1)} \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Інтенсивність поля для багат шарової структури в рівняннях (2.10) та (2.11) при  $z=0$  і  $z=d$  представляється лише як  $\exp(-\mathbf{A}d)$  і  $\exp(-\mathbf{A}_m d_m)$ . Це представлення забезпечує стабільність розв'язку алгоритму, на противагу представлення поля у вигляді  $\exp(\mathbf{A}d)$  і  $\exp(-\mathbf{A}_m d_m)$  [252]. Власні значення матриці можуть бути досить великими і максимальне власне значення за абсолютною величиною зростає із збільшенням кількості зв'язаних хвиль, враховуючи, що значення власних значень матриць  $\exp(\mathbf{A}d)$  і  $\exp(-\mathbf{A}_m d_m)$  змінюються в широкому діапазоні. У зв'язку з цим, нестабільність з'являється в розрахунках і вона зростає з розмірністю системи рівнянь. Суть S-алгоритму полягає в тому, що напруженості поля при  $z=0$  і  $z=d$  представлені тільки як  $\exp(-\mathbf{A}d)$  і в розрахунках немає матриці інверсії  $\exp(\mathbf{A}d)$ .

Щоб зробити алгоритм стабільним необхідно виразити  $\mathbf{G}_1(0)$ ,  $\mathbf{G}_m(d_m)$ ,  $\mathbf{F}_1(0)$ ,  $\mathbf{F}_m(d_m)$  наступним чином [331]:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{G}_1(0) \\ \mathbf{F}_1(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{11}^{(m)} & \mathbf{R}_{12}^{(m)} \\ \mathbf{R}_{21}^{(m)} & \mathbf{R}_{22}^{(m)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1^{(1)} \\ \mathbf{C}_2^{(1)} \end{pmatrix}, \quad (2.25)$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{G}_m(d_m) \\ \mathbf{F}_m(d_m) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{T}_{11}^{(m)} & \mathbf{T}_{12}^{(m)} \\ \mathbf{T}_{21}^{(m)} & \mathbf{T}_{22}^{(m)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1^{(1)} \\ \mathbf{C}_2^{(1)} \end{pmatrix}. \quad (2.26)$$

Рівняння (2.25) і (2.26) можна отримати з умови, що тангенціальні електричні і магнітні поля повинні бути неперервними вздовж граничних умов двох шарів:

$$\mathbf{G}_m(d_m) = \mathbf{G}_{m+1}(0), \mathbf{F}_m(d_m) = \mathbf{F}_{m+1}(0). \quad (2.27)$$

Використовуючи (2.27)  $\mathbf{C}_1^{(2)}$  і  $\mathbf{C}_2^{(2)}$  можна виразити через  $\mathbf{C}_1^{(1)}$  і  $\mathbf{C}_2^{(1)}$  з матрицею  $\mathbf{S}^{(12)}$ :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{C}_2^{(1)} \\ \mathbf{C}_1^{(2)} \end{pmatrix} = \mathbf{S}^{(12)} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1^{(1)} \\ \mathbf{C}_2^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11}^{(12)} & \mathbf{S}_{12}^{(12)} \\ \mathbf{S}_{21}^{(12)} & \mathbf{S}_{22}^{(12)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1^{(1)} \\ \mathbf{C}_2^{(2)} \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

де матриця  $\mathbf{S}^{(12)}$  визначається субматрицями  $\mathbf{T}_{ij}^{(1)}$  і  $\mathbf{r}_{ij}^{(2)}$

$$\mathbf{S}^{(12)} = \begin{pmatrix} \mathbf{T}_{12}^{(1)} & -\mathbf{r}_{11}^{(2)} \\ \mathbf{T}_{22}^{(1)} & -\mathbf{r}_{21}^{(2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\mathbf{T}_{11}^{(1)} & \mathbf{r}_{12}^{(2)} \\ -\mathbf{T}_{21}^{(1)} & \mathbf{r}_{22}^{(2)} \end{pmatrix}. \quad (2.29)$$

Підставляючи рівняння (2.28) в рівняння (2.23) та (2.24) для  $m = 2$  можна записати:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \mathbf{G}_1(0) \\ \mathbf{F}_1(0) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{11}^{(1)} + \mathbf{R}_{12}^{(1)}\mathbf{S}_{11}^{(12)} & \mathbf{R}_{12}^{(1)}\mathbf{S}_{12}^{(12)} \\ \mathbf{R}_{21}^{(1)} + \mathbf{R}_{22}^{(1)}\mathbf{S}_{11}^{(12)} & \mathbf{R}_{22}^{(1)}\mathbf{S}_{12}^{(12)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1^{(1)} \\ \mathbf{C}_2^{(2)} \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{11}^{(12)} & \mathbf{R}_{12}^{(12)} \\ \mathbf{R}_{21}^{(12)} & \mathbf{R}_{22}^{(12)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1^{(1)} \\ \mathbf{C}_2^{(2)} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.30)$$

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \mathbf{G}_2(d_2) \\ \mathbf{F}_2(d_2) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \mathbf{t}_{11}^{(2)}\mathbf{S}_{21}^{(12)} & \mathbf{t}_{12}^{(2)} + \mathbf{t}_{11}^{(2)}\mathbf{S}_{22}^{(12)} \\ \mathbf{t}_{21}^{(2)}\mathbf{S}_{21}^{(12)} & \mathbf{t}_{22}^{(2)} + \mathbf{t}_{11}^{(2)}\mathbf{S}_{21}^{(12)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1^{(1)} \\ \mathbf{C}_2^{(2)} \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{T}_{11}^{(12)} & \mathbf{T}_{12}^{(12)} \\ \mathbf{T}_{21}^{(12)} & \mathbf{T}_{22}^{(12)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1^{(1)} \\ \mathbf{C}_2^{(2)} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Відповідно, використовуючи рівняння (2.27) і беручи до уваги (2.28) для  $m = 2$   $\mathbf{C}_2^{(2)}$  і  $\mathbf{C}_3^{(1)}$ , можна виразити через  $\mathbf{C}_1^{(1)}$  і  $\mathbf{C}_3^{(2)}$  та матрицею  $\mathbf{S}^{(12)}$ . Ця матриця визначається рівнянням (2.29), але верхні індекси зростуть на одиницю. Крім того  $\mathbf{G}_1(0)$ ,  $\mathbf{G}_3(d_3)$   $\mathbf{F}_1(0)$  і  $\mathbf{F}_3(d_3)$  визначаються через  $\mathbf{C}_1^{(1)}$  і  $\mathbf{C}_3^{(2)}$  з рівняння (2.30) і (2.31). Відповідно, верхній індекс зростає на одиницю. Виконуючи таке перетворення  $m - 1$  раз ми отримаємо рівняння (2.25) та (2.26), крім того верхній індекс можна опустити і записати:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{G}(0) \\ \mathbf{F}(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{11} & \mathbf{R}_{12} \\ \mathbf{R}_{21} & \mathbf{R}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1 \\ \mathbf{C}_2 \end{pmatrix}, \quad (2.32)$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{G}(d) \\ \mathbf{F}(d) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{T}_{11} & \mathbf{T}_{12} \\ \mathbf{T}_{21} & \mathbf{T}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1 \\ \mathbf{C}_2 \end{pmatrix}. \quad (2.33)$$

Розрахунки для випадку ТМ поляризації виконуються аналогічно до наведеного розрахунку для ТЕ поляризації. А амплітуди дифрагованих порядків в першому і третьому однорідних середовищах визначаються при використанні системи алгебраїчних рівнянь (2.32) та (2.33), разом з системою рівнянь (2.17) та (2.18), що описують граничні умови для ТЕ і ТМ поляризацій відповідно. Отже, дифракційна ефективність відповідних дифракційних порядків обчислюється за допомогою рівнянь (2.19) та (2.20).

#### **2.1.4 Порівняння результатів моделювання та експериментальних даних**

Виходячи з підходу, представленого вище, була розроблена та протестована комп'ютерна програма. По-перше, чисельні результати, отримані з використанням запропонованої програми, порівнювалися з трьома результатами, отриманими з літератури. По-друге, вони були використані для моделювання реальної структури, а отримані результати порівнювалися з експериментальними даними. Вибір ґраток є довільним і охоплює найбільш поширені рельєфи.

Збіжність запропонованої чисельної реалізації алгоритму S-матриці була перевірена для прямокутної золотої ґратки з параметрами, представленими у [332]. Такого типу ґратка часто використовується як модель для тестування точності розрахунку дифракційної ефективності запропонованого алгоритму. На рис. 2.3 представлені залежності дифракційної ефективності нульового та першого порядків дифракції від числа зв'язаних хвиль для прямокутної золотої ґратки.

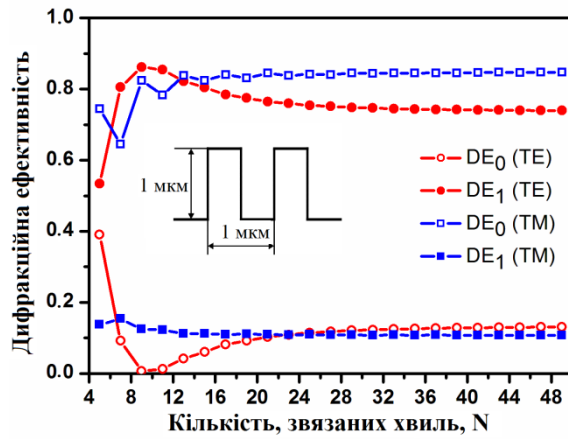


Рис. 2.3. Залежність дифракційної ефективності від кількості зв'язаних хвиль. Кільця та квадрати відповідають дифракційній ефективності нульового порядку та перших порядків для металеві прямокутної ґратки, де період ґратки рівний її глибині, для ТЕ і ТМ поляризацій

Коефіцієнт заповнення ґратки, що використовується в розрахунках становить 0,5; діелектрична проникність навколишнього середовища 1.0; кут падіння становить  $30^\circ$ ; період ґратки становить 1 мкм, що дорівнює довжині падаючої хвилі та глибині ґратки. Комплексний показник заломлення золота на довжині хвилі 1 мкм використано з роботи [332]. Результати показали, що використання 20 і більше зв'язаних хвиль забезпечує хорошу збіжність для ТЕ та ТМ поляризацій.

Залежність пропускання та відбивання для ґратки з вузькими щілинами наведені на рис. 2.4. У розрахунках було прийнято, що підкладка виготовлена із звичайного скла ВК7 з показником заломлення 1,53. Коефіцієнт заломлення золота використано з роботи [333]. Період та коефіцієнт заповнення ґратки рівні 140 нм та 0,4 відповідно; глибина ґратки рівна 450 нм [334]. З рисунка добре видно, що розраховані спектри відбивання та пропускання відповідають результатам, наведеним у [334].

На рис. 2.5 результати моделювання порівняно з результатами, отриманими за допомогою С-методу та аналітичної моделі, представленої в роботі [335] для синусоїдальної золотої ґратки.

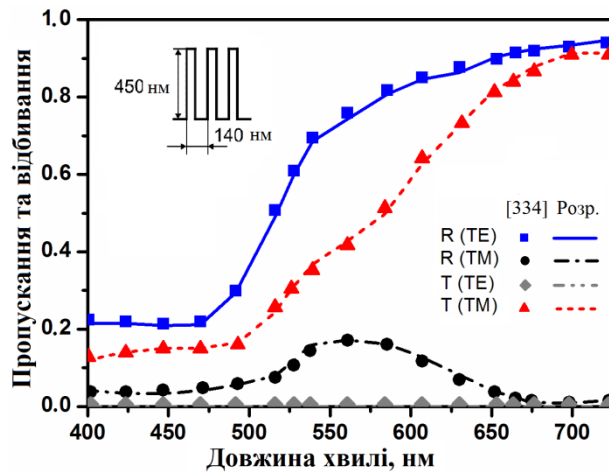


Рис. 2.4. Залежність пропускання (Т) та відбивання (R) дифракційної ґратки з вузькими щілинами від довжини хвилі для ТЕ та ТМ поляризацій: символи – це дані з роботи [334], лінії – це дані, розраховані запропонованим методом.

Період ґратки рівний 1200 нм; показник заломлення золота використано з роботи [335]; глибина ґратки 5 нм; робоча довжина хвилі 1 мкм. Ґратку синусоїдального профілю в наших розрахунках розділено на 40 шарів, що забезпечує високу точність і не великий час моделювання. На рис. 2.5 можна чітко побачити, що розрахована величина піку узгоджується з результатами роботи [335], а мінімум відбивання спостерігається при куті падіння променя близько  $10,3^\circ$ .

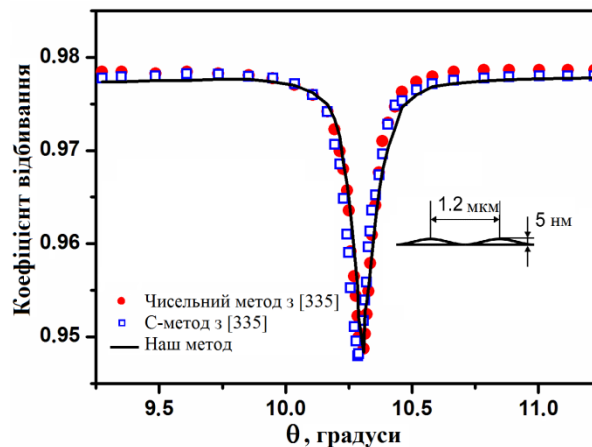


Рис. 2.5. Залежність відбивання від кута падіння для синусоїдальної ґратки із золота: кільця та квадрати – це дані з роботи [335], лінія – це дані, розраховані запропонованим методом.

На рис. 2.6 представлено порівняння теоретично розрахованих та експериментально отриманих спектрів пропускання та відбивання трапецеподібної дифракційної ґратки. Ґратка виготовлена з плавненого кремнезему, показник якого розраховано за допомогою рівнянь дисперсії [336]. Глибина ґратки рівна 451 нм, період 2000 нм, кут падіння променя рівний  $13^\circ$ . Структура виготовлена з використанням стандартної контактної оптичної літографії та сухого травлення в газах  $\text{CF}_4/\text{O}_2$ . Спектри пропускання та відбивання отримано з використанням колімованого білого світла, що випромінюється лампою розжарювання, і збирається з використанням ПЗЗ-спектрометра.

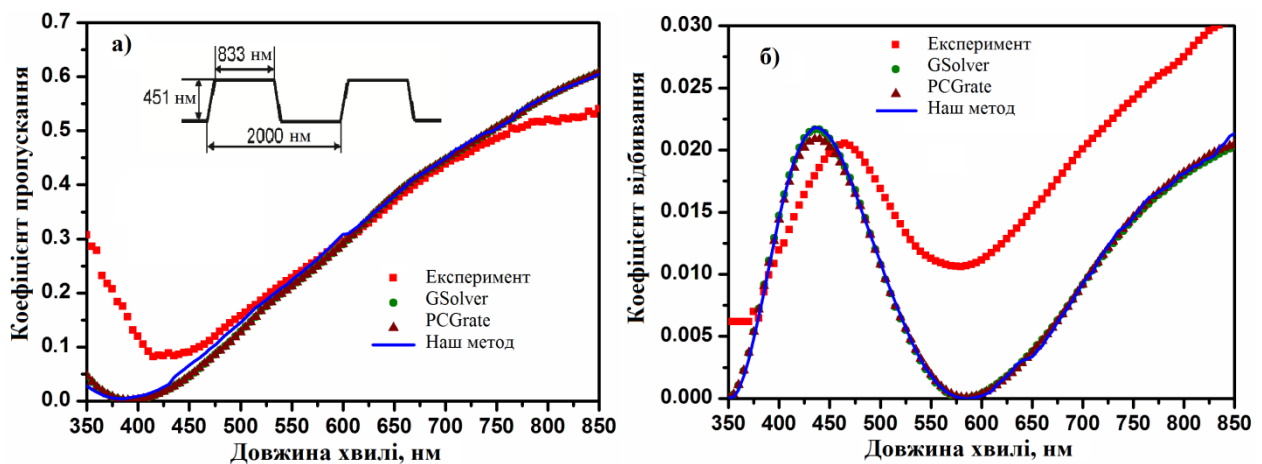


Рис. 2.6. Експериментальні та теоретично розраховані спектри пропускання (а) та відбивання (б) як функція довжини хвилі для ґратки трапецеподібного рельєфу (див. вставку на рис. 2.6а). Точки представляють експериментальні дані та дані моделювання з використанням комерційного програмного забезпечення (GSolver, PCGrate); суцільна лінія представляє дані моделювання отримані за запропонованим вище методом

Теоретично розраховане пропускання (рис. 2.6(а)) та відбивання (рис. 2.6(б)) за допомогою запропонованого методу демонструють 95,69% та 78,91% збіжності з експериментальними даними, тоді як комерційне програмне забезпечення дає 95,63% для GSolver і 95,62% і 78,90% для PCGrate. Ґратка



трапецеподібного профілю у наших розрахунках була апроксимована 30 шарами. Основною причиною різниці між теоретичними і експериментальними результатами є неідеальність виготовлення трапецеподібної ґратки, оскільки представлений тут підхід передбачає, що ґратка має ідеальну форму і всі інтерфейси є ідентичними.

Отже, математичне формулювання точної системи рівнянь зв'язаних хвиль та алгоритму S-матриці детально представлені та адаптовані до простої матричної форми для використання на сучасній мові програмування [337]. Для цього було отримано набір матричних зв'язків, що забезпечило стабільний алгоритм для обчислення пропускання та відбивання. Запропонований алгоритм моделювання був реалізований у стандартному математичному програмному забезпеченні. Дані моделювання порівнювалися з результатами інших комерційно доступних програм моделювання та відомих алгоритмів, які найчастіше використовуються для аналізу періодичних мікро- та наноструктур.

## **2.2. Точність аналізу оптичної дифракції на прикладі періодичних структур**

Оскільки для отримання розв'язку RCWA проводять обрізання нескінченно вимірної системи диференціальних рівнянь до розмірності  $N$ , тобто такої величини, за якої можна отримати числовий розв'язок задовільної точності, виникає питання точності аналізу оптичної дифракції на ґратках.

Проблемі точності аналізу оптичної дифракції методом зв'язаних хвиль присвячено відносно невелике число робіт, серед яких можна відзначити [113,338]. Так у [248] приведено твердження без якогось теоретичного доведення чи як наслідку числових експериментів, що похибка аналізу для хвиль

TE поляризації пропорційна  $O\left(\frac{1}{N^3}\right)$ , відповідно, для хвиль TM поляризації

$O\left(\frac{1}{N^2}\right)$ . В роботі [339] наведено детальне обґрунтування оцінки точності

аналізу для різних типів ґраток в надвисокочастотному діапазоні. Якщо ці

оцінки можна використати для оптичної дифракції на діелектричних ґратках, то для металевих ґраток в оптичному діапазоні потрібно провести додаткові числові експерименти, оскільки діелектричні проникності металу в оптичному та в НВЧ діапазонах суттєво якісно та кількісно відрізняються. В роботі [113] вказано без всякого теоретичного чи експериментального (числові експерименти) обґрунтування, що для отримання задовільної точності аналізу дифракції на металевій ґратці зі щілинами, в якій може виникнути аномально-високе пропускання, достатньо використати 150 – 200 зв'язаних хвиль.

Але з усіх літературних джерел випливає, що при збільшенні числа використаних зв'язаних хвиль розв'язок асимптотично прямує до точного розв'язку, або іншими словами, прямує до постійної величини [339, 113]. Враховуючи, що час аналізу швидко зростає нелінійно зі збільшенням  $N$  [335], визначення необхідної кількості зв'язаних хвиль для досягнення заданої точності є важливою задачею.

Найпростіше оцінку точності числового аналізу можна здійснити за величиною дифракційної ефективності того чи іншого порядку дифракції на ґратці в залежності від кількості врахованих при аналізі зв'язаних хвиль. Проте, на наш погляд, більш фундаментально оцінити точність аналізу можна за залежностями розподілу поля в ґратці від числа  $N$ . Але такий підхід досить складний, і для більшості практичних ситуацій достатньо знати, як прямує до точного значення дифракційна ефективність нижчих порядків дифракції. Оцінку точності також можна одержати на основі залежності власних чисел  $\mu$  чи  $-i\sqrt{\mu}$  матриць  $\mathbf{V}_e$  та  $\mathbf{V}_m$  від кількості зв'язаних хвиль, використаних при аналізі. Особливо така оцінка зручна для дифракції хвиль на металевих ґратках з вузькими щілинами.

Можна припустити, що значення дифракційної ефективності може бути різним для різних типів ґраток: металеві ґратки з діелектричними щілинами, в яких можуть виникати резонансні явища, рельєфні діелектричні ґратки, в яких діелектрична проникність в залежності від координати  $x$  описується періодичною функцією зі скінченими розривами, та діелектричні ґратки, в яких

діелектрична стала залежить неперервно від  $x$  (наприклад, об'ємні голографічні ґратки). Слід також допустити, що по різному може прямувати дифракційна ефективність до точного значення в залежності від числа зв'язаних хвиль  $N$  при дифракції хвиль різної поляризації. Це зв'язано з тим, що коли залежність діелектричної проникності ґратки має розрив, то складова напруженості поля в ґратці, яка паралельна до межі однорідного і неоднорідного середовищ, для хвиль ТМ поляризації матиме також розрив, і цей розрив відсутній для дифракції хвиль ТЕ поляризації на такій же ґратці.

Отже, є необхідним проведення дослідження збіжності числового аналізу дифракції оптичних хвиль на деяких типах дифракційних ґраток методом зв'язаних хвиль. Слід зауважити, що в наших числових експериментах при усіх розрахунках контролювався закон збереження енергії. Показано, що в методи зв'язаних хвиль для ґраток без втрат, незалежно від кількості використаних зв'язаних хвиль, сума коефіцієнтів відбивання та пропускання рівна одиниці [338]. В наших числових експериментах для діелектричних ґраток завжди контролювалась сума всіх дифракційних ефективностей і її відхилення від одиниці за рахунок заокруглень числового процесу було менше ніж  $10^{-6}$  [340]. Для металевих ґраток перевірка на закон збереження енергії проводилась при нехтуванні уявної частини діелектричної проникності металу  $U$  цьому випадку втрати у ґратці відсутні. Перед аналізом металевих ґраток з втратами налаштування комп'ютерної програми проводилось так, щоб при нульовій уявній частині проникності сума всіх дифракційних ефективностей відрізнялась від одиниці менше ніж на  $10^{-6}$  [341].

### **2.2.1. Точність аналізу оптичної дифракції на металевих ґратках.**

Спочатку наведемо результати дослідження металевої ґратки з вузькими щілинами постійної ширини, яка відображена на рис. 2.7. Така ґратка при певних умовах може мати аномально-високе пропускання, навіть якщо ширина щілини  $a$  набагато менша періоду  $\Lambda$ , яка в свою чергу повинна бути меншою за довжину хвилі  $\lambda$ .

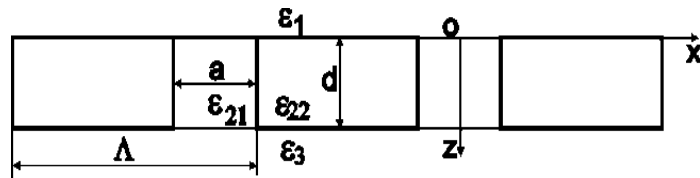


Рис. 2.7 Металева ґратка з вузькими щілинами

Діелектричні проникності першого та третього однорідних середовищ рівні 1 і позначаються  $\epsilon_1$  та  $\epsilon_3$  відповідно. Діелектрична проникність матеріалу  $\epsilon_{21}$ , що заповнює щілину, рівна 1 та 9 для хвиль ТМ та ТЕ поляризації відповідно. Ширина щілини  $a$  рівна 0,26 мкм для ТЕ поляризації і 0,143 мкм для ТМ поляризації. Період ґратки складає 1,0 мкм. Аналіз проводився для  $\lambda = 1.5$  мкм та  $\Lambda = 1.0$  мкм.

Спектральна залежність діелектричної проникності металу (срібло) визначалась аналітичним виразом, представленим в роботі [113] і на довжині хвилі  $\lambda = 1.5$  мкм рівна  $-117650 + i2,966$ .

Розрахункові залежності коефіцієнта пропускання від використаного числа зв'язаних хвиль  $N$  представлено на рис. 2.8. Товщина ґратки для ТЕ поляризації рівна 0,17 мкм, а для ТМ поляризації рівна 0,44 мкм. Товщини ґраток для обох випадків поляризації підібрані таким чином, що поширення енергії через щілини проходить в режимі близькому до резонансу, що забезпечує достатньо високий коефіцієнт пропускання ґраток, 0,532 і 0,539 для хвиль ТЕ та ТМ поляризацій, відповідно. В даному випадку під коефіцієнтом пропускання  $T$  розуміємо відношення інтенсивності плоскої хвилі, що пройшла через ґратку до інтенсивності плоскої хвилі, що падає на ґратку. Для цих числових експериментів падіння плоскої хвилі на ґратку є нормальним.

Для хвиль ТЕ поляризації розрахункові точки добре лягають на апроксимаційну криву у відповідності до аналітичного виразу  $T(N) - T(\infty) = 733/N^3$ .

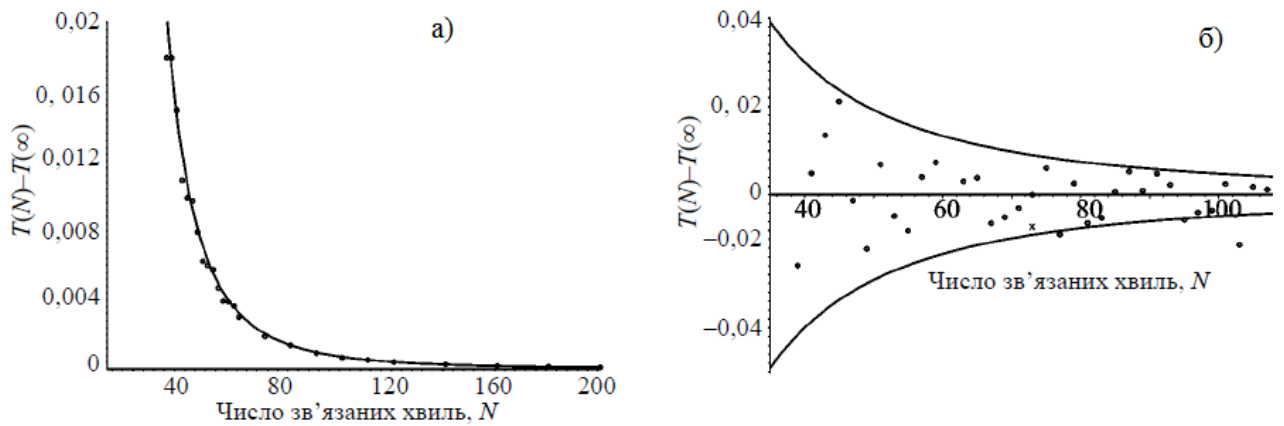


Рис. 2.8 Залежність різниці коефіцієнтів пропускання  $T(N) - T(\infty)$  металеві гратки від числа  $N$  врахованих зв'язаних хвиль: точки – це результат розрахунку, неперервні криві – це апроксимаційні криві, а) ТЕ поляризація, б) ТМ поляризація

Для хвиль ТМ поляризації ситуація складніша, і криві аналогічних залежностей мають дещо інший вигляд. Майже всі розрахункові точки розміщуються між апроксимаційними кривими, які описуються такими аналітичними виразами:  $T(N) - T(\infty) = \pm 54/N^2$ . Проте бачимо, що деякі точки виходять за межі цих кривих. Це можна пояснити тим, що для хвиль ТМ поляризації серед власних значень матриці  $\mathbf{V}_m$  є такі, що  $\beta = -i\sqrt{\mu}$  є комплексним числом з достатньо великою дійсною частиною та малою уявною частиною (наприклад, при наших даних  $-i\sqrt{\mu} = 67,4 - i0,878$  мкм<sup>-1</sup> при  $N = 99$ ), причому ця постійна поширення дещо різко міняється при збільшенні  $N$  на одиницю, і для деяких  $N$  може виникнути „неправдивий резонанс” в щіліні гратки, що призводить до різкої зміни коефіцієнта пропускання. Така ситуація виникає для  $N = 103$ , внаслідок чого розрахункова точка випадає за границі обмежувачих кривих. Вплив "неправдивого резонансу" при числовому аналізі в щіліні суттєво зменшується за рахунок відносно великої уявної частини даної постійної поширення, якщо значно збільшити товщину гратки, наприклад, до 10,3 мкм, залишаючи решту параметрів періодичної структури без змін. Для цієї товщини коефіцієнт пропускання  $T(\infty) = 0,563$ . Розподіл розрахункових точок в

залежності від  $N$  вже має більш регулярний характер, що демонструє рис. 2.9. Причому, розміщення точок відносно кривої, яка описується функцією  $0,563 - 433/N^3$ , має осцилюючий характер, а величина осциляцій зменшується з ростом  $N$ , і криві, які обмежують осциляції для даної конкретної ґратки, описуються виразом:  $0,563 \pm 45,4/N^2$ . Причому, період осциляцій складає 14. Це пов'язано з тим, що відношення ширини щілини  $a = 0,143$  мкм до періоду ґратки  $\Lambda = 1$  мкм складає  $1/7$  і, отже, сім послідовних коефіцієнтів ряду Фур'є розкладу діелектричної сталої мають один знак, а наступні члени мають протилежний знак.

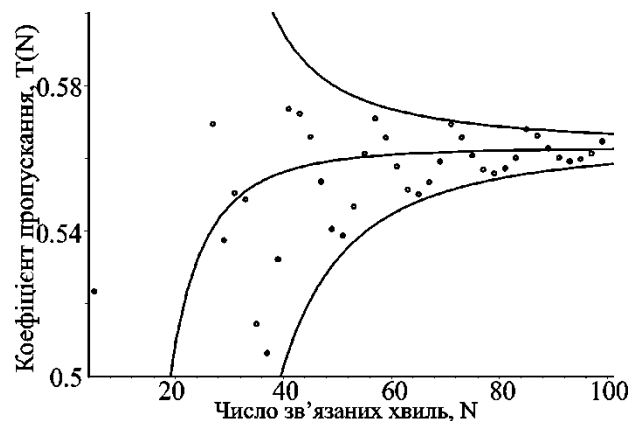


Рис. 2.9. Залежність коефіцієнта пропускання  $T(N)$  металеві ґратки від числа  $N$  врахованих зв'язаних хвиль для хвиль ТМ поляризації, товщина ґратки 10,3 мкм: точки – це результат розрахунку, неперервна крива – це апроксимаційна крива

По різному себе поведуть постійні поширення  $\beta = -i\sqrt{\mu}$  для обох поляризацій, які відповідальні за високе проходження енергії через щілину ґратки, в залежності від  $N$ . Параметри ґраток підбрані таким чином, що лише одна постійна поширення (для кожної поляризації) має дуже малу уявну частину, що забезпечує низьке поглинання в щілині. Слід зауважити, що  $\beta(\infty)$  можна досить точно визначити незалежно на основі хвильового ефекту в планарному хвильоводі [342], який складається з діелектричного шару товщиною  $a$  між плоскими металевими поверхнями. На рис. 2.10 наведені ці залежності. Бачимо, що  $\text{Re}[\beta(N)]$  для обох поляризацій міняється подібним чином, як і

коефіцієнт пропускання від  $N$ . Для ТЕ поляризації  $\text{Re}[\beta(N)]$  з ростом  $N$  монотонно прямує до  $\text{Re}[\beta(N)]$  згідно аналітичного виразу  $\text{Re}[\beta(N)] = 7,09 - 869/N^3$ . Для ТМ поляризації  $\text{Re}[\beta(N)]$  осцилює між двома кривими у відповідності до виразу  $4,799 \pm 329/N^3$ .

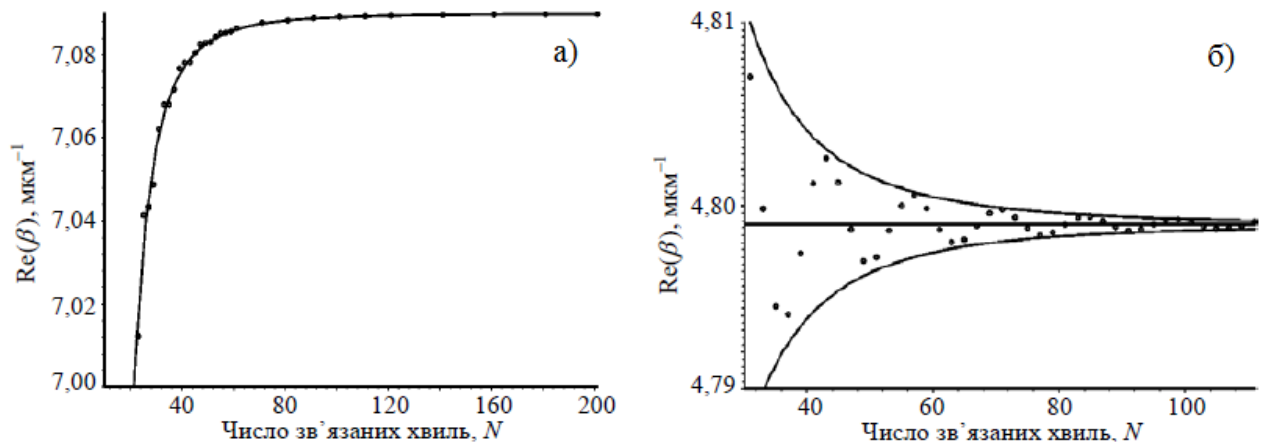


Рис. 2.10 Залежність дійсної частини постійної поширення  $\beta$  металевої ґратки від числа  $N$  врахованих зв'язаних хвиль: точки – це результат розрахунку, неперервні криві – це апроксимаційні криві, а) ТЕ поляризація, б) ТМ поляризація

Аналогічним чином поведуться уявні частини постійних поширення для обох поляризацій. Ці залежності  $\text{Im}[\beta(N)]$  представлені на рис. 2.11.

Для ТЕ поляризації  $\text{Im}[\beta(N)]$  з ростом  $N$  монотонно прямує до  $\text{Im}[\beta(\infty)]$  у відповідності до виразу  $\text{Im}[\beta(N)] = 0,02552 - 25,87/N^3$ . Для ТМ поляризації  $\text{Im}[\beta(N)]$  осцилює між двома кривими, що описуються формулами  $0,00736 \pm 3,488/N^3$ . Знову ж таки період осциляцій рівний 14.

Отже з числових експериментів для даної ґратки при наявності резонансу можна зробити висновок, що для хвиль ТЕ поляризації достатньо використати 100 зв'язаних хвиль для досягнення точності  $|T(N) - T(\infty)| < 0,001$ . Для досягнення цієї ж точності у випадку хвиль ТМ поляризації необхідно

використовувати при аналізі значно більше зв'язаних хвиль, і як впливає з виразу  $T(N) - T(\infty) = \pm 54/N^2$ , число  $N$  повинно бути близько 200 [341].

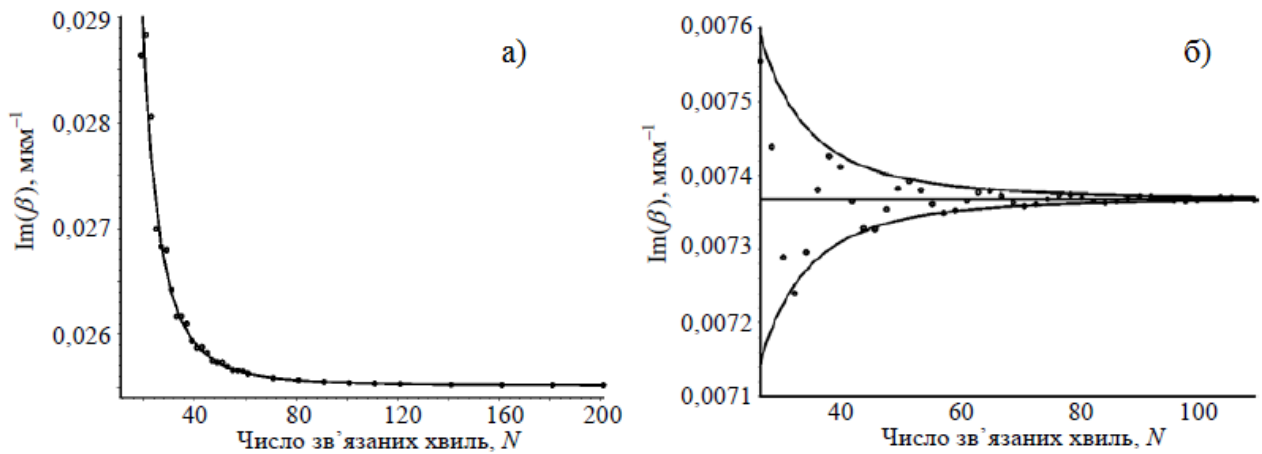


Рис. 2.11 Залежність уявної частини постійної поширення  $\beta$  металевій ґратки від числа  $N$  врахованих зв'язаних хвиль: точки – це результат розрахунку, неперервні криві – це апроксимаційні криві, а) ТЕ поляризація, б) ТМ поляризація

Якщо в металевій ґратці з прямокутнім рельєфом на металевій підкладці відсутній резонанс, то достатньо взяти 50 зв'язаних хвиль для досягнення високої точності  $|\eta_{11}(N) - \eta_{11}(\infty)| < 0,001$  [343, 344], причому для обох поляризацій. Тут  $\eta_{11}$  це дифракційна ефективність ґратки на відбивання в перший порядок дифракції.

### 2.2.2. Точність аналізу оптичної дифракції на діелектричних ґратках

Для оцінки точності числового аналізу дифракції на прямокутній діелектричній ґратці вибрана структура з такими параметрами:  $\lambda = \Lambda = 1$  мкм,  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_{21} = 1$ ,  $\varepsilon_{22} = 9$ , коефіцієнт заповнення ґратки  $F = 0,5$ , причому  $F = (\Lambda - a)/\Lambda$  у відповідності до рис. 2.7, кут падіння плоскої хвилі на ґратку рівний  $\pi/6$ , де кут відраховується від осі  $z$  проти стрілки годинника. При такому куті виконуються умови Брегга першого порядку. Товщина ґратки для хвиль ТЕ поляризації складала  $d = 2,5$  мкм, причому дифракційна ефективність першого



порядку на пропускання рівна 0,2105. Товщина ґратки для аналізу дифракції хвиль ТМ поляризації рівна  $d = 2,9$  мкм, а дифракційна ефективність першого порядку на пропускання складала 0,7870.

На рис. 2.12 представлені розрахункові залежності різниці  $T(N) - T(\infty)$  від використаного числа зв'язаних хвиль  $N$  при чисельному аналізі. Тут  $T(N)$  є дифракційною ефективністю на пропускання першого порядку дифракції. На рис. 2.12 кола відповідають непарній кількості використаних зв'язаних хвиль при розрахунку, а квадратики парній кількості. Можна зауважити, що апроксимаційні криві типу  $T(N) - T(\infty) = A/N^3$  добре лягають на кола, причому для обох поляризацій. Коефіцієнти  $A$  відповідно рівні 2,4 для ТЕ поляризації та 166 для ТМ поляризації.

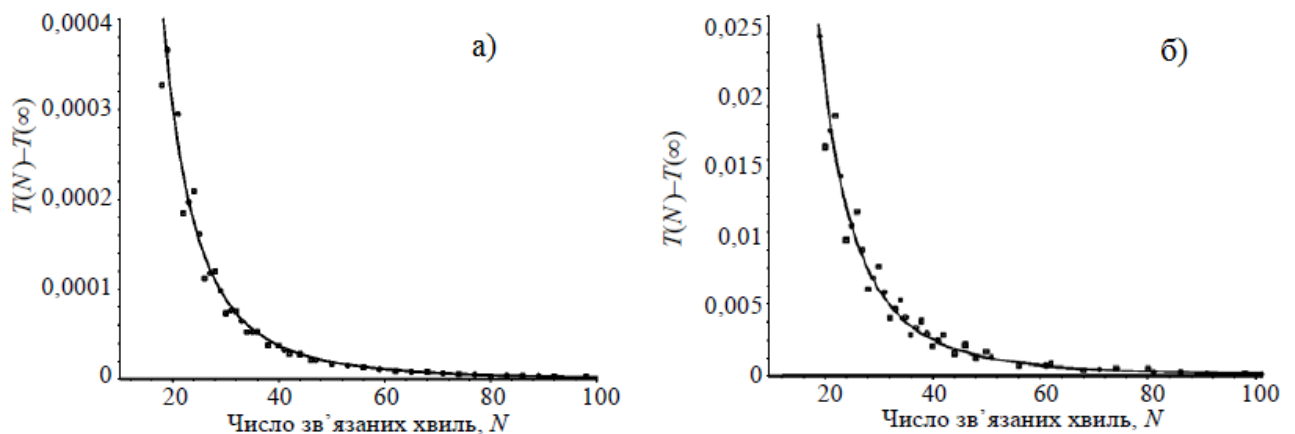


Рис. 2.12 Залежність різниці дифракційних ефективностей діелектричної ґратки від числа  $N$  врахованих зв'язаних хвиль: точки – це результат розрахунку, неперервні криві – це апроксимаційні криві, а) ТЕ поляризація, б) ТМ поляризація.

Для парної кількості зв'язаних хвиль (квадратики) маємо невелике відхилення від апроксимаційних кривих типу  $T(N) - T(\infty) = A/N^3$ , але це відхилення швидко зменшується з ростом  $N$ . Ці відхилення також пояснюються зміною знаку коефіцієнтів розкладу діелектричної сталої матеріалу ґратки при зміні  $N$ , оскільки коефіцієнт заповнення ґратки  $F$  рівний 0,5, відповідно період

зміни знаків рівній 4. Можна допустити, що відхилення розрахункових точок від апроксимаційних кривих типу  $T(N) - T(\infty) = A/N^3$  (причому більший для хвиль ТМ поляризації ніж для хвиль ТЕ поляризації) можна пояснити великим стрибком діелектричної сталої на періоді прямокутної ґратки. Причому, цей стрибок дуже великий для металевих ґраток, що приводить до похибки обчислення типу  $O(1/N^2)$  для хвиль ТМ поляризації.

Отже, для діелектричних ґраток можна взяти 50 зв'язаних хвиль для досягнення задовільної точності, що впливає з виразу  $T(N) - T(\infty) = A/N^3$ .

Таким чином, можна підвести підсумки і константувати, що для металевих ґраток з вузькими щілинами (прямокутний рельєф) у випадку дифракції хвиль ТЕ поляризації за наявності резонансу залежність пропускання від кількості використаних зв'язаних хвиль монотонно прямує до певного значення з похибкою  $O\left(\frac{1}{N^3}\right)$ , а для хвиль ТМ поляризації – з похибкою, яка осцилює відносно асимптотичного значення в межах  $\pm O\left(\frac{1}{N^2}\right)$ . Похибки в коефіцієнті пропускання при використанні 101 зв'язані хвилі складає менше ніж 0.001 для хвиль ТЕ поляризації і 0.005 для ТМ поляризації. Якщо маємо прямокутну діелектричну рельєфну ґратку, то похибка для обох поляризацій монотонно зменшується згідно виразу  $O\left(\frac{1}{N^3}\right)$ , проте наявні деякі незначні відхилення від цієї кривої. Похибки обчислення при  $N = 101$  для хвиль ТЕ і ТМ поляризацій, відповідно, менші ніж  $10^{-5}$  і  $10^{-3}$ .

### **2.3. Модифікація АТМЗХ для вивчення резонансних явищ при взаємодії електромагнітного випромінювання з плазмонними мікро- та наноструктурами.**

Як зазначено вище, точність АТМЗХ зростає при збільшенні кількості використаних зв'язаних хвиль і для аналізу використовують стійкі S та R

числові алгоритми, які є дещо складніші ніж прямий алгоритм. Особливих проблем при вивченні дифракції оптичних хвиль ТЕ поляризації при числових розрахунках АТМЗХ не виявилось, навіть якщо вивчалась дифракція на металевій ґратці з прямокутним профілем (див. рис. 2.7). Це пояснюється тим, що тангенціальна складова напруженості електричного поля є неперервною на межі середовищ з різними діелектричними проникностями і є квазіперіодичною функцією [329] і, як наслідок, її можна передати досить точно як добуток неперервної функції, залежної від координат  $x$  та  $z$  та періодичної функції з невеликим числом членів ряду Фур'є. Проте, при дифракції хвиль ТМ поляризації на металевих ґратках з прямокутним рельєфом при виникненні резонансу електромагнітного поля, наприклад, резонанс плазмонів чи при збудженні поверхневої плазмон-поляритонної хвилі, збіжність методу є дуже повільною, що приводить до необхідності використання великої кількості зв'язаних хвиль [345]. Це пояснюється тим, що тангенціальна складова напруженості електричного поля терпить стрибок на межі середовищ з різними діелектричними проникностями [345, 251]. Збільшення кількості зв'язаних хвиль при розрахунках АТМЗХ у два рази приводить до збільшення часу комп'ютерних обчислень у вісім разів [251, 330].

### **2.3.1. Представлення діелектричної проникності в методі зв'язаних хвиль**

Якщо в системі диференціальних рівнянь АТМЗХ використано  $N$  зв'язаних хвиль, то в матрицях Теплиця [346], які формуються на основі коефіцієнтів комплексного ряду Фур'є періодичної функції діелектричної проникності, будуть присутні члени ряду з номерами від  $(-N+1)/2$  до  $(N-1)/2$ ,  $N$  в даному випадку є непарним. Фактично ми представляємо діелектричну проникність неточно у АТМЗХ, особливо ця неточність буде відчутною для ґраток з прямокутним рельєфом (розрив першого роду у функціональній залежності діелектричної проникності ґратки від координати  $x$ ). На рис. 2.13, для прикладу, наведено залежності діелектричної проникності ґратки з прямокутним рельєфом

та її представлення у вигляді скінченного комплексного ряду Фур'є з  $N$  членами у двох модифікаціях.

Для кращого представлення функціональної залежності діелектричної проникності у вигляді ряду Фур'є необхідно збільшити кількість членів ряду. Але таке збільшення кількості членів ряду, відповідно розмірності матриць Тепліця, приводить до збільшення часу розрахунків АТМЗХ [330].

Представлення діелектричної проникності у вигляді скінченного традиційного ряду Фур'є відрізняється від реальної діелектричної проникності таким чином: прямокутник деформувався у трапецію, два рівні діелектричної проникності 1 і 10 промодульовані осциляціями (див. рис. 2.13) [347].

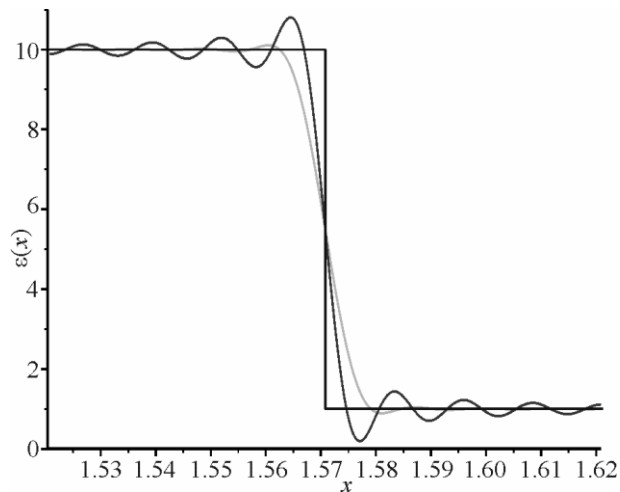


Рис. 2.13 Зображення функціональної залежності діелектричної проникності частини прямокутної ґратки, її представлення у вигляді традиційного ряду Фур'є (чорний колір) та у вигляді модифікованого ряду Фур'є (сірий колір) при таких параметрах:  $\Lambda=2\pi$ ,  $F=0.5$ ,  $N=501$ ,  $\epsilon_{21}=1.0$ ,  $\epsilon_{22}=10$ ,  $x$  міняється на інтервалі  $[\pi/4-0.05, \pi/4+0.05]$ .

Наявність трапеції більше відповідає реальності, адже діелектрична проникність на поверхні твердого тіла не міняється стрибком, а плавно внаслідок абсорбції поверхні газами та іншими домішками. З іншого боку осциляції можуть привести до помилки аналізу, оскільки осциляції у функції діелектричної проникності по суті “формують” високочастотну ґратку, що може

призвести до небажаної та реально не існуючої резонансної взаємодії між певними зв'язаними хвилями.

Члени традиційного ряду Фур'є діелектричної проникності  $\varepsilon(x)$  для прямокутної ґратки можна виразити таким чином:

$$c_n = \begin{cases} \varepsilon_{21}(1-F) + \varepsilon_{22}F, & \text{if } n = 0 \\ (\varepsilon_{22} - \varepsilon_{21}) \frac{\sin(\pi n F)}{\pi n}, & \text{if } n \neq 0 \end{cases} \quad (2.34)$$

Таким же способом розраховуються коефіцієнти ряду Фур'є для залежності  $1/\varepsilon(x)$ , на основі яких формується також матриця Теплиця в АТМЗХ.

Можна представити діелектричну проникність у вигляді трапеції при незначному рівні осциляцій. Таку залежність можна записати у вигляді скінченного ряду Фур'є, члени якого виражаються так:

$$c_n = \begin{cases} \varepsilon_{21}(1-F) + \varepsilon_{22}F, & \text{if } n = 0 \\ (\varepsilon_{22} - \varepsilon_{21}) \frac{\sin(\pi n F) \sin(\pi n / N - 1)(N - 1)}{(\pi n)^2}, & \text{if } n \neq 0 \end{cases} \quad (2.35)$$

де  $N$  – кількість використаних зв'язаних хвиль при аналізі дифракції.

На рис. 2.13 також наведено залежність діелектричної проникності ґратки у вигляді комплексного ряду Фур'є (крива без осциляцій) з  $N$  членами згідно формули (2.35). На цій залежності практично відсутні осциляції, форма імпульсу близька до трапеції, проте бокові сторони її дещо більше відхилені від вертикалі в порівнянні з кривою з осциляціями на рис. 2.13. При рості  $N$  до нескінченності обидві криві прямують до залежності, відображеної синім кольором, проте осциляції на червоній кривій не зникають і їх амплітуда не зменшується, а частота осциляцій зростає.

Інтегральну оцінку близькості функціональної залежності діелектричної проникності  $\varepsilon(x, N)$ , представленої рядом, до реальної діелектричної проникності  $\varepsilon(x)$ , можна визначити за таким виразом:

$$\|\varepsilon(x) - \varepsilon(x, N)\| = \frac{1}{\Lambda} \int_{-\Lambda/2}^{+\Lambda/2} |\varepsilon(x) - \varepsilon(x, N)| dx. \quad (2.36)$$

На рис. 2.14 наведені десяткові логарифми норми різниці в залежності від  $N$  у відповідності до виразу (2.36) між функціональною залежністю діелектричних проникностей, представлених рядами згідно (2.34) та (2.35) і реальної діелектричної проникності  $\varepsilon(x)$ .

Бачимо, що десяткові логарифми норми різниці для обох випадків зменшуються з ростом  $N$ , зменшення є дуже швидким при зміні  $N$  від 21 до 100, і значно повільнішим в межах зміни  $N$  від 150 до 501. Це дозволяє зробити висновок, що при зміні  $N$  від 20 до 100 будуть спостерігатися хаотичні зміни в результатах розрахунків. Скажімо, коефіцієнт пропускання металевої ґратки може суттєво мінятися навіть при зміні  $N$  на одиницю. Після  $N > 150$  результати розрахунків повільно прямують до свого стаціонарного значення, хоча можливі деякі осциляції [341, 348] і кількість необхідних зв'язаних хвиль для досягнення необхідної точності може бути більше 500 [329].

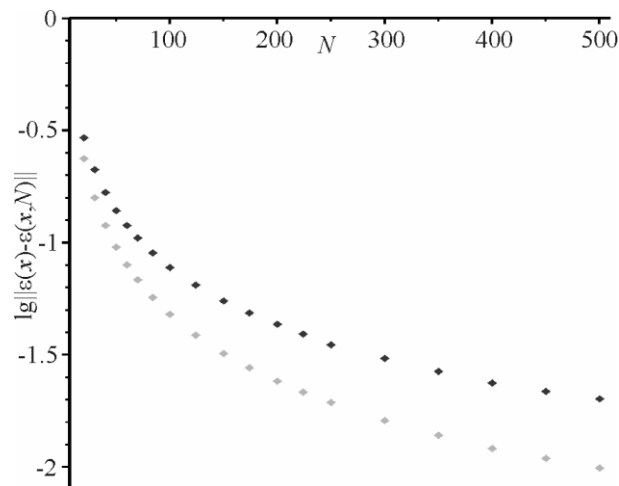


Рис. 2.14 Логарифм десятковий норми різниці діелектричних проникностей в залежності від  $N$ :  $\Lambda=2\pi$ ,  $F=0.5$ ,  $\varepsilon_{21}=1.0$ ,  $\varepsilon_{22}=10$ . Чорний колір – члени ряду розраховуються за виразом (2.34), сірий колір – члени ряду розраховуються за виразом (2.35)

Також можна допустити, що для резонансних явищ, наприклад при резонансі плазмонів в нанодротах, періодично розміщених на діелектричній підкладці, можна очікувати значного підсилення поля у вузькій просторовій області у ґратці на межі метал-діелектрик, що призведе до високої чутливості

коефіцієнтів відбивання, пропускання та поглинання до кількості використаних зв'язаних хвиль.

З Рис. 2.14 також слідує, що  $\|\epsilon(x,N) - \epsilon(x)\|$  діелектричної проникності прямокутної ґратки і ґратки, коефіцієнти якої виражаються з допомогою формули (2.35), є значно менша в порівнянні з  $\|\epsilon(x,N) - \epsilon(x)\|$  між прямокутною ґраткою і ґраткою, коефіцієнти розкладу якої розраховуються за виразом (2.34). Слід зауважити, що залежність від  $N$  десятичного логарифму норми різниці згідно формули (2.35) крутіше спадає ніж відповідна залежність, де норма різниці обчислюється за формулою (2.34). Тому можна зробити припущення, що використання матриць Теплиця на основі виразу (2.35) в АТМЗХ може бути доцільним з точки зору підвищення точності розрахунків і, відповідно, кращої збіжності, як показано в роботі [349].

### **2.3.2. Дослідження діелектричних структур за допомогою модифікованого методу зв'язаних хвиль**

Для початку було проведено аналіз дифракції для хвиль ТМ поляризації при нормальному падінні електромагнітної хвилі на діелектричну ґратку з такими параметрами:  $\epsilon_1 = \epsilon_{21} = 1.0$ ,  $\epsilon_3 = 2.25$ ,  $\epsilon_{22} = 10.0$ ,  $\Lambda = 1.0$  мкм,  $F = 0.5$ ,  $d = 0.5$  мкм,  $\lambda = 0.8$  мкм. При дифракції на такій ґратці будемо мати по три дифракційні порядки на відбивання та пропускання, тобто нульові порядки:  $\eta_{1,0}$  і  $\eta_{3,0}$  та дифраговані в  $\pm 1$ -ші порядки:  $\eta_{1,\pm 1}$  і  $\eta_{3,\pm 1}$ . В таблиці 1 наведені залежності розрахованих дифракційних ефективностей для обох випадків розрахунку коефіцієнтів ряду Фур'є згідно формул (2.34) та (2.35). Як слідує з таблиці, результати для обох випадків практично однакові, незважаючи на те, що  $\epsilon_{22} = 10.0$ , тобто маємо високий контраст діелектричної проникності у ґратці. Якщо діелектрична проникність змінюється за синусоїдальним законом, або її розклад має декілька членів (нелінійний голографічний запис), тоді можна користуватися в деяких випадках навіть двоххвильовим наближенням [338, 350] із задовільною точністю.

Таблиця 1. Залежності дифракційної ефективності від кількості врахованих зв'язаних хвиль

Формула для $\epsilon_n$	$\eta_{i,j}$	Кількість зв'язаних хвиль, $N$			
		61	101	151	201
(2.34)	$\eta_{1,0}$	0.18737	0.18731	0.18728	0.18727
	$\eta_{1,1}$	0.00855	0.00854	0.00854	0.00854
	$\eta_{3,0}$	0.29824	0.29836	0.29839	0.29840
	$\eta_{3,1}$	0.24864	0.24862	0.24862	0.24863
(2.35)	$\eta_{1,0}$	0.18778	0.18750	0.18738	0.18733
	$\eta_{1,1}$	0.00863	0.00857	0.00855	0.00855
	$\eta_{3,0}$	0.29753	0.29803	0.29823	0.29830
	$\eta_{3,1}$	0.24871	0.24866	0.24864	0.24863

Сума всіх дифракційних ефективностей при предсталенні коефіцієнтів рядів Фур'є за формулами (2.34) і (2.35) для даної непоглинаючої ґратки рівна одиниці, що відповідає закону збереження енергії [338] при дифракції на діелектричній ґратці. Отже представлення елементів матриці Тепліца у формі (2.35) є цілком коректним. Дифракційні ефективності для обох представлень діелектричної проникності практично співпадають при  $N > 100$  і змінюються дуже мало при наступній зміні  $N$ .

### 2.3.3. Дослідження металевих структур за допомогою модифікованого методу зв'язаних хвиль

Аналіз металевих ґраток за допомогою модифікованого методу зв'язаних хвиль проводився для ґратки з наступними параметрами:  $\epsilon_1 = \epsilon_{21} = 1.0$ ,  $\epsilon_3 = 2.25$ ,  $\epsilon_{22}$  це діелектрична проникність срібла у відповідності до [113, 333] на довжині хвилі 0,4 мкм,  $\Lambda = 0,1$  мкм,  $F = 0,5$ ,  $d = 0,05$  мкм, тобто така структура представляла періодичне розміщення нанодротів квадратного перерізу на діелектричній підкладці. Для розрахунків вибрана довжина хвилі 0.4 мкм, оскільки поблизу цієї довжини виникає резонанс локалізованих поверхневих плазмонів у



наночастинках срібла [351]. На рис. 2.15 наведено залежності відбивання ( $R$ ), пропускання ( $T$ ) та поглинання ( $A$ ) такої періодичної структури від кількості використаних зв'язаних хвиль.

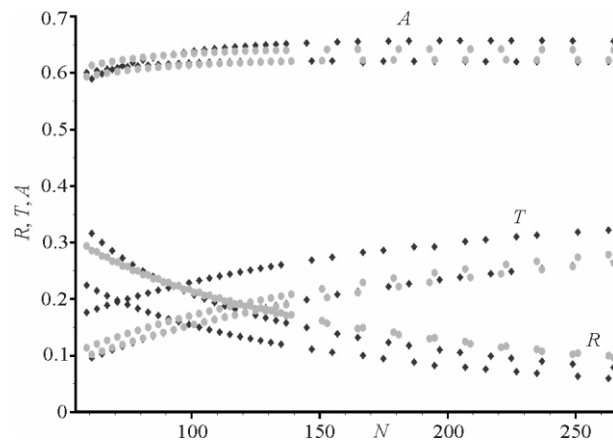


Рис. 2.15. Залежність відбивання ( $R$ ), пропускання ( $T$ ), поглинання  $A=1-R-T$  від кількості використаних зв'язаних хвиль. Чорний колір – це елементи матриць Тепліца, що розраховуються за формулою (2.34), сірий колір – за формулою (2.35).

Аналізуючи рис. 2.15, можна зробити наступні висновки: осциляції є суттєво меншими в залежностях пропускання та поглинання від кількості зв'язаних хвиль, якщо члени ряду Фур'є розраховуються за формулою (2.35) на противагу, коли члени ряду Фур'є розраховуються за формулою (2.34); осциляції для відбивання є практично відсутні, якщо члени ряду Фур'є розраховуються за формулою (2.35); спостерігається незначне покращення збіжності результатів розрахунку при використанні виразу (2.35); можливо, що завдяки резонансу поверхневих локалізованих плазмонів у нанодротах спостерігається значне поглинання більше 0.6, що може бути пояснено виникненням значних полів у періодичній наноструктурі. Максимальна амплітуда тангенціальної складової напруженості електричного поля досягає більше 110 відносних одиниць у вузькій просторовій області на межі метал – діелектрик, що характерно для резонансу плазмонів. Також слід відзначити, що розраховані максимальні напруженості полів на періоді незначно менші при

використанні формули (2.35) в порівнянні з полями, які отримані при розрахунку  $c_n$  згідно виразу (2.34).

Нами також проведено аналіз ґратки з такими параметрами:  $\epsilon_1=\epsilon_{21}=1.0$ ,  $\epsilon_3=2.25$ ,  $\epsilon_{22}$  – діелектрична проникність срібла у відповідності до [113] на довжині хвилі 0.4 мкм,  $\Lambda=0.25$  мкм,  $F=0.2$ ,  $d=0.05$  мкм,  $\lambda=0.4$  мкм. На рис. 2.16 наведено залежності відбивання ( $R$ ), пропускання ( $T$ ) та поглинання ( $A$ ) такої періодичної структури.

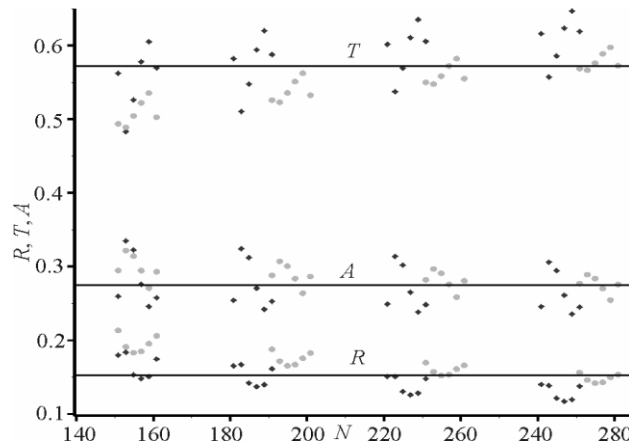


Рис. 2.16 Залежність відбивання ( $R$ ), пропускання ( $T$ ), поглинання  $A=1-R-T$  від кількості використаних зв'язаних хвиль. Чорний колір – елементи матриць Тепліца, що розраховуються за формулою (2.34), сірий колір – за формулою (2.35).

Основний висновок полягає в наступному: осциляції є суттєво меншими в залежностях відбивання, пропускання та поглинання від кількості зв'язаних хвиль, якщо члени ряду Фур'є розраховуються за формулою (2.35) в порівнянні з випадком, коли члени ряду Фур'є розраховуються за формулою (2.34). Бачимо, що сірі крапки більш компактно розташовані біля ліній в порівнянні з розташуванням чорних крапок біля цих ліній. Крім цього розкид сірих крапок при збільшенні  $N$  швидше зменшується ніж розкид чорних крапок, тобто маємо кращу збіжність, коли коефіцієнти ряду Фур'є визначаються за формулою (2.35). Максимальне значення модуля напруженості електричного поля близьке до 60 відносних одиниць при використанні 281 зв'язаної хвилі.

Наступна ґратка, яка нами досліджена, була металевою з вузькою щілиною з такими параметрами:  $\epsilon_1=\epsilon_{22}=\epsilon_3=1.0$ ,  $\epsilon_{21}=-117+i2.966$  (срібло),  $\Lambda=1.0$  мкм,  $F=0.143$ ,  $d=10.3$  мкм,  $\lambda=1.5$  мкм. При цих умовах у щілині ґратки виникає резонанс поля, і вона має високе пропускання [341, 342]. На рис. 2.17 наведено пропускання такої ґратки в залежності від кількості врахованих зв'язаних хвиль.

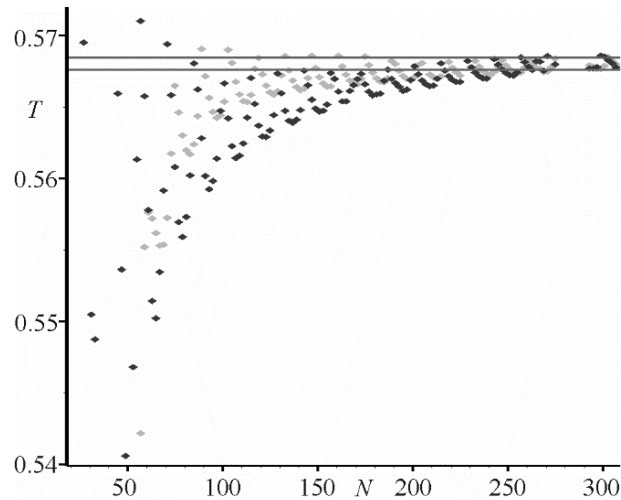


Рис. 2.17 Залежність пропускання ( $T$ ) металевої ґратки з вузькою щілиною від кількості використаних зв'язаних хвиль. Чорний колір – елементи матриць Тепліца, що розраховуються за формулою (2.34), сірий колір – за формулою (2.35). Лінії проведені для пропускання на мінімальному рівні 0.5676 та максимальному рівні 0.5685, що відповідають кількості зв'язаних хвиль, відповідно, 297 і 303; у даному випадку елементи матриці Тепліца розраховуються за формулою (2.35).

Для цієї ґратки немає дифрагованих хвиль в  $\pm 1$ -ші та вищі порядки, що поширюються в однорідних середовищах, а лише відбита та пропущена хвилі. Бачимо, що для обох випадків (члени ряду Фур'є виражаються формулами (2.34) і (2.35)) в залежностях пропускання від кількості врахованих зв'язаних хвиль наявні осциляції з приблизним періодом 14 по  $N$ . Це пов'язано з тим, що коефіцієнт заповнення  $F=0.143 \cong 1/7$ , причому осциляції є сильнішими в межах  $N=59 \dots 225$ , коли члени ряду виражаються за формулою (2.34). Крім цього залежність пропускання від  $N$  швидше прямує до значень, відображених синіми

лініями при умові, що члени ряду Фур'є виражаються формулою (2.35). Така ситуація узгоджується з рис. 2.14.

Наступні дослідження стосуються ґраток з такими параметрами, при яких може виникнути резонанс поверхневих плазмон-поляритонів, що може призвести до коефіцієнта відбивання рівного нулю при повному поглинанні періодичною структурою енергії електромагнітної хвилі.

Очевидно, що в цьому випадку підкладка повинна бути металевою, а ґратка металевою або діелектричною. Розглянемо спочатку простіший випадок, коли діелектрична ґратка розташована на металевій підкладці. Така структура має наступні параметри:  $\epsilon_1 = \epsilon_{21} = 1.0$ ,  $\epsilon_3 = -52.75 + i1.1544$  (срібло),  $\epsilon_{22} = 9.0$ ,  $F = 0.143$ ,  $\Lambda = 1.0$  мкм,  $\lambda = 1.0251$  мкм,  $d = 0.055$  мкм. При нормальному падінні плоскої хвилі на таку структуру при даних параметрах збуджуються на поверхні металу дві поверхневі плазмон-поляритонні хвилі, які рухаються назустріч одна одній, причому коефіцієнт відбивання менший ніж 0.0003. Очевидно, що при ретельнішому виборі параметрів періодичної структури можна добитися коефіцієнта відбивання рівного нулю.

На рис. 2.18 наведено коефіцієнт відбивання від такої періодичної структури в залежності від кількості врахованих зв'язаних хвиль. Знову бачимо швидкі зміни в коефіцієнті відбивання від структури при зміні кількості зв'язаних хвиль до 100, і повільна зміна при кількості зв'язаних хвиль більше 200. В даному випадку не видно якоїсь переваги методу розрахунку коефіцієнтів розкладу діелектричної проникності в ряд Фур'є за формулою (2.34) чи за формулою (2.35). Цей результат мабуть пов'язаний з тим, що збудження резонансу у періодичній структурі відбувається завдяки діелектричній ґратці. Максимальна напруженість електричного поля виникає при  $z=0$ , тобто на межі ґратка – повітря і рівна 15.3 відносних одиниць. Також цікавою особливістю є те, що в цій періодичній структурі магнітна складова електромагнітної хвилі досягає значної величини – 63 відносних одиниці при  $z=d$  і 26 відносних одиниць при  $z=0$ . Слід також відзначити, що поля є практично однаковими при розрахунку коефіцієнтів ряду Фур'є за формулами (2.34) і (2.35).

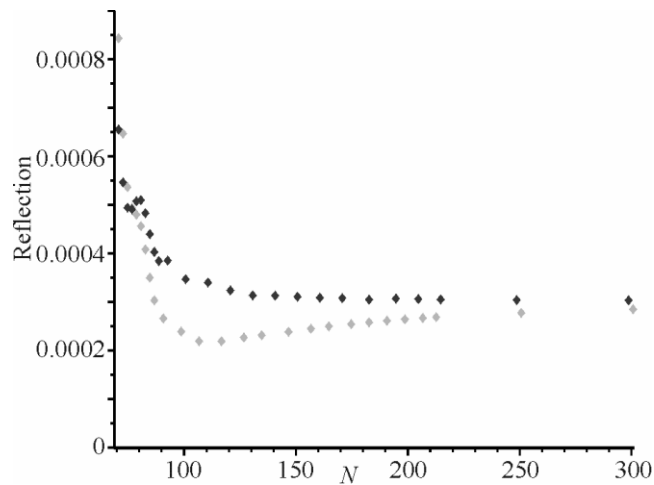


Рис. 2.18. Залежність відбивання від періодичної структури (діелектрична ґратка), в якій збуджується резонанс поверхневих плазмон-поляритонів від кількості використаних зв'язаних хвиль. Чорний колір – елементи матриць Тепліца, що розраховуються за формулою (2.34), сірий колір – за формулою (2.35).

Досить несподіваний характер мають залежності коефіцієнта відбивання від числа використаних зв'язаних хвиль для періодичної структури, в якій збудження резонансу поверхневої плазмон-поляритонної хвилі здійснюється металевією ґраткою, нанесеною на металеву підкладку. При ретельно пібраних параметрах ґратки можна при резонансі отримати практично нульовий коефіцієнт відбивання:  $\epsilon_1 = \epsilon_{21} = 1.0$ ,  $\epsilon_{22} = \epsilon_3 = -51.18 + i1.1176$  (срібло),  $\Lambda = 1.0$  мкм,  $F = 0.5$ ,  $d = 0.01337$  мкм,  $\lambda = 1.01089$  мкм. На рис. 2.19 наведено коефіцієнт відбивання від такої періодичної структури в залежності від кількості врахованих зв'язаних хвиль.

У випадку збудження поверхневої плазмон-поляритонної хвилі металевією ґраткою коефіцієнт відбивання від періодичної структури немає плавної залежності від кількості зв'язаних хвиль, подібно до залежностей рис. 2.18.

Тут можна відмітити деякі особливості: одна з них полягає в тому, що в деяких діапазонах зміни  $N$  на дві одиниці коефіцієнт відбивання змінюється на значну величину, причому ця величина зменшується з ростом  $N$ ; друга особливість полягає в тому, що наявні діапазони зміни  $N$ , в яких стрибки

коефіцієнта відбивання є незначні і на деяких інтервалах зміни  $N$  вони практично відсутні, причому ці інтервали збільшуються із ростом  $N$ .

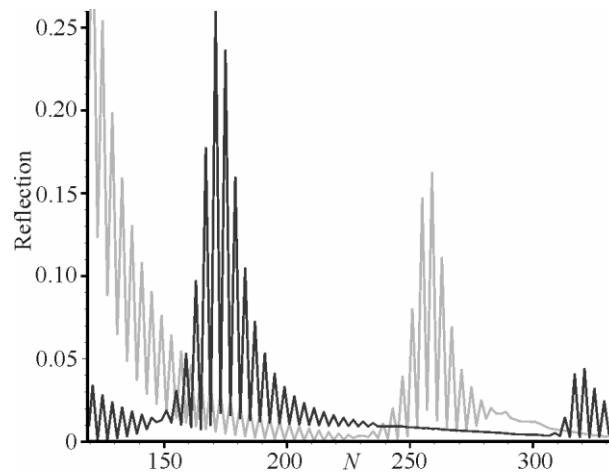


Рис. 2.19 Залежність відбивання від періодичної структури (металева ґратка), в якій збуджується резонанс поверхневих плазмон-поляритонів від кількості використаних зв'язаних хвиль. Чорний колір – елементи матриць Тепліца, що розраховуються за формулою (2.34), сірий колір – за формулою (2.35).

Попри таку неоднозначну залежність коефіцієнта відбивання від кількості зв'язаних хвиль, можна очікувати, що при збільшенні  $N$  осциляції коефіцієнта відбивання прямуватимуть до нуля, сам коефіцієнт відбивання буде мати незначну величину при параметрах періодичної структури, які описані вище. При  $N=331$  коефіцієнт відбивання менший ніж 0.003 для “сірої” залежності. Максимальна напруженість електричного поля виникає при  $z=0$ , тобто на межі ґратка – повітря і рівна дещо більше 60 відносних одиниць; максимальне значення магнітної складової електромагнітної хвилі досягає 35 відносних одиниць при  $z=0$ . Таку нехарактерну залежність коефіцієнта відбивання від періодичної структури металева ґратка на металевій підкладці від кількості використаних зв'язаних хвиль можна пояснити особливостями коренів квадратних з власних чисел  $\mu_n$  матриці  $\mathbf{V}_m$ , де  $n$  змінюється від одиниці до  $N$ . Для даного випадку серед  $N$  власних чисел є чотири, для яких  $\sqrt{\mu}$  мають велике значення уявних частин і малі значення дійсних частин, наприклад, при  $N=331$ :  $\sqrt{\mu_1} = -0.003489 + i6.513$ ,  $\sqrt{\mu_2} = -3.650 + i292.9$ ,  $\sqrt{\mu_3} = -5.437 + i405.1$ . Якщо

розрахунки будуть проведені при  $N=201$ , то знайдемо знову такі 4 корені з власних чисел:  $\sqrt{\mu_1} = -0.003489 + i6.513$ ,  $\sqrt{\mu_2} = -2.222 + i178.2$ ,  $\sqrt{\mu_3} = -3.531 + i258.2$ ,  $\sqrt{\mu_4} = -17.10 + i627.5$ . Порівняння набору двох власних чисел при  $N=201$  і  $N=331$  показує що із зміною  $N$   $\sqrt{\mu_1}$  практично не змінюється, а інші три  $\sqrt{\mu_{j \neq 1}}$  суттєво змінюються навіть при зміні  $N$  на 2 одиниці. Ці  $\sqrt{\mu_{j \neq 1}}$  можуть призвести до “неправдивого резонансу” у діелектричній частині ґратки, яка обмежена металевими стінками, тобто резонансу у щілині ґратки. Цей “неправдивий резонанс” порушує резонанс поверхневої плазмон-поляритонної хвилі і коефіцієнт відбивання стає відмінним від нуля. З рис. 2.19 також видно, що осциляції коефіцієнта відбивання зменшуються з ростом  $N$ . Це можна пояснити тим, що дійсна частина  $\sqrt{\mu_{j \neq 1}}$  (відповідальна за поглинання) з ростом  $N$  зростає, що призводить до зменшення сили “неправдивого резонансу”, і можна сподіватись, що при великому  $N$  “неправдивий резонанс” зникне. Потрібно також зауважити, що товщина ґратки  $d=0.01337$  мкм та довжина хвилі  $\lambda=1.01089$  мкм, при яких коефіцієнт відбивання практично рівний нулю ( $<0.001$ ), знайдені при  $N=123$ , що демонструє “чорна” крива на рис. 2.19. При зміні  $N$  на дві одиниці коефіцієнт відбивання різко зростає. Бачимо, що знайдені умови виникнення резонансу плазмон-поляритонної хвилі при  $N=123$  є такими, що забезпечують резонанс в цілому, тобто і при великому  $N$ .

Отже, результати досліджень АТМЗХ дифракції хвиль ТМ поляризації на рельєфних ґратках з прямокутним профілем в залежності від кількості використаних зв'язаних хвиль ( $N$ ) показали складний характер, причому для обох представлень періодичної функціональної залежності діелектричної проникності ґратки. У першому способі використано традиційне представлення проникності ґратки у вигляді прямокутної періодичної функції, яка має розриви першого роду; у другому способі діелектрична проникність є неперервна у вигляді трапецієвидної функціональної залежності. Аналіз дифракції показав, що в періодичних структурах з діелектричною ґраткою обидва представлення

діелектричної проникності не впливають істотно на збіжність результатів розрахунку, навіть для структури діелектрична ґратка на металевій підкладці, в якій збуджувався резонанс поверхневих плазмон-поляритонів, так що коефіцієнт відбивання від такої структури близький до нуля. Якщо металева ґратка розміщена на діелектричній підкладці, то в такій періодичній структурі може виникнути резонанс електромагнітного поля в діелектричній щілині ґратки, що супроводжується високим пропусканням, або резонанс плазмонів, що супроводжується високим поглинанням. У цьому випадку пропонуване нетрадиційне представлення діелектричної проникності дає деяку перевагу: зменшуються осциляції в залежностях коефіцієнтів відбивання та пропускання від кількості використаних зв'язаних хвиль, також покращується збіжність результатів аналізу. У періодичній структурі «металева ґратка на металевій підкладці» для обох випадків представлення діелектричної проникності при збудженні поверхневої плазмон-поляритонної хвилі спостерігаються сильні осциляції коефіцієнта відбивання в залежності від кількості використаних зв'язаних хвиль в певному діапазоні зміни  $N$ , причому таких діапазонів може бути декілька, і максимальні осциляції в кожному діапазоні зменшуються з ростом  $N$ . Таким чином, застосування розкладу функції діелектричної проникності в АТМЗХ в ряд Фур'є з коефіцієнтами у відповідності до формули (2.35) дещо покращує збіжність розрахунку та суттєво зменшує осциляції. Проте, збіжність результатів розрахунку є все ще малою, що узгоджується з рис. 2.14, де норма різниці повільно прямує до нуля при збільшенні  $N$  в обох представленнях діелектричної проникності ґратки. Можливо, що розробивши відповідні методи інтерполяції, можна спрогнозувати результати дифракції при  $N \rightarrow \infty$ , очевидно, що це можна ефективніше зробити при менших осциляціях. В цілому можна зауважити, що застосування АТМЗХ є доволі проблематичним для ґраток зі срібла, де уявна частина діелектричної проникності в оптичному діапазоні є значно меншою в порівнянні із відповідною частиною проникністю для золота. Можливо, що для ґраток із срібла можливе ефективне застосування інших методів, наприклад [264, 265].



## **2.4. Розв'язок чисельними методами хвильового рівняння в частотній області**

Якщо уважно поглянути на бінарну ґратку, наприклад, металеву на діелектричній підкладці, то можна виявити хвилеводи скінченої довжини: 1-ий хвилевод: метал–діелектрик–метал; 2-ий хвилевод: діелектрик–метал–діелектрик. Для інших ґраток можна знайти хвилеводи ще таких структур: метал–діелектрик–діелектрик чи діелектрик–діелектрик–діелектрик. Для останніх хвилеводів діелектрики відрізняються показниками заломлення. Хвилеводи скінченої довжини можуть служити мікрорезонаторами. Тому дещо незвичні явища реалізуються у вузькому спектральному діапазоні і супроводжуються резонансом електромагнітного поля. Отже, для того щоб передбачити, в якому спектральному діапазоні та при яких параметрах виникають аномальні ефекти, а також щоб краще зрозуміти суть цих ефектів, є доцільним вивчення хвилеводних ефектів.

### **2.4.1. Чисельне моделювання багат шарових хвилеводних структур**

Висока ефективність пропускання і одночасно високе підсилення локального поля на певних довжинах хвиль в мікро- та наноструктурах може бути досягнуто за рахунок геометрії поверхні металу. Пояснення цього явища до цих пір активно обговорюється [352–354]. В роботі [118] показано, що для структур на основі металевих елементів існують два типи резонансів: один з них пов'язаний з поверхневими плазмон-поляритонами на обох горизонтальних поверхнях металеві ґратки, а другий пов'язаний з модами резонатора або хвилеводу, розташованих всередині щілин. Однак, у науковій літературі можна знайти багато досліджень, присвячених тільки ТМ поляризації хвиль і відповідних спектральних залежностей пропускання ґратки. У той же час, залежність пропускання для ТЕ поляризації від товщини і особливостей структури може дати корисну інформацію, щоб пояснити аномалію високого пропускання таких ґраток. З іншого боку, елементи, які використовують цей

механізм, можуть демонструвати нові оптичні властивості і забезпечувати нові функціональні можливості. Розуміння зв'язку хвиль в металевих наноструктурах має фундаментальний інтерес і практичне значення в проектуванні оптичних пристроїв, які можуть стати важливими блоками для майбутніх нанооптичних систем.

Розглянемо діелектричну пропускну хвилеводну ґраткову структуру, як показано на рис. 2.20.

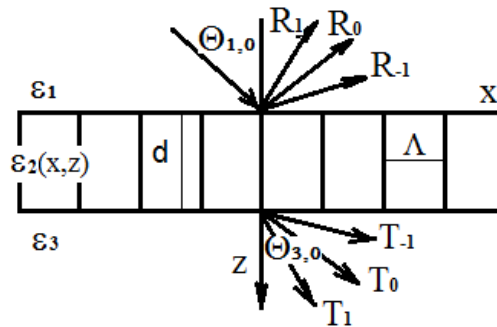


Рис. 2.2. Зображення хвилеводної ґратки

Діелектрична проникність в другій області є просторовомодульована як  $\varepsilon_2(x) = \varepsilon_g + \Delta\varepsilon \cos Kx$ , де  $\varepsilon_g$  - це усереднена відносна проникність,  $\Delta\varepsilon$  - це амплітуда модуляції,  $K = 2\pi/\Lambda$ ,  $\Lambda$  - це період ґратки. Область 2 є хвилеводною ґраткою, і таким чином  $\varepsilon_g > \varepsilon_1, \varepsilon_3$ . Для ТЕ поляризації (вектор електричного поля напрямлений по нормалі до площини падіння), рівняння зв'язаної хвилі в хвилеводній ґратці може бути виражене наступним чином:

$$\frac{d^2 S_i(z)}{dz^2} + \left[ k^2 \varepsilon_g - k_2^2 \left( \sqrt{\varepsilon_g} \sin \theta - i\lambda/\Lambda \right)^2 S_i(z) \right] + \frac{1}{2} k^2 \Delta\varepsilon [S_{i+1}(z) + S_{i-1}(z)] = 0, \quad (2.37)$$

де  $S_i(z)$  - амплітуда неоднорідної плоскої хвилі  $i$ -ї просторової гармоніки,  $k = 2\pi/\lambda$ ,  $\lambda$  - довжина хвилі,  $\theta$  - кут падіння. Якщо  $\Delta\varepsilon \rightarrow 0$  тоді це рівняння містить хвильове рівняння, що асоціюється з діелектричним хвилеводом і записується як:

$$\frac{d^2 E(z)}{dz^2} + (k^2 \varepsilon_g - \beta^2) E(z) = 0, \quad (2.38)$$

де  $\beta$  – стала поширення. Хвильоводна хвиля може бути збуджена, якщо ефективний хвильоводний показник заломлення  $N = \beta/k$  є в області:

$$\max\{\sqrt{\varepsilon_1}, \sqrt{\varepsilon_3}\} \leq |N| < \sqrt{\varepsilon_g}. \quad (2.39)$$

Якщо  $\Delta\varepsilon \rightarrow 0$  в рівнянні (2.37), тоді використовуючи рівняння (2.38), ми отримуємо ефективну сталу поширення хвильоводної ґратки

$$\beta \rightarrow \beta_i = k(\sqrt{\varepsilon_g} \sin \theta - i \lambda / \Lambda), \quad (2.40)$$

з відповідним ефективним показником заломлення. Стала поширення  $\beta_i$  хвильоводної ґратки в границі  $\Delta\varepsilon \rightarrow 0$  залежить від параметрів хвильоводної ґратки  $\Lambda, \varepsilon_g, \theta, \lambda$  та  $i$ , що є цілим числом, що позначає дифраговані хвилі. Подібні аргументи можуть бути застосовані до випадку ТМ поляризації.

Звертаючись до рівняння на власні значення хвильоводу [14], ми отримали відповідне рівняння на власне значення модульованого хвильоводу для ТЕ поляризації:

$$\tan(\kappa_i d) = \frac{\kappa_i (\gamma_i + \delta_i)}{\kappa_i^2 - \gamma_i \delta_i}, \quad (2.41)$$

де  $\kappa_i = (\varepsilon_g k^2 - \beta_i^2)^{1/2}$ ,  $\gamma_i = (\beta_i^2 - \varepsilon_1 k^2)^{1/2}$ , і  $\delta_i = (\beta_i^2 - \varepsilon_3 k^2)^{1/2}$ .

Для ТМ поляризації рівняння на власні значення рівне:

$$\tan(\kappa_i d) = \frac{\varepsilon_g \kappa_i (\varepsilon_3 \gamma_i + \varepsilon_1 \delta_i)}{\varepsilon_1 \varepsilon_3 \kappa_i^2 - \varepsilon_g^2 \gamma_i \delta_i}. \quad (2.42)$$

В границі  $\Delta\varepsilon \rightarrow 0$  рівняння на власні значення (рівняння (2.41) або рівняння (2.42)), і умова діапазону (нерівність (2.40)) регулюють зв'язування мод  $i$ , отже, резонансну поведінку хвильоводної ґратки з модифікованою постійною поширення, яка містить параметри ґратки в явному вигляді. Наприклад, рівняння (2.41) і (2.42) дають місцеположення ТЕ і ТМ хвильоводних резонансів. Для будь-якого параметра, що змінюється, резонанс в границі  $\Delta\varepsilon \rightarrow 0$  можна знайти з рівнянь (2.41) і (2.42), так як загалом коефіцієнти  $\gamma_i, \delta_i, \kappa_i$  залежать від, наприклад,  $\Lambda, \varepsilon_g, \theta, \lambda$  та  $i$ . Резонанс вільного діапазону по

суті є відстань між різними режимами, що поширюються в еквівалентному немодульованому планарному хвилеводі, який відповідає хвилеводній ґратці.

Отже, в залежності від довжини хвилі, кута падіння та параметрів хвилеводної структури, можуть бути змодельовані спектральні характеристики резонансних елементів для різних застосувань в оптичних та фотонних пристроях.

У даній роботі увага зосереджена на дослідженні інтенсивності розподілу полів всередині щілини і на поверхнях металеві ґратки, розміщеної між двома діелектричними шарами. Це дозволило нам пояснити природу резонансів і визначити умови високого пропускання.

Аномально високе пропускання може бути отримане для ґратки з товщиною, яка визначається виразом [356]:

$$d_{\max} = d_{11} + d_{13} + (m-1)\Delta d = d_0 + (m-1)\Delta d, \quad (2.43)$$

де  $d_{11}$ ,  $d_{13}$  є товщини частини ґратки, які прилеглі до 1 і 3 однорідних середовищ (як показано на рис. 2.21) і визначаються параметрами ґратки, довжиною хвилі і діелектричними константами відповідного середовища;  $m=1,2,3,\dots$ ;  $\Delta d$  визначається постійною поширення всередині щілини відповідно до виразу  $\Delta d = \pi/\text{Re}(\beta)$  [356].

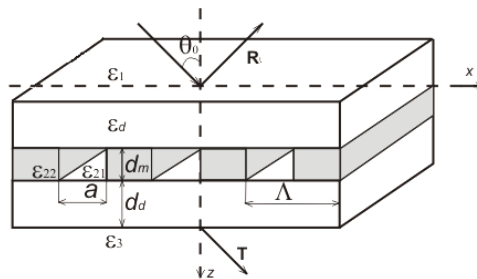


Рис. 2.21. Структура металеві ґратки розміщеної між двома діелектриками.

Варто зазначити, що стала  $\beta$  задовольняє вираз:

$$-i\sqrt{\mu} \approx \beta, \quad (2.44)$$

де  $\mu$  є власне значення  $\mathbf{B}_e$  чи  $\mathbf{B}_m$  матричної системи рівнянь (2.8) та (2.9). Кількість порядків дифракції для аналізу дифракції (розмір матриць  $\mathbf{B}_e$  or  $\mathbf{B}_m$ ) визначає точність знаходження сталої поширення.

Отже металева ґратка, розміщена між двома шарами діелектрика, може забезпечувати високе пропускання поля ТЕ поляризації для вузької смуги довжин хвиль. Величина і положення піку пропускання сильно залежать від геометричних параметрів структури.

Сталі поширення багат шарових хвилеводів необхідні для прогнозування резонансних явищ у ґратках, а також для прикладу, пояснення фізичних процесів у хвилеводних мікролазерах з розподіленим зворотнім зв'язком [357,358]. Варто зазначити, що нами було досліджено новий чисельний метод [359] розв'язку хвильового рівняння для багат шарового планарного хвилеводу. Метод заснований на використанні Фур'є перетворення в хвильовому рівнянні та його розв'язку в частотній області за допомогою чисельного методу. Основне завдання знаходження сталих поширення і Фур'є зображення полів у дискретній формі зводиться до задачі на власні значення і власні вектори. Даний метод забезпечує високоточний розрахунок сталих поширення та їх полів та характеризується високою числовою стійкістю.

#### **2.4.2. Хвильове рівняння для планарних хвилеводів та одновимірне стаціонарне рівняння Шредингера в частотній області**

Проблема визначення стала поширення хвилеводних мод у градієнтних планарних хвилеводах є аналогічною до розв'язку одновимірного стаціонарного рівняння Шредингера для визначення дискретних рівнів енергії та відповідних хвильових функцій квантоворозмірних періодичних структур типу квантових ям [360]. В них можна спостерігати цікаві фізичні ефекти, а також вони є основою цілого ряду оптоелектронних приладів: фотодетектори в інфрачервоній області спектру [361], квантові каскадні лазери [362] та інші пристрої оптоелектроніки [363]. Хвильове рівняння для планарних хвилеводів за своєю структурою ідентичне одновимірному стаціонарному рівнянню Шредингера, а отже методи,

що описані в [364, 365], можна використати для розв'язку рівняння Шредингера. З іншого боку, підходи, що розвинені в квантовій механіці, використовують для пошуку сталих поширення градієнтних планарних хвилеводів [366].

Можна очікувати, що числовий метод в частотній області [359] також придатний для розв'язку одновимірного рівняння Шредингера, оскільки хвильові рівняння відрізняються лише знаком перед другою похідною шуканої функції за координатою. Цей метод, в якому потенціальна яма відмінна від прямокутної, для розв'язку стаціонарного рівняння Шредингера наведений в наших роботах [367–369]. Попередні дослідження показали, що аналіз таких структур (планарні хвилеводи та багатошарові квантові структури) суттєво спрощується в частотній області при високій ефективності та числовій стабільності. В цьому методі шляхом перетворення Фур'є хвильове рівняння перетворюється в інтегральне рівняння, яке розв'язується числовим методом. Остаточно задача зводиться до задачі вищої алгебри на власні числа та власні вектори. Знайдені власні числа є дискретними рівнями енергії для квантових задач, або квадратами сталих поширення хвилеводних мод для планарних хвилеводів, а власні вектори рівні відповідним Фур'є-образам хвильових функцій. За один цикл розрахунку ми знаходимо всі дискретні рівні енергії або всі сталі поширення хвилеводних мод і відповідні хвильові функції.

Слід зауважити, що відомий числовий метод пошуку сталих поширення хвилеводних мод у координатному просторі [364] ґрунтується на заміні другої похідної у хвильовому рівнянні різницеvim оператором. Розв'язок у цьому методі також зводиться до задачі на власні числа та власні вектори. Цей метод можна застосувати до пошуку дискретних рівнів енергії стаціонарного рівняння Шредингера, але він не забезпечує високої точності, оскільки числове диференціювання є джерелом шумів внаслідок заокруглень у числовому процесі.

Розв'язок стаціонарного рівняння Шредингера пропонованим методом ґрунтується на тому, що для дискретних рівнів енергії відповідні хвильові функції та перші похідні від координати  $x$  в  $\pm\infty$  рівні нулю. Отже, для хвильової

функції існує фур'є-образ, і відповідне хвильове рівняння шляхом перетворення Фур'є можна перевести в частотну область, але при цьому ми отримаємо інтегральне рівняння, яке можна розв'язувати числовими методами [367, 369].

Одномірне стаціонарне рівняння Шредингера має вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.45)$$

Досить часто в квантовій механіці використовують знерозмірене рівняння [360], в якому координата  $x$  є безрозмірною величиною, і яке отримують шляхом заміни змінних. Знерозмірене рівняння (2.45) буде виглядати так:

$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.46)$$

Функції  $\psi(x)$  є абсолютно інтегровані як розв'язок стаціонарного рівняння Шредингера і які відповідають дискретним рівням енергії, причому вони та їх перші похідні прямує до нуля, якщо  $x \rightarrow \pm\infty$ . Отже, для цих функцій, їх перших та других похідних існує перетворення Фур'є. Напишемо відповідні співвідношення для  $\psi(x)$ . Отже, Фур'є-образ  $\psi(x)$ , першої та другої похідних  $\psi(x)$  рівні:

$$\psi(u) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \exp(-i2\pi ux) dx \quad (2.47)$$

$$i2\pi u \psi(u) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi(x)}{dx} \exp(-i2\pi ux) dx \quad (2.48)$$

$$-(2\pi u)^2 \psi(u) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \exp(-i2\pi ux) dx \quad (2.49)$$

Крім цього для функцій, відносно яких існує перетворення Фур'є, тобто  $F\{g(x)\} = G(u)$ ,  $F\{h(x)\} = H(u)$  справедливе ще таке співвідношення:

$$F\{g(x)h(x)\} = \int_{-\infty}^{\infty} G(u-v)H(v) dv \quad (2.50)$$

де  $F\{\dots\}$  позначено перетворення Фур'є. Вираз (2.46) виражає зміст теореми про згортку.

Здійснимо перетворення Фур'є правих і лівих частин рівнянь (2.50), використовуючи (2.47), (2.48) та (2.50), внаслідок отримаємо:

$$(2\pi i)^2 \psi(u) + \int_{-\infty}^{\infty} U(u-v)\psi(v)dv = E\psi(u) \quad (2.51)$$

Отже, від диференціального рівняння (2.46) на власні функції та власні числа ми перейшли до інтегрального (2.51). В цьому останньому рівнянні ми можемо інтеграл замінити сумою, а неперервні  $u$  і  $v$  замінити на дискретні змінні, внаслідок цього отримаємо:

$$4\pi^2 (s\Delta)^2 \psi(s\Delta) + \sum_{p=-(N-1)/2}^{(N-1)/2} U(s\Delta - p\Delta)\psi(p\Delta)\Delta = E\psi(s\Delta) \quad (2.52)$$

де  $\Delta = u_{\max}/N$ ,  $u_s = s\Delta$ ,  $\Delta = u_{\max}/N$ ,  $-\frac{(N-1)}{2} \leq s, p \leq \frac{(N-1)}{2}$ ,  $s, p$  – цілі числа.  $u_{\max}$  потрібно взяти таким, щоб на частотах  $|u| \geq u_{\max}/2$  значення  $\psi(u)$  були практично рівні нулю, також  $N$  повинно бути достатньо великим і зручніше, непарним. Очевидно, що сума в (2.52) має  $N$  доданків.

Напишемо останнє рівняння для всіх дискретних просторових частот  $u_s = s\Delta$ , причому  $s$  змінюється від  $-(N-1)/2$  до  $(N-1)/2$ , тоді сукупність цих рівнянь у кількості  $N$  можна записати у вигляді матричного рівняння, причому  $E$  є спільною для всіх  $s$ :

$$(\mathbf{P} + \mathbf{U})\Psi = E\Psi, \quad (2.53)$$

де  $\mathbf{P}$  – діагональна матриця, елементи якої рівні  $4(\pi s\Delta)^2$ ,  $\mathbf{U}$  – квадратна матриця, елементи якої рівні  $U(s\Delta - p\Delta)$ ,  $\Psi$  – вектор-стовпець, елементи якого рівні  $\psi(s\Delta)$ .

Таким чином, в кінцевому результаті задача звелася до задачі на власні числа (енергія) та власні вектори (дискретний Фур'є-образ  $\psi(x)$ ), що відповідає заданому значенню енергії. Ми можемо мати декілька власних значень та відповідних власних векторів. Здійснивши обернене дискретне Фур'є-перетворення власного вектора, ми отримуємо власну функцію  $\psi(x)$ . Для квантово-механічних задач всі дискретні рівні енергії лежать в межах потенційної ями. Якщо ми маємо потенційну яму скінченної глибини, то точність



визначається  $N$  і  $\Delta$ . Якщо потенціальна енергія змінюється від нуля до нескінченності (наприклад  $U = x^2$ ), то в цьому методі ми змушені обмежувати потенціальну енергію, тобто до певного значення вона іде як  $U(x)$ , а далі приймає постійне значення. Очевидно, що в цьому випадку ми можемо визначити найточніше найнижчі рівні енергії.

Точність цього методу визначається  $N$  і  $u_{max}$ , які визначають величину  $\Delta = \frac{u_{max}}{N}$  згідно до теореми про відліки [370]. Величина  $1/\Delta$  визначає  $x_{max}$ , тобто інтервал в координатному просторі, на краях якого розрахована  $\psi_j(\pm 0.5/\Delta)$  з найвищим індексом повинна бути практично рівна. Можна стверджувати, що інтервал  $1/\Delta$  повинен бути в декілька раз більшим ніж максимальна ширина потенціальної ями. Мінімальне значення  $u_{max}$  визначається функціональною залежністю Фур'є-образу функції потенціальної енергії. Інтуїтивно ясно, що при  $u = \pm u_{max}/2$  Фур'є-образ повинен бути дуже близьким до нуля. Вибравши  $u_{max}$  і  $\Delta$ , можна визначити  $N$  згідно виразу  $N = u_{max}/\Delta$ .

### 2.4.3. Чисельне моделювання одновимірного кристалу

Одновимірний кристал можна представити як періодичне повторення елементарної комірки. Елементарна комірка має потенціальну енергію, яка описується, наприклад, функцією  $U(x) = a - a \exp(-\pi x^2)$ . Якщо у нас буде періодично розміщених  $M$  (прийmemo  $M$  для зручності непарним) потенціальних ям на відстані  $\Lambda$  одна від одної, то будемо мати одновимірний кристал, потенціальна енергія, якого буде описуватися виразом

$$U(x)_{kr} = a - a \sum_{m=(M-1)/2}^{(M-1)/2} \exp[-\pi(x - m\Lambda)^2]. \quad (2.54)$$

Після нескладних математичних перетворень отримаємо Фур'є-образ функції (2.54)

$$F\{U(x)_{kr}\} = a\delta(u) - a \exp(-\pi u^2) \frac{\sin[\pi M \Lambda u]}{\sin(\pi \Lambda u)} \quad (2.55)$$

На рис. 2.22а наведено графік потенціальної енергії згідно формули (2.54) одновимірного кристалу з 11 елементарними комірками з періодом розміщення  $\sqrt{3}$  для  $a = 50$ . Тут вибрано для  $\Lambda$  ірраціональне число щоб уникнути ділення на нуль у виразі (2.55) для частот  $u \neq 0$ . На рис. 2.22б наведено другий доданок фур'є-образу потенціальної енергії кристалу у відповідності до формули (2.55).

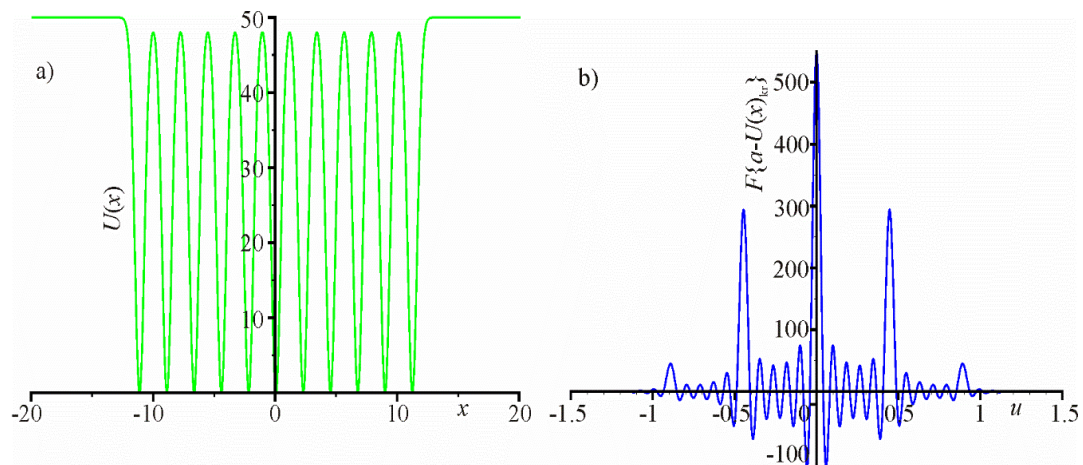


Рис. 2.22. Залежність потенціальної енергії згідно виразу (2.54) одновимірного кристалу, що містить одинадцять комірок з періодом  $\Lambda = \sqrt{3}$  (а); другий доданок фур'є-образу потенціальної енергії кристалу за формулою (2.55) (б).

Як бачимо, Фур'є-образ містить вузькі піки, ширина яких визначається з виразу (2.55) кількістю елементарних комірок у кристалі, крім цього, максимум центрального піку пропорційний кількості комірок, а за величиною рівний  $Ma = 11 \times 50 = 550$ . Половину періоду осциляцій фур'є-образу можна визначити з умови, що чисельник другого доданку виразу (2.55) рівний нулю, тобто  $\pi M \Lambda u = \pi$ .

Якщо вважати, що згідно теореми про відліки [370] на півперіоді повинно бути не менше двох відліків, то з виразу  $\Delta < 1/2 M \Lambda$  можна знайти, що  $2 M \Lambda \Delta < 1$ .

Звідси випливає співвідношення:  $x_{\max} = \frac{1}{\Delta} > 1 M \Lambda$ . Максимальний інтервал

частот  $u_{\max}$  можна наближено оцінити з рис. 2.22б. На частотах  $\pm \frac{u_{\max}}{2}$  Фур'є-образ потенціальної енергії повинен бути практично рівним нулю. Інтервал

$-\left[\frac{u_{\max}}{2}, \frac{u_{\max}}{2}\right]$  не залежить від кількості елементарних комірок в кристалі, що слідує з виразу (2.55), у відповідності до рис. 2.22б можна прийняти, що  $u_{\max} > 3$ . Сумарна кількість відліків  $N$  повинна задовольняти умові  $N > x_{\max} u_{\max}$ .

Проаналізуємо одновимірний кристал, який складається з 33 елементарних комірок, потенціальна енергія яких описується виразом (2.54) при  $a = 50$ ,  $\Lambda = \sqrt{3}$ . Спочатку знайдемо рівні енергії одної потенціальної ями з виразу (2.54). Числовий розрахунок проведено при таких параметрах числового процесу:  $N = 2001$ ,  $u_{\max} = 5 \div 20$ . Отримано для цієї потенціальної ями три дискретних рівні енергії, які рівні:

$$E_0 = 11.34694069, E_1 = 31.34026975, E_2 = 45.22214696. \quad (2.56)$$

Якщо маємо одновимірний кристал з 33 потенціальними ямами ( $M = 33$ ) у відповідності до виразу (2.55), то перші два рівні розщеплюються на 33 підрівнів і утворюють дозволені зони, проте рівень  $E_2$  розщеплюється лише на 29 підрівнів, ще чотири підрівні мають енергію більшу ніж глибина потенціальної ями і потрапляють в неперервний спектр енергій. На рис. 2.23 відображена зонна структура одновимірного кристалу.

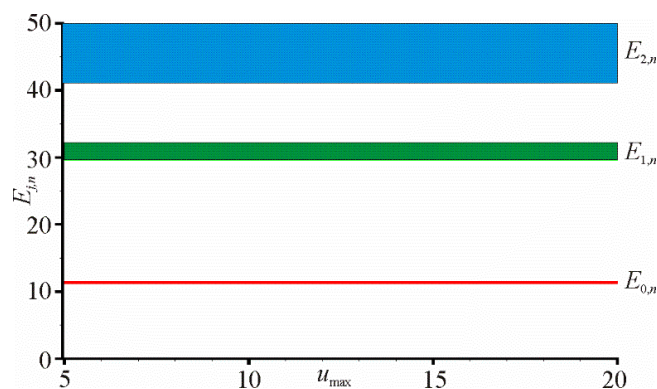


Рис. 2.23. Зонна структура одновимірного кристалу з 33 комітками.

Числовий розрахунок проведено при таких параметрах числового процесу:

$$u_{\max} = 5 \div 20, N = 2001.$$

Ширини дозволених зон зростають із збільшенням енергії. Ширина зони з найнижчими рівнями енергії лежить в межах 11.202565 ... 11.344461. Ширина

зони, що утворилася за рахунок розщеплення  $E_1$ , лежить в межах 29.707432 ... 32.175102. Ширина зони, що утворилася за рахунок розщеплення  $E_2$ , лежить в межах 41.137983 ... 49.982381. Результати аналізу одномірного кристалу повністю узгоджується з даними книги [371].

#### 2.4.4. Чисельне моделювання квантової багатошарової структури

З допомогою запропонованого методу проаналізована багатошарова структура, наведена на рис. 2.24, у якій ширина центрального потенціального бар'єру складає 1 нм, а дві потенціальні ями, що прилягають до цього бар'єру, також мають ширини 1 нм. Решту потенціальних ям та бар'єрів мають ширини 0.25 нм. Висота бар'єрів рівна  $U_0 = 0.3eV$ , а глибина потенціальних ям рівна нулю. Потенціальна енергія на інтервалах  $(-\infty, -3]$ ,  $[3, \infty)$  рівна  $U_0 = 0.3eV$ .

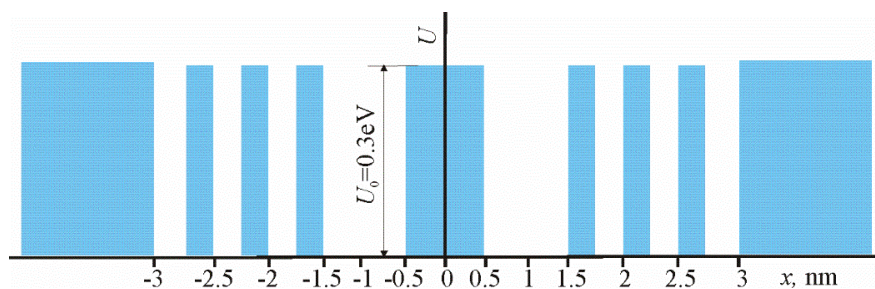


Рис. 2.24. Потенціальна енергія багатошарової квантової структури

Для аналізу цієї структури вибрано рівняння Шредингера у формі (2.41), у якому маса  $m$  рівна масі електрона. Параметри числового процесу наступні:  $N = 2001$ ,  $u_{\max} = 12 \times 10^{10} m^{-1} = 120 nm^{-1}$ . Для цих параметрів отримано такі значення рівнів енергії:  $E_0 = 0.101034eV$ ,  $E_1 = 0.112622eV$ ,  $E_2 = 0.213972eV$ ,  $E_3 = 0.221988eV$ . Слід відзначити, що дискретні рівні на енергетичній шкалі групуються попарно:  $E_0, E_1$  і  $E_3, E_4$ .

На рис. 2.25а наведено розрахункові значення рівнів енергії в залежності від  $u_{\max}$ . В діапазоні  $u_{\max} = 20 \div 200 nm^{-1}$  розраховані рівні енергії практично не змінюються. Для  $N = 2001$ ,  $u_{\max} = 120 nm^{-1}$  можна знайти  $x_{\max} = \frac{N}{u_{\max}} \cong 16.7 nm$ .

На краях інтервалу  $\left[-\frac{x_{\max}}{2}, \frac{x_{\max}}{2}\right]$  значення хвильових функцій практично повинні бути рівні нулю, що можна спостерігати на рис. 2.25б.

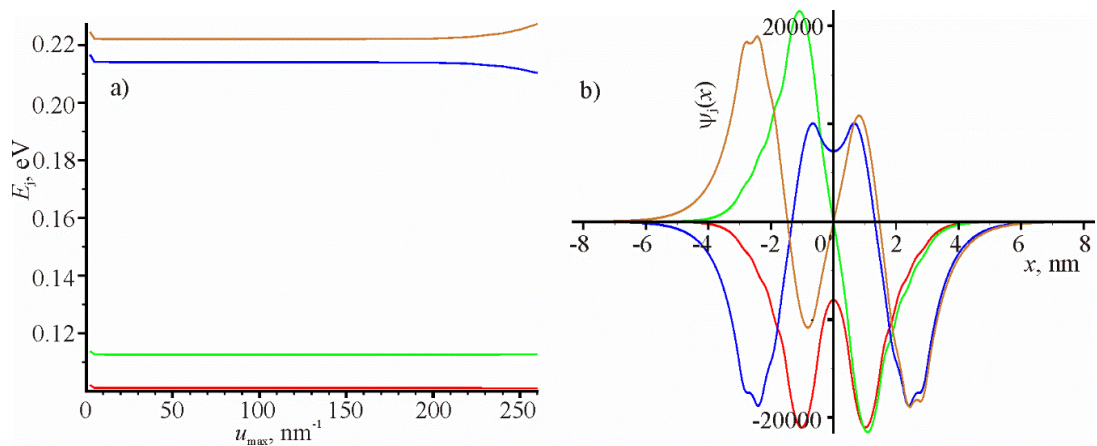


Рис. 2.25. Залежність розрахованих рівнів енергії від частоти  $u_{\max}$  (а); залежність відповідних хвильових функцій, розрахованих при  $u_{\max}=120\text{nm}^{-1}$ ,  $N=2001$ ,  $E_0 = 0.101034\text{ eV}$  – червоний колір,  $E_1 = 0.112622\text{ eV}$  – зелений колір,  $E_2 = 0.213972\text{ eV}$  – синій колір,  $E_3 = 0.221988\text{ eV}$  – коричневий колір (б)

Оскільки потенціальна енергія багатошарової квантової структури у відповідності до рис. 2.24 є симетричною, то хвильові функції з парним номером є симетричними, а з непарним номером – антисиметричними, що можна спостерігати на рис. 2.25б. Така поведінка хвильових функцій відповідає квантовій теорії [360].

## 2.5. Математична модель взаємодії лазерного випромінювання з наночастинками та елементами на їх основі

### 2.5.1. Перерізи поглинання та розсіяння випромінювання наночастинками

Електричне поле електромагнітної хвилі зміщує хмару вільних електронів і створює нескомпенсовані заряди навколо поверхні частинки та відповідні зростаючі сили. В результаті виникають когерентні коливання електронів в осцилюючому зовнішньому полі. Ці колективні коливання електронів

називаються поверхневим (дипольним) плазмоном, а оптичний резонанс, зв'язаний з цими коливаннями – поверхневим плазмонним резонансом. Термін „поверхневий ” плазмон зв'язаний, по-перше, з тим, що повертаюча сила зумовлена поляризацією поверхні частинки. По-друге, для недипольних мод радіальна компонента електричного поля всередині частинки змінюється як  $E_r^{(n)} \sim r^{n-1}$ , так що з підвищенням порядку моди ( $n \gg 1$ ) вона все сильніше локалізується біля поверхні частинки.

У загальному випадку, частота плазмонного резонансу визначається багатьма чинниками, такими як: концентрація і ефективна маса електронів провідності, форма, структура і розмір частинок, взаємодія між частинками і вплив оточення. Проте, для елементарного опису оптики наночастинок з плазмонним резонансом достатньо комбінації звичайного дипольного (релеївського) наближення і теорії Друде. В цьому випадку поглинання і розсіяння світла малою частинкою визначається її електростатичною поляризованістю  $\alpha_0$ , яка обчислюється з використанням оптичної діелектричної проникності  $\varepsilon(\omega)$  або  $\varepsilon(\lambda)$ , де  $\omega$  - це кутова частота і  $\lambda$  - довжина хвилі у вакуумі. Для малої сфери радіусу  $R$  в однорідному діелектричному середовищі з проникністю  $\varepsilon_m$ , маємо

$$\alpha_0 = \frac{3V}{4\pi} \frac{\varepsilon_m - \varepsilon_h}{\varepsilon_m + 2\varepsilon_h} = R^3 \frac{\varepsilon_m - \varepsilon_h}{\varepsilon_m + 2\varepsilon_h}, \quad (2.56)$$

а інтегральні переріз поглинання, розсіяння і екстинкції рівні

$$C_{ext} = C_{abs} + C_{sca} = \frac{12\pi k \varepsilon_h \operatorname{Im}(\varepsilon_m)}{R^3 |\varepsilon_m - \varepsilon_h|^2} |\alpha|^2 + \frac{8\pi}{3} k^4 |\alpha|^2 \cong 4\pi k \operatorname{Im}(\alpha), \quad (2.57)$$

де  $k = 2\pi\sqrt{\varepsilon_h}/\lambda$  - хвильове число середовища. Зауважимо, що в формули для перерізів входить не електростатична, а перенормована поляризованість  $\alpha$ .

$$\alpha = \frac{\alpha_0}{1 + \varphi(kR)R^{-3}\alpha_0}, \quad (2.58)$$

де функція  $\varphi(kR)$  враховує ефекти радіаційного загасання

$$\varphi(kR) = 2 + 2(ikR - 1)\exp(ikR) \cong -(kR)^2 - i\frac{2}{3}(kR)^3. \quad (2.59)$$

Для дуже малих частинок рівняння (2.54) зводиться до відомих наближень

$$\alpha = R^3 \frac{\varepsilon_m - \varepsilon_h}{\varepsilon_m + 3\varepsilon_h - i(2/3)(kR)^3(\varepsilon_m - \varepsilon_h)}. \quad (2.60)$$

Фізично поява додаткового уявного члена в знаменнику рівняння (2.60) пов'язана із зворотною дією розсіяного поля на осцилюючий диполь, тобто з роботою радіаційних сил, що приводять до загасання осциляцій.

З наведених вище співвідношень видно, що поляризованість і оптичні перерізи можуть мати сильний резонанс за умови:

$$\varepsilon(\omega_{\max} \equiv \omega_0) = \varepsilon(\lambda_{\max}) = -2\varepsilon_h. \quad (2.61)$$

Оцінку частоти плазмонного резонансу можна отримати з елементарної теорії Друде для діелектричної функції об'ємного металу.

Для розрахунку перерізів поглинання та розсіяння випромінювання нанооболонками використаний підхід, заснований на принципі дипольної еквівалентності [372]. Принцип дипольної еквівалентності полягає у визначенні еквівалентної середньої проникності багат шарової частинки через її поляризованість.

Перерізи поглинання  $C_{abs}$  та розсіювання  $C_{scat}$  нанооболонки визначаються наступним чином:

$$C_{abs} = \frac{8\pi\sqrt{\varepsilon_m}R_2^3}{\lambda} \Im(\delta) \quad (2.62)$$

$$C_{scat} = \frac{128\pi^5\varepsilon_m^2R_2^6}{3\lambda^4} |\delta|^2, \quad (2.63)$$

де еквівалентна поляризованість може бути виражена наступним чином:

$$\delta = \frac{\varepsilon_{1,2} - \varepsilon_m}{\varepsilon_{1,2} + 2\varepsilon_m}, \quad (2.64)$$

і еквівалентна усереднена діелектрична проникність певної еквівалентної однородної сфери рівна:

$$\varepsilon_{1,2} = \varepsilon_m \frac{1 + 2f_{12}\delta_{12}}{1 - 2f_{12}\delta_{12}}. \quad (2.65)$$

Співвідношення розмірів ядра-оболонки рівне:

$$f_{12} = \frac{R_1^3}{R_2^3}. \quad (2.66)$$

Поляризованість частинки з діелектричною проникністю  $\varepsilon_1$  в середовищі з діелектричною проникністю  $\varepsilon_2$  рівна:

$$\delta_{12} = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2}. \quad (2.67)$$

Аналогічним чином можна отримати формули і для багатошарових наночастинок.

### 2.5.2. Ефективна діелектрична проникність нанокомпозитних матеріалів

Оптичні властивості композитного матеріалу (коли один з компонентів може розглядатися в якості матриці, в яку поміщені металеві включення) можуть бути описані з використанням теорії ефективної діелектричної проникності. В залежності від концентрації включень в матриці (рис. 2.26) обирають теорію, за якою розраховують ефективну діелектричну проникність нанокомпозиту.

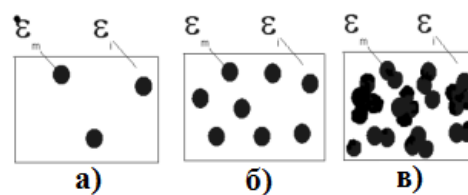


Рис. 2.26. Розподіл наночастинок в матриці

При концентраціях включень менших 5% (рис. 2.26а) використовують теорію Мі, при концентраціях, що потрапляють в діапазон 5-30% (б) - теорію Максвелла-Гарнетта, і при концентраціях більше 30% включень (в) застосовують теорію Бруггемана [301]

Для матеріалу, що складається з двох чи більше компонентів або фаз теорія Максвелла-Гарнетта [373] дає можливість описати залежність оптичних



властивостей матеріалу, а саме – показника заломлення матеріалу (або діелектричної проникності) від концентрацій включень в ньому. Якщо композит складається з двох компонентів, кожна з яких має діелектричну константу  $\varepsilon_m$  та  $\varepsilon_h$ , фактор заповнення середовища  $f$ , то ефективна діелектрична проникність має вигляд:

$$\varepsilon_{eff} = \varepsilon_h \frac{\varepsilon_m(1+2f) + 2\varepsilon_h(1-f)}{\varepsilon_m(1-f) + \varepsilon_h(2+f)} \quad (2.68)$$

Умова поверхневого плазмонного резонансу задається такою формулою:

$$\varepsilon_m(1-f) + \varepsilon_h(2+f) = 0 \quad (2.69)$$

Однак, класична теорія Максвелла–Гарнетта не враховує вплив розміру наночастинок, то часто використовується так звана розширена теорія Максвелла–Гарнетта, що описується наступним співвідношенням:

$$\varepsilon_{eff} = \varepsilon_h \frac{\varepsilon_m(1+2f) + 2\varepsilon_h(1-f) + (\varepsilon_h - \varepsilon_m)(1-f)\Delta}{\varepsilon_m(1-f) + \varepsilon_h(2+f) + (\varepsilon_h - \varepsilon_m)(1-f)\Delta} \quad (2.70)$$

де  $\Delta = x^2 + (2/3)ix^3$ ,  $x = \sqrt{\varepsilon_2} 2\pi R/\lambda$ .

Ця теорія розглядає композит, який складається з випадкових дисперсних нановключень в діелектричній матриці. Необхідно зауважити, що тут вводиться припущення, що абсолютно всі включення в матриці мають однакову форму (сферичних наночастинок) та однакові розміри, що значно менші за довжину хвилі світла.

Тим не менш, складні системи, що містять тільки однакові стабілізовані наночастинок мають обмежений інтерес для технічних і практичних застосувань. Ізольовані наночастинок складають найбільший інтерес для фундаментальних досліджень, тоді як для практичного використання застосовуються системи з частинками різної форми та розміру, котрі взаємодіють між собою. Тому необхідно враховувати диполь-дипольні взаємодії між частинками. Крім того, така теорія перестає бути надійною, якщо фактор заповнення, як правило, великий. У роботі [374] запропонована ренормалізована

теорія Максвелла-Гарнетта, оскільки вона враховує взаємодію між частинками і може використовуватися для високого фактора заповнення.

Відповідно до ренормалізованої теорії Максвелла-Гарнетта можна визначити ефективну діелектричну проникність для композиту, що містить наночастинки металу ( $\varepsilon_i$ ), які дисперговані у вихідну матрицю ( $\varepsilon_h$ ) як:

$$\frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_h}{\varepsilon_{eff} + 2\varepsilon_h} = \frac{4\pi f}{3V} \alpha^*, \quad (2.71)$$

де  $f$  - фактор заповнення;  $V$  - об'єм наночастинки.

Співвідношення між  $\varepsilon_{eff}$  і  $\alpha^*$  дозволяє розширити теорію Максвелла-Гарнетта для несферичних наночастинок. Ренормалізована усереднена поляризованість визначається наступним виразом:

$$\alpha^* = \frac{2\bar{\alpha}}{\kappa} \left\{ 1 - \frac{\sqrt{1 - \kappa(1 - \delta)}}{2} \left[ \sqrt{1 - \nu} + \frac{\arcsin(\nu^{1/2})}{\nu^{1/2}} \right] \right\}; \quad (2.72)$$

$$\bar{\alpha} = 1/3(2\alpha_{\perp} + \alpha_{\parallel}), \quad (2.73)$$

$$\kappa = f(\bar{\alpha}/R^3)^2, \quad (2.74)$$

$$\nu = 3\kappa\delta/(1 - \kappa(1 - \delta)). \quad (2.75)$$

Параметр анізотропії рівний:

$$\delta = (\alpha_{\perp} - \alpha_{\parallel})/(2\alpha_{\perp} + \alpha_{\parallel}). \quad (2.76)$$

Компоненти тензора поляризованості  $\alpha_{\perp}$  і  $\alpha_{\parallel}$  є рівними:

$$\alpha_{\perp} = \frac{\varepsilon_m/\varepsilon_h - 1}{(\varepsilon_m/\varepsilon_h - 1)n_{\perp} + 1} \left( \frac{V}{4\pi} \right), \quad (2.77)$$

$$\alpha_{\parallel} = \frac{\varepsilon_m/\varepsilon_h - 1}{(\varepsilon_m/\varepsilon_h - 1)n_{\parallel} + 1} \left( \frac{V}{4\pi} \right), \quad (2.78)$$

де  $n_{\perp}$  і  $n_{\parallel}$  є геометричними факторами, які називаються деполізаційними коефіцієнтами. Для сфероїда з нецентрованістю  $e$  ( $e \ll 1$ )

$$n_{\perp} = \frac{1}{3} \mp \frac{1}{15} e^2, \quad (2.79)$$

$$n_{\parallel} = \frac{1}{3} \pm \frac{2}{15} e^2, \quad (2.80)$$

де знаки плюс і мінус відповідають несферичностям у вертикальному і горизонтальному напрямках сфероїда.

Відношення між коефіцієнтом оптичного поглинання і ефективною діелектричною константою визначається наступним співвідношенням [375]:

$$\alpha = \frac{2\sqrt{2}\pi}{\lambda} \left[ (\varepsilon_{effR}^2 + \varepsilon_{effI}^2)^{1/2} - \varepsilon_{effR} \right]^{1/2}, \quad (2.81)$$

де  $\varepsilon_{effR}$  і  $\varepsilon_{effI}$  є дійсна і уявна частина ефективної діелектричної сталої нанокompозитного матеріалу.

В тому випадку, коли в композитному середовищі не можна чітко розділити матрицю і включення, часто використовують модель, запропоновану Д. Бругеманом [377]. На відміну від моделі Максвелла-Гарнетта модель Бругемана не має переваг у бік наночастинок або середовища, вона однаково враховує і наночастинки і середовище. Теорія Бругемана добре працює з великим об'ємом наночастинок. Ефективна діелектрична проникливість нанокompозиту за Бругеманом визначається виразом:

$$f_a \frac{\varepsilon_a - \varepsilon}{\varepsilon_a + 2\varepsilon} + f_b \frac{\varepsilon_b - \varepsilon}{\varepsilon_b + 2\varepsilon} = 0. \quad (2.82)$$

де  $\varepsilon$  – діелектрична функція ефективного середовища,  $\varepsilon_a$  – діелектрична функція частинки в середовищі,  $\varepsilon_b$  – діелектрична проникливість середовища і  $f_a$  – об'ємна частка частинок, що містяться в середовищі,  $f_b$  – об'ємна частка середовища.

Після врахувань всіх особливостей структури отримаємо формулу для ефективної діелектричної проникності:

$$\varepsilon_{eff} = \frac{\varepsilon \left[ 1 + 2(1-f) \frac{\varepsilon_a - \varepsilon}{\varepsilon_a + 2\varepsilon} + 2f \frac{\varepsilon_b - \varepsilon}{\varepsilon_b + 2\varepsilon} \right]}{\left[ 1 + (1-f) \frac{\varepsilon_a - \varepsilon}{\varepsilon_a + 2\varepsilon} - 2f \frac{\varepsilon_b - \varepsilon}{\varepsilon_b + 2\varepsilon} \right]}. \quad (2.83)$$

Ці теорії широко використовуються для розрахунку ефективної діелектричної проникності матеріалів. Оскільки у всіх наших дослідженнях ми використовуємо нанокompозитні матеріали, що містять концентрацію нановключень меншу за 30%, то у всіх наступних дослідженнях будемо використовувати ефективну теорію Максвелла-Гарнетта.

## 2.6. Висновки до другого розділу

Математичне формулювання точної системи рівнянь зв'язаних хвиль та алгоритму S-матриці детально представлені та адаптовані до простої матричної форми для використання на сучасній мові програмування. Для цього було отримано набір матричних зв'язків, що забезпечило стабільний алгоритм для обчислення пропускання та відбивання. Запропонований алгоритм чисельного обчислення був реалізований у стандартному математичному програмному забезпеченні. Дані моделювання порівнювалися з результатами інших комерційно доступних програм моделювання та відомих алгоритмів, які найчастіше використовуються для аналізу періодичних мікро- та наноструктур.

Досліджено збіжність методу зв'язаних хвиль для аналізу дифракції на деяких рельєфних ґратках в оптичному та ближньому інфрачервоному діапазонах для певних довжин хвиль. Показано, що для металевих ґраток з вузькими щілинами (прямокутній рельєф) у випадку дифракції хвиль ТЕ поляризації за наявності резонансу залежність пропускання від кількості використаних зв'язаних хвиль монотонно прямує до певного значення з похибкою  $O\left(\frac{1}{N^3}\right)$ , а для хвиль ТМ поляризації з похибкою, яка осцилює відносно асимптотичного значення в межах  $\pm O\left(\frac{1}{N^2}\right)$ . Похибки в коефіцієнті пропускання при використанні 101 зв'язаної хвилі складає менше ніж 0.001 для хвиль ТЕ поляризації і 0.005 для ТМ поляризації. Якщо маємо прямокутну діелектричну рельєфну ґратку, то похибка для обох поляризацій монотонно

зменшується за виразом  $O\left(\frac{1}{N^3}\right)$ , проте наявні деякі незначні відхилення від цієї кривої. Похибки обчислення при  $N = 101$  для хвиль TE і TM поляризацій, менші ніж  $10^{-5}$  і  $10^{-3}$  відповідно. Якщо діелектрична проникність середовища ґратки змінюється за косинусоїдальним законом, то дифракційна ефективність з ростом кількості зв'язаних хвиль дуже швидко прямує до асимптотичного значення.

Результати досліджень АТМЗХ дифракції хвиль TM поляризації на рельєфних ґратках з прямокутним профілем в залежності від кількості використаних зв'язаних хвиль ( $N$ ) показали складний характер, причому для обох представлень періодичної функціональної залежності діелектричної проникності ґратки. Однак, якщо металева ґратка розміщена на діелектричній чи металевій підкладках, то в такій періодичній структурі може виникнути резонанс електромагнітного поля в діелектричній щілині ґратки, що супроводжується високим пропусканням, або резонанс плазмонів, що супроводжується високим поглинанням. У цьому випадку пропонується нетрадиційне представлення діелектричної проникності дає деяку перевагу: зменшуються осциляції в залежностях коефіцієнтів відбивання та пропускання від кількості використаних зв'язаних хвиль, також покращується збіжність результатів аналізу.

Проаналізовано можливості нового методу розв'язку стаціонарного одновимірного рівняння Шредингера в частотній області для різноманітних функцій потенціальної енергії. Знайдено розв'язки стаціонарного рівняння Шредингера одновимірного кристалу, який має 33 елементарні комірки, розташовані періодично. Встановлено, що енергетичні рівні у кристалі утворюють так звані заборонені та дозволені зони. Дозволені зони містять таку кількість підрівнів, що рівна числу елементарних комірок у кристалі. Із збільшенням енергії ширини зон зростають. Також проаналізовано багат шарову структуру, яка складається з ряду потенціальних ям та бар'єрів. Таку структуру має квантовий каскадний лазер. Знайдено дискретні рівні енергії та відповідні хвильові функції.

## РОЗДІЛ 3. РЕЗОНАНСНІ ЯВИЩА В ПРИЗМОВИХ СТРУКТУРАХ

### 3.1. Взаємодія оптичних хвиль з мікро- та наноструктурами в умовах хвилеводного резонансу

Взаємодія електромагнітного випромінювання з мікро- та наноструктурами в умовах хвилеводного резонансу може бути основою оптичного та фотонного приладобудування. Зокрема, хвилеводний резонансний ефект, що базується на структурі хвилеводної ґратки, привернув велику увагу за останні три десятиліття [8, 12, 14]. Можна вважати, що резонансні явища в структурах, що включають ґратки та діелектричні хвилеводи, досліджуються як теоретично так і експериментально, починаючи з роботи Вуда [1]. Коли така структура опромінюється падаючим світловим променем, частина променя безпосередньо пропускається, частина дифрагує, а потім потрапляє в шар хвилеводу.

ґраткові структури, що працюють на явищі хвилеводного резонансу знайшли практичне застосування в якості різноманітних фільтрів [377], поляризаторів [378], і крім того, цей різновид оптичного елемента можна легко використовувати в сенсорній електроніці [379] та в медицині [380]. Варто зазначити, що різні моделі та чисельні методи, такі як АТМЗХ, були розроблені, щоб зрозуміти і описати це оптичне явище. На сьогоднішній день глибина і широта досліджень у цій галузі є значними. У цій частині роботи ми продовжуємо вивчати нові структури, що працюють на явищі хвилеводного резонансу та можуть застосовуватись в різноманітних сенсорних системах.

#### 3.1.1 Введення оптичної хвилі в планарний хвилевід за допомогою призми

Призмову структуру, яка містить два діелектричні шари з різними показниками заломлення можна розглядати як планарний хвилевід. У разі ретельно підібраних параметрів в такій призмовій структурі виникає хвилеводний резонанс, причому для обох поляризацій. На відміну від плазмон-поляритонного резонансу для збудження хвилеводного резонансу не потрібне

використання металу, а кутове положення мінімуму відбивання резонансної кривої такої структури практично не відрізняється від ППП структур.

Призмона структура з тонкою металевою плівкою золота чи срібла використовується для вимірювання зміни показника заломлення рідких середовищ: розчинів, біологічних рідин, тощо при дії різноманітних факторів [33]. Принцип вимірювання ґрунтується на реєстрації зміщення кута мінімуму відбивання від металевої плівки. В цих структурах тонкий металевий шар служить для збудження з допомогою призми поверхневих плазмон-поляритонних хвиль або хвилеводних мод у структурі з діелектричним шаром. При відсутності резонансу коефіцієнт відбивання від такої структури близький до одиниці. За наявності резонансу та ретельно підібраних параметрах складових структури коефіцієнт відбивання рівний нулю через повне поглинання енергії електромагнітної хвилі в металевій плівці [381].

### **3.1.2 Підсилення та поглинання в умовах хвилеводного резонансу у призмона структурі**

Аналіз фізичних процесів, що виникають в призмонах структурах, дозволяє висловити думку, що цікаві властивості матиме структура, наведена на рис. 3.1. У цій структурі на грань скляної призми з показником заломлення  $n$  нанесено два шари з товщинами  $d_1$  і  $d_2$  та показниками заломлення  $n_1$  і  $n_2$ , причому  $n_2$  є комплексною величиною, а уявна його частина може бути додатною або від'ємною і  $\text{Im}(n_2) \ll \text{Re}(n_2)$ .

Показники заломлення  $n_1$  і  $n_3$ , є меншими за  $\text{Re}(n_2)$ . За таких умов у шарі з показником заломлення  $n_2$  може збуджуватися хвилеводна мода, постійна поширення якої також буде комплексною [381].

Для вивчення оптичних властивостей призмона структурі з хвилеводом використовувався матричний метод, детально описаний в роботі [382], який використовується для розрахунку коефіцієнтів відбивання та пропускання

багатошарових структур, наприклад, інтерференційних дзеркал та фільтрів [383,384].

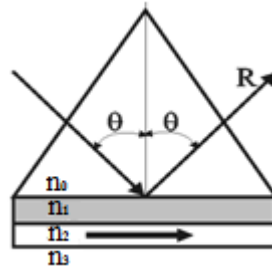


Рис. 3.1. Призмона структура з хвилеводом

Наведемо співвідношення, за яким розраховується амплітудний коефіцієнт відбивання:

$$r = \frac{\eta_0 E_0 - H_0}{\eta_0 E_0 + H_0}, \quad (3.1)$$

де  $r$  – амплітудний коефіцієнт відбивання,  $\eta_0 = n_0 \cos \theta_0$  – узагальнений показник заломлення матеріалу призми для хвиль TE поляризації,  $E_0$  – напруженість електричного поля електромагнітної хвилі в середовищі з показником заломлення  $n_0$ ,  $H_0$  – напруженість магнітного поля електромагнітної хвилі в середовищі з показником заломлення  $n_0$ ,  $\theta_0$  – кут поширення плоскої хвилі в призмі.

Коефіцієнт відбивання за інтенсивністю рівний:

$$R = |r|^2. \quad (3.2)$$

Кут поширення плоскої хвилі вибирався таким, щоб спостерігалось повне внутрішнє відбивання на межі середовищ з показниками заломлення  $n_0$  і  $n_1$ , тобто  $\theta_0 > \arcsin[\sin(n_1/n_0)]$ . Також прийнято, що  $n_1 > n_3$ . За таких умов при певних параметрах структури може виникнути резонансне збудження хвилеводної моди і завдяки поглинанню у шарі з показником заломлення  $n_2$  коефіцієнт відбивання може стати рівним нулю. В загальному випадку коефіцієнт відбивання є величиною комплексною і він рівний нулю, коли рівні



нулю дійсна і уявна частини чисельника виразу (3.1). Побудувавши графіки залежності  $\theta_0$  як функції довжини хвилі  $\lambda$ ,

$$\begin{aligned} F_1(\theta_0, \lambda) &= \operatorname{Re}(\eta_0 E_0 - H_0) = 0, \\ F_2(\theta_0, \lambda) &= \operatorname{Im}(\eta_0 E_0 - H_0) = 0, \end{aligned} \quad (3.3)$$

можна визначити  $\theta_0$  і  $\lambda$  на перетині обох кривих, при яких коефіцієнт відбивання рівний нулю.

Якщо шар з показником заломлення  $n_2$  має підсилювальні властивості, то можливо добитися значного підсилення падаючої плоскої хвилі при резонансі хвилеводної моди. Така ситуація можлива, коли знаменник виразу (3.1) рівний нулю. Знову побудувавши графіки залежності  $\theta_0$  як функції довжини хвилі  $\lambda$ ,

$$\begin{aligned} F_1(\theta_0, \lambda) &= \operatorname{Re}(\eta_0 E_0 + H_0) = 0, \\ F_2(\theta_0, \lambda) &= \operatorname{Im}(\eta_0 E_0 + H_0) = 0, \end{aligned} \quad (3.4)$$

можна визначити  $\theta_0$  і  $\lambda$  на перетині обох кривих, при яких коефіцієнт відбивання прямує до нескінченності.

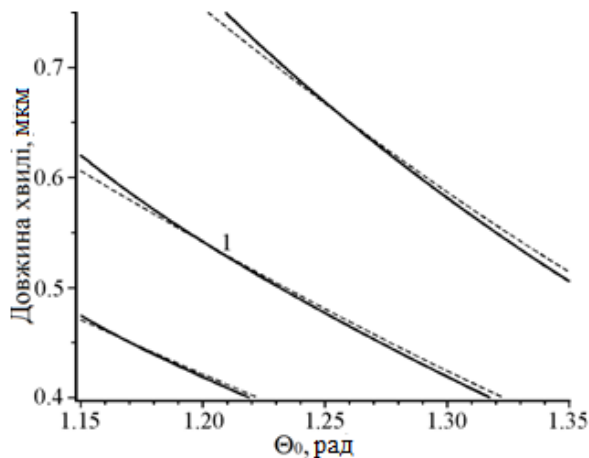


Рис. 3.2. Графічні залежності у відповідності до виразів (3.3). Точка 1 перетину відповідних кривих визначає резонансний довжину хвилі 0,5388 мкм та кут падіння 1,2021 рад

Числовий аналіз при наявності поглинання в хвилеводному шарі проводився при таких параметрах:  $n_0 = 1.151$ ,  $n_1 = 1.38$ ,  $d_1 = 0,4 \text{ мкм}$ ,  $n_2 = 1.54 - i0.001$ ,  $d_2 = 1,5 \text{ мкм}$ ,  $n_3 = 1.0$ . На рис. 3.2 наведено графічні залежності, отримані згідно аналітичних виразів (3.3).

На цьому рисунку суцільна крива відповідає уявній частині виразу (3.3), а штрих-пунктирна крива – дійсній частині цього ж виразу. У відповідності до рис. 3.2 в заданих діапазонах можливі три пари довжин хвиль та відповідних кутів, коли спостерігається резонанс хвилеводних мод  $i$ , як наслідок, коефіцієнт відбивання рівний нулю. Параметри однієї з таких пар рівні:  $\lambda = 0,5388 \text{ мкм}$ ,  $\theta_0 = 1.2021 \text{ рад}$ .

На рис. 3.3 наведено залежність коефіцієнта відбивання від  $\theta_0$  для довжини хвилі  $\lambda = 0,5388 \text{ мкм}$ . Бачимо, що при куті  $\theta_0 = 1.2021 \text{ рад}$  коефіцієнт відбивання рівний нулю, тобто тут маємо повне поглинання у хвилеводному шарі за рахунок резонансу хвилеводної моди. Потужність електромагнітної хвилі, що поглинається на одиницю довжини хвилеводу рівна потужності, яка вноситься в хвилевод на одиницю довжини. Крім цього маємо неповне поглинання на довжині хвилі  $0.5388 \text{ мкм}$  та куті  $1.33 \text{ рад}$ .

Коефіцієнт відбивання при деякому відхиленні від резонансних умов практично рівний одиниці.

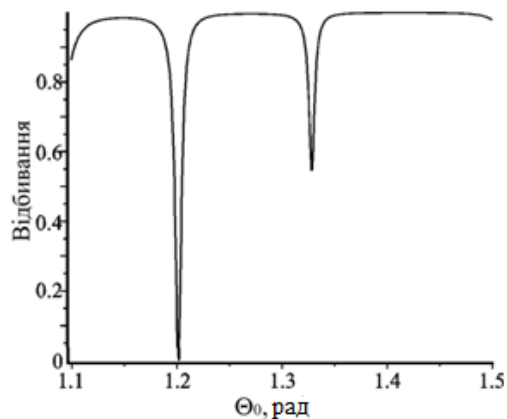


Рис.3.3. Залежність коефіцієнта відбивання від кута поширення плоскої хвилі у скляній призмі ( $\lambda = 0,5388 \text{ мкм}$ )

Якщо показник заломлення  $n_2$  має додатну уявну частину, то у структурі можливе підсилення. Для аналізу підсилення в призмовій структурі всі параметри, за виключенням  $n_2$ , рівні тим же параметрам, при яких проводився попередній аналіз при поглинанні призмовою структурою. При цьому

$n_2 = 1.54 + i0.001$ . Якщо побудувати графічні залежності у відповідності до формули (3.4), то отримаємо залежності, які повністю ідентичні залежностям, що наведені на рис. 3.2. На перетині кривих у відповідності до формули (3.4) отримаємо відповідні пари довжин хвиль та кути поширення плоскої хвилі в призмі, на яких можливе значне підсилення. На Рис. 3.4 наведено коефіцієнт відбивання (підсилення) від кута поширення плоскої хвилі для довжини хвилі  $\lambda = 0,5388$  мкм. При куті  $\theta_0 = 1.2021$  рад маємо підсилення більше ніж у  $1.8 \times 10^7$  разів.

З рис. 3.4 можна зробити висновок, що максимальне підсилення можна отримати у дуже вузьких межах зміни кута падіння. Змінюючи параметри складових призмової структури, в тому числі уявну частину показника заломлення  $n_2$ , можна змінювати довжину хвилі та кут поширення, при яких буде відбуватися резонансне поглинання або підсилення [385]. Така призмova структура може мати ще інше застосування, наприклад, для вимірювання показників поглинання середовища з показником заломлення  $n_3$ . В залежності від уявної частини  $n_3$  буде змінюватись ширина резонансного провалу на залежності коефіцієнта відбивання від кута поширення плоскої хвилі в призмі.

Нами проведено дослідження характеристик призмової структури, коли можливе поглинання чи підсилення в середовищі з показником заломлення  $n_3$  [381]. На рис. 3.5 наведено залежності довжини хвилі від кута падіння на основі дійсної частини формули (3.6) (штрих-пунктирна крива) та уявної частини цього ж виразу (суцільна крива) при наявності підсилення в середовищі з показником заломлення  $n_3$ . Розрахунок проводився при таких параметрах:  $n_0 = 1.151$ ,  $n_1 = 1.38$ ,  $d_1 = 0,487$  мкм,  $n_2 = 1.54$ ,  $d_2 = 0,8$  мкм,  $n_3 = 1.333 + i0.002$ .

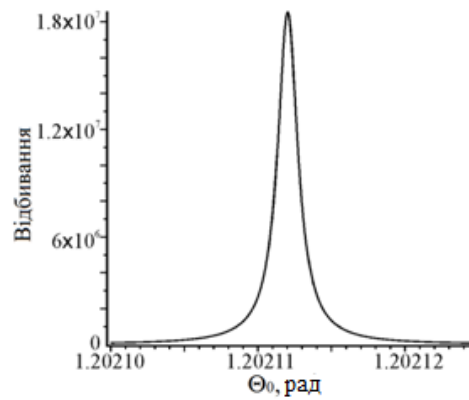


Рис. 3.4. Залежність коефіцієнта відбивання від кута поширення плоскої хвилі у скляній призмі ( $\lambda = 0,5388\text{мкм}$ )

На рис. 3.5 (на відміну від рис. 3.2) не спостерігається явного перетину двох кривих у відповідності до формули (3.4), але в деякому діапазоні кутів та відповідних довжин хвиль вони практично лягають одна на одну.

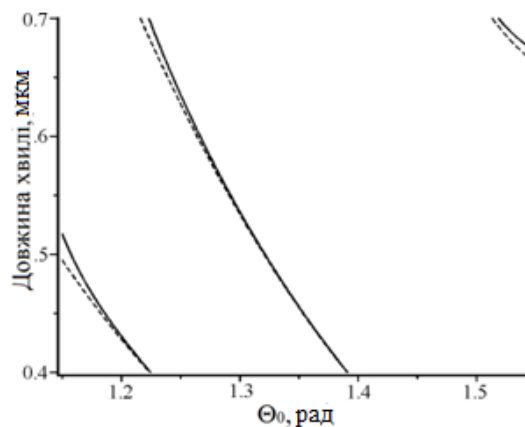


Рис. 3.5. Графічні залежності у відповідності до виразів (3.4)

Така структура може бути використана для дослідження люмінесценції рідких середовищ, наприклад, розчинів барвників у воді. Інтенсивне збуджуюче випромінювання з малою довжиною хвилі буде поглинатися в середовищі з показником заломлення  $n_3$ , тим самим показник заломлення стане комплексним з додатною уявною величиною. Тут буде виникати люмінесценція з одночасним підсиленням, причому певна довжина хвилі буде в призмі поширюватися під певним кутом.

### 3.1.3. Хвилевід на призмі як сенсорний елемент

Можливий також резонанс хвилеводних мод у призмовій структурі яка містить хвилеводний шар діелектрика нанесений на металеву плівку. В цьому випадку резонанс хвилеводних мод можливий для хвиль обох поляризацій. Нами проведено дослідження такої структури з наступними параметрами:  $\lambda = 1,0\text{мкм}$ ,  $n_1 = 1,76$ , металева плівка срібла з товщиною  $44,2\text{мкм}$  і показником заломлення  $n_m = 0.0771 + i7.07$ , шар діелектрика товщиною  $1,04\text{мкм}$  з показником заломлення  $n_1 = 1,5$  досліджуване середовище з показником заломлення  $n_s = 1,33$ , який може змінюватися в невеликих межах [386].

Результати показали, що резонанс хвилеводних мод для даного діелектричного шару, і відповідно високе поглинання для хвиль ТЕ поляризації, можливі для двох мод, які збуджуються при двох різних кутах падіння  $0.85848\text{ рад}$  і  $0.87314\text{ рад}$  відповідно. Очевидно, що розміщення провалів залежить від показника заломлення досліджуваного середовища і ці провали будуть зміщуватися при зміні його показника заломлення. Аналогічні результати отримані для хвиль ТМ поляризації, але на залежності коефіцієнта відбивання від кута падіння з'являється ще один провал за рахунок плазмон-поляритонного резонансу [387]. Такі структури мають переваги перед класичною структурою: тонка плівка срібла захищена діелектричним шаром від агресивного досліджуваного середовища, мінімум відбивання можна фіксувати на двох кутах, що може підвищити точність вимірювань.

Розглянемо більш детально хвилеводну призмову структуру як сенсорний елемент, яка містить два діелектричних шари, як показано на рис. 3.1. Необхідно розробити модель і та знайти фізичні параметри шарів для моделювання характеристик приладу. Рішення зазначених фізичних задач дозволить обґрунтовано оптимізувати технологічні підходи і технічні прийоми при розробці оптичних сенсорів. Для цього проведено дослідження залежності коефіцієнта відбивання від кута падіння променя при різних параметрах призмової хвилеводної структури [388, 389]. Тобто, потрібно підібрати матеріал

призми, матеріал хвильоводного шару, його товщину, кут падіння променя, а також провести дослідження відгуку структури при зміні показника заломлення досліджуваної речовини.

Спершу дослідження проводились при таких параметрах: довжина хвилі випромінювання лазера  $\lambda=0.6328$  мкм, плівка діелектрика товщиною 0,5мкм і показником заломлення  $n_1=1,38$ , показник заломлення другого діелектричного шару  $n_2=1.61$ , показник заломлення досліджуваної рідини  $n_3=1.333$ , товщина діелектричного шару рівна 0.8 мкм. При таких параметрах структури мінімум коефіцієнта відбивання спостерігався для матеріалу призми з показником заломлення  $n_0 = 1,76$ .

Якщо показник заломлення  $n_s$  середовища, яке прилягає до діелектричного шару змінюється, то, відбувається зміщення мінімуму коефіцієнта відбивання. Чутливість  $S_m$  зміщення мінімуму коефіцієнта відбивання до зміни  $n_s$  можна визначити таким чином:

$$S_m = \frac{\theta_{\min}(n_s + \Delta n_s) - \theta_{\min}(n_s)}{\Delta n_s}. \quad (3.5)$$

В таблиці 3.1 наведено кути мінімального відбивання та чутливість до зміни  $n_3$  для декількох матеріалів призми.

Таблиця 3.1. Чутливість хвильоводного резонансу та кут мінімального відбивання в залежності від матеріалу призми

$n_0$	1,45	1,479	1,52	1,61	1,7	1,76	2,2
$\theta_{\min TE_s}$ , рад	1,21945	1,17012	1,11111	1,00905	0,93000	0,88567	0,66821
$\theta_{\min TM_s}$ , рад	1,21640	1,17474	1,11407	1,01054	0,93093	0,88638	0,66843
$S_{mTE_s}$ , рад	0,9	0,8	0,6	0,4	0,4	0,3	0,2
$S_{mTM_s}$ , рад	0,9	0,7	0,6	0,5	0,4	0,4	0,2

На наступному етапі роботи проведено дослідження впливу показника заломлення першого шару на спектральні характеристики та чутливість за таких

параметрів призмової структури: показник заломлення матеріалу призми  $n_0 = 1.76$ , довжина хвилі випромінювання лазера  $\lambda = 0.6328$  мкм, плівка діелектрика товщиною 0,5 мкм, показник заломлення другого діелектричного шару  $n_2 = 1.6$ , показник заломлення досліджуваної рідини  $n_3 = 1.333$ , товщина другого діелектричного шару 0.8 мкм. В таблиці 3.2 наведено чутливість хвилеводного резонансу та кут мінімального відбивання в залежності від матеріалу хвилеводного шару.

При таких параметрах структури мінімум коефіцієнта відбивання спостерігався у випадку TE поляризації для структури, де показник заломлення хвилеводного шару рівний  $n_1 = 1,44$ , а у випадку TM поляризації –  $n_1 = 1,43$ .

Таблиця 3.2. Чутливість хвилеводного резонансу та кут мінімального відбивання в залежності від матеріалу хвилеводного шару

$n_1$	1,38	1,42	1,43	1,44
$\theta_{minTE}$ , рад	0,88567	0,89645	0,89957	0,90287
$\theta_{minTM}$ , рад	0,88638	0,897567	0,900737	0,904055
$S_{mTE}$ , рад	0,3	0,4	0,4	0,41
$S_{mTM}$ , рад	0,36	0,38	0,39	0,38

Найступний етап – визначення оптимальної товщини хвилеводного шару. Якщо збільшувати товщину діелектричного шару, то мінімуми відбивання, що виникають за рахунок резонансу хвилеводних мод, будуть зміщуватися вправо на кутовій залежності, аж поки на певній товщині не почнуть зменшуватися. Причому, це характерно для обох поляризацій. Для обчислення такої системи бралися такі величини товщини шару як 0,1 мкм, 0,25 мкм, 0,3 мкм, 0,42 мкм, 0,5 мкм, 0,6 мкм, 0,66 мкм і 0,78 мкм. Результати оптимізації товщини хвилеводного шару  $d_1$  за зміщенням мінімуму коефіцієнта відбивання до зміни показника заломлення  $n_3$  представлені в таблиці 3.3

Отже, після того як ми визначили оптимальні параметри моделі сенсорного приладу, для подальшої його роботи нам потрібно створити калібрувальну

шкалу, з допомогою якої ми зможемо визначати, який саме матеріал досліджується, оцінюючи зсув резонансного кута для різних показників заломлення. Приклад залежності коефіцієнта відбивання від кута падіння для різних показників заломлення навколишнього середовища показано на рис. 3.6

Таблиця 3.3. Чутливість хвильового резонансу та кут мінімального відбивання в залежності від товщини хвильового шару

d1	0,1	0,25	0,3	0,5	0,6	0,66	0,78
$\theta_{TE}$ , рад	0,8678	0,88752	0,892517	0,88567	0,90472	0,864293	0,874749
$\theta_{TM}$ , рад	0,89215	0,892448	0,894685	0,86638	0,901843	0,901755	0,880486
$S_{mTE}$ , рад	0,6	0,25	0,23	0,41	0,53	0,85	0,14
$S_{mTM}$ , рад	0,48	0,28	0,29	0,39	0,46	0,58	0,29

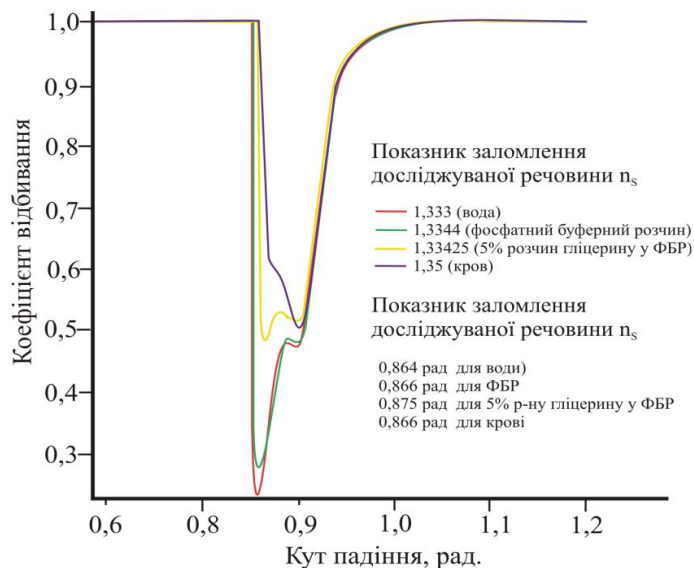


Рис. 3.6. Залежності коефіцієнта відбивання від кута падіння для різних показників заломлення навколишнього середовища

Отже на основі призмових структур, що працюють на явищі хвильового резонансу, можуть бути розроблені сенсорні елементи, з допомогою яких можна вимірювати зміну показника заломлення навколишнього середовища включаючи дослідження в реальному часі, або визначати концентрації матеріалу в розчині.



## **3.2. Резонанс поверхневих плазмон-поляритонів у призмових структурах**

Поверхневий плазмон-поляритонний резонанс широко використовується в різних сенсорних системах, оскільки забезпечує швидку, неруйнівну здатність виявляти різноманітні біохімічні реакції в режимі реального часу. Поверхнева плазмонна хвиля, як відомо, це коливання вільного заряду, яке відбувається на поверхні між діелектричним та металевим середовищем і збуджується зовнішнім електромагнітним джерелом випромінювання. Коли хвильовий вектор поверхневої плазмонної хвилі збігається з хвильовим вектором падаючого випромінювання, відбувається так зване явище поверхневого плазмонного резонансу. Встановлено, що ця умова резонансу дуже легко порушується навіть дуже невеликими змінами на межі метал-діелектрик, спричиненими зміною показника заломлення навколишнього середовища [33]. Отже, якщо довжина хвилі фіксується, то явище поверхневого плазмонного резонансу дозволяє не тільки точно вимірювати зміни показника заломлення або товщину середовища, що прилягає до металевої плівки, а також дозволяє виявити зміни адсорбційного шару на поверхні металу. На даний час розроблено велику кількість різноманітних сенсорів, що працюють на явищі поверхневого плазмонного резонансу, це для прикладу сенсори на основі ґраток, призм, різноманітних наноструктурованих матеріалів і інші. Однак, найбільшого поширення набули призмові сенсори, що працюють на явищі повного внутрішнього відбивання. Ці пристрої є потужними інструментами для дослідження в реальному часі біомолекулярних взаємодій, водних та газових середовищ.

### **3.2.1 Чисельний аналіз оптичних характеристик призмового сенсора, що працює на явищі поверхневого плазмонного резонансу**

Отже, розглянемо призмовий сенсорний елемент, що складається з скляної призми, шару срібла та тонкого шару хрому між ними для кращої адгезії. Аналіз такої структури проводився матричним методом, описаним в роботі [383].

Спершу проводилися теоретичні дослідження призмової структури з такими параметрами: показник заломлення матеріалу призми  $n_0 = 1,511$ , довжина хвилі випромінювання лазера  $\lambda = 0,633$  мкм, плівка хрому товщиною 5 нм з комплексним показником заломлення на даній довжині хвилі  $n_1 = 3,1399 - i3,3150$ , плівка срібла товщиною 50 нм з комплексним показником заломлення на даній довжині хвилі  $n_2 = 0,056253 - i4,2760$  [333], показник заломлення досліджуваного середовища  $n_s = 1,000290$  (повітря). Розрахована залежність коефіцієнта відбивання від кута падіння пучка для довжини хвилі 0,633 мкм представлена на рис. 3.7.

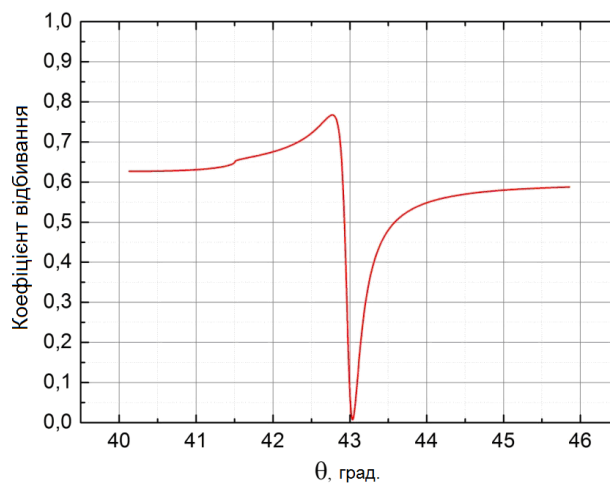


Рис. 3.7. Залежність коефіцієнта відбивання від кута падіння пучка на металеву плівку для довжини хвилі 0,633 мкм

При таких параметрах мінімум коефіцієнта відбивання для хвиль ТМ-поляризації  $R_{\min} = 0.00704$  спостерігався при куті  $\theta_{\min} = 43,03^\circ$  [390].

На наступному етапі роботи досліджено вплив зміни товщини шарів срібла і хрому на положення кута мінімуму коефіцієнта відбивання, що відповідає поверхневому плазмонному резонансу (див. рис. 3.8).

На рис. 3.8а зображені залежності коефіцієнта відбивання від кута падіння пучка на призмовий сенсор для різних товщин плівки срібла. З рисунка видно, що зміна товщини шару срібла впливає на положення поверхневого

плазмонного резонансу, на значення коефіцієнта відбивання в мінімумі та на форму кривої.

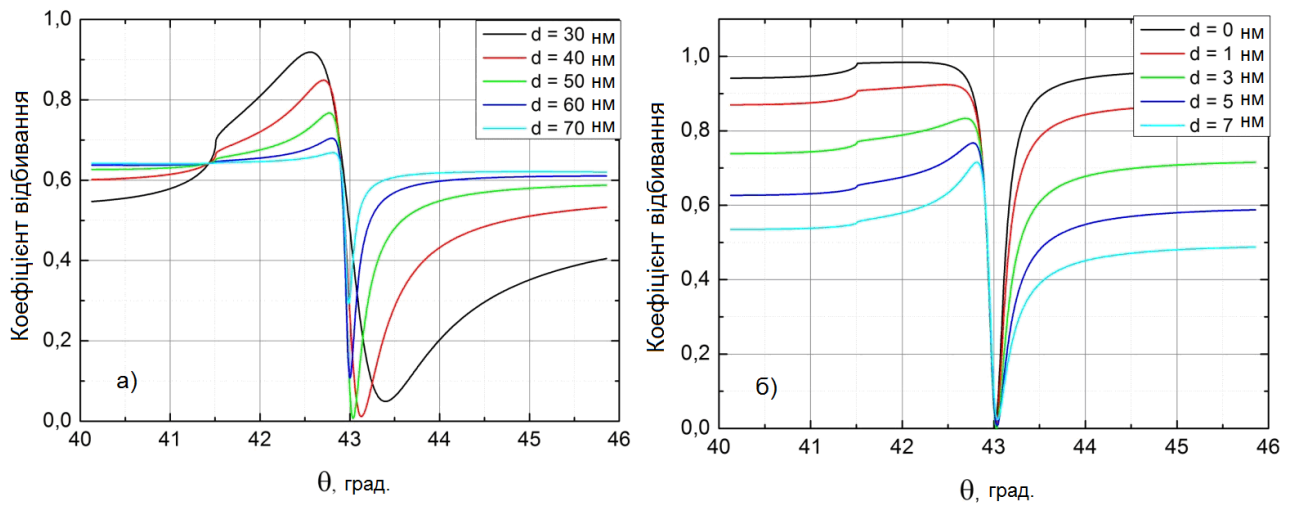


Рис. 3.8. Залежності коефіцієнта відбивання від кута падіння лазерного пучка ( $\lambda=0,633\text{мкм}$ ) на поверхню призмового серсора при різних товщинах шару срібла (а) та хрому (б)

При зменшенні товщини плівки срібла положення значення мінімуму відбивання зсувається в сторону більших кутів. Розрахунки показали, що значення коефіцієнта відбивання є найменшим для плівки срібла товщиною 50 нм.

На рис. 3.8б зображені залежності коефіцієнта відбивання від кута падіння пучка на призмовий сенсор для різних товщин плівки хрому. Зміна товщини шару хрому практично не впливає на положення кута поверхневого плазмонного резонансу, що можна пояснити невеликою товщиною плівки хрому.

Однак, варто зазначити, що товщина плівки хрому впливає на значення коефіцієнта відбивання у мінімумі та форму кривої. Довжина хвилі лазерного випромінювання також впливає на положення поверхневого плазмонного резонансу, як показано на рис. 3.9.

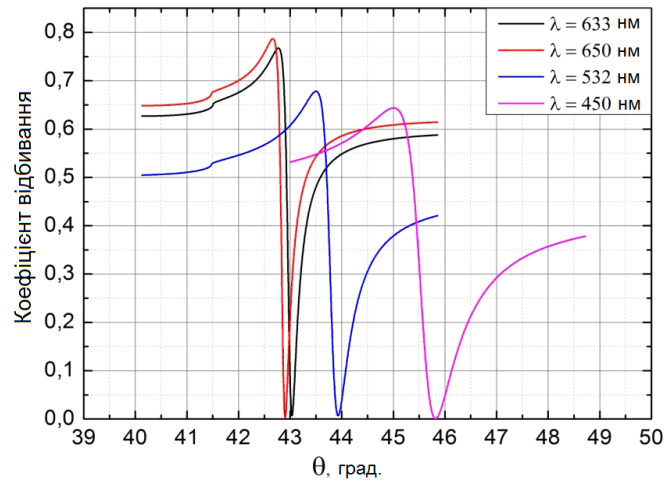


Рис. 3.9. Залежність коефіцієнта відбивання від кута падіння лазерного пучка на металеву плівку для різних значень довжин хвиль тестуючого випромінювання

Зі зменшенням довжини хвилі випромінювання положення мінімуму коефіцієнта відбивання зміщується вправо, тобто чим меншою буде довжина хвилі випромінювання, тим при більшому куті спостерігається мінімум коефіцієнта відбивання.

### 3.2.2. Чутливість призмових плазмонних сенсорів до зміни показника заломлення досліджуваного середовища

Основним параметром сенсора є його чутливість, тому наступним етапом досліджень є розрахунок залежності коефіцієнта відбивання від зміни показника заломлення досліджуваного середовища ( $n_s$ ). Проведено розрахунки для двох типів середовищ з різними показниками заломлення: повітряного та водного. Дослідження проводилися для довжини хвилі випромінювання 0,633 мкм. Залежність положення мінімуму коефіцієнта відбивання від кута падіння на призмий сенсор для чистого повітря ( $n_s = 1,000290$ ) та метану ( $n_s = 1,000441$ ) представлено на рис. 3.10. Як видно з рисунка при невеликих змінах показника заломлення досліджуваного середовища  $\Delta n_s = 0,000151$  положення кута поверхневого плазмонного резонансу  $\Delta\theta$  змістилося на  $0,01147^\circ$

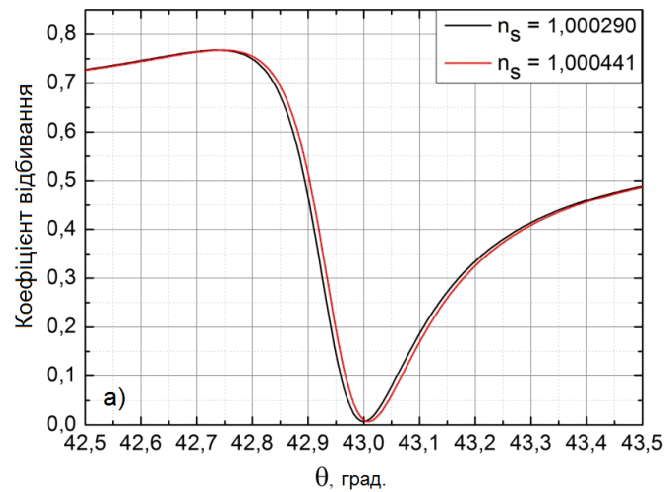


Рис. 3.10. Зміщення кута поверхневого плазмонного резонансу призматичного сенсора при зміні показника заломлення газового середовища

Результати моделювання зміщення положення мінімального значення коефіцієнта відбивання для випадку, коли досліджуваним середовищем є чиста вода  $n_{s1}=1,332986$  та спирт ( $n_{s2}=1,34$ ) представлено на рис. 3.11.

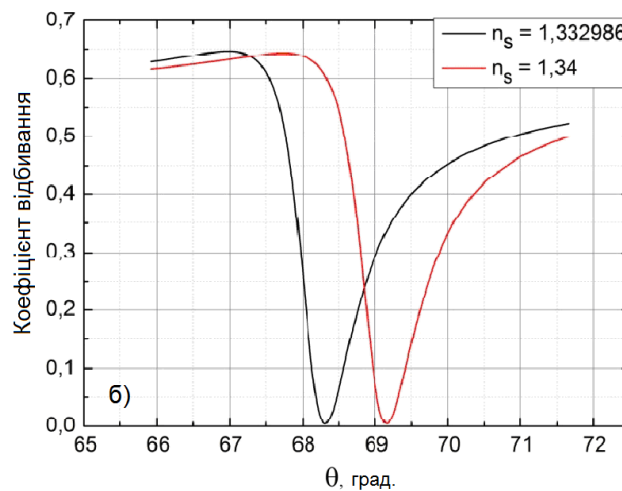


Рис. 3.11. Зміщення кута поверхневого плазмонного резонансу призматичного сенсора при зміні показника заломлення водного середовища

При зміні показника заломлення досліджуваного водного середовища на  $0,007$  кут поверхневого плазмонного резонансу  $\Delta\theta$  змістився на  $0,84^\circ$ .

### 3.2.3. Порівняння теоретично розрахованих спектрів відбивання призмової структури з експериментально визначеними

Теоретичний розрахунок оптичних характеристик проведено для двох різних джерел випромінювання з довжинами хвиль 0,633 та 0,650 мкм. Для довжини хвилі 0,633 мкм мінімум коефіцієнта відбивання  $R_{\min} = 0,416$  отримано при куті падіння  $\theta_{\min} = 43,5^\circ$ . Для довжини хвилі 0,650 мкм мінімум коефіцієнта відбивання  $R_{\min} = 0,43$  отримано при куті падіння  $\theta_{\min} = 43,3^\circ$ .

Експериментальний макет призмового сенсора було виготовлено на основі скляної призми (матеріал БК7) з покриттям, яке складається з шару хрому Cr товщиною порядку 5 нм, шару срібла товщиною 50 нм, які нанесені методом термічного розпилення у вакуумі. При термічному напиленні у вакуумній камері створювався і підтримувався вакуум на рівні  $1 \div 5 \cdot 10^{-6}$  мм рт.ст. Напилення матеріалів проводилося при попередньому прогріванні підкладки до температури  $200 \div 250^\circ\text{C}$ . Швидкість напилення матеріалів витримувалася в межах 0,04-0,06 мкм/хв.

Дослідження оптичних характеристик отриманого призмового сенсора проводилися на експериментальній установці, структурна схема та макет якої представлено на рис. 3.12. Експериментальні результати добре корелюють з теоретичними, як показано на рис.3.13. та 3.14.

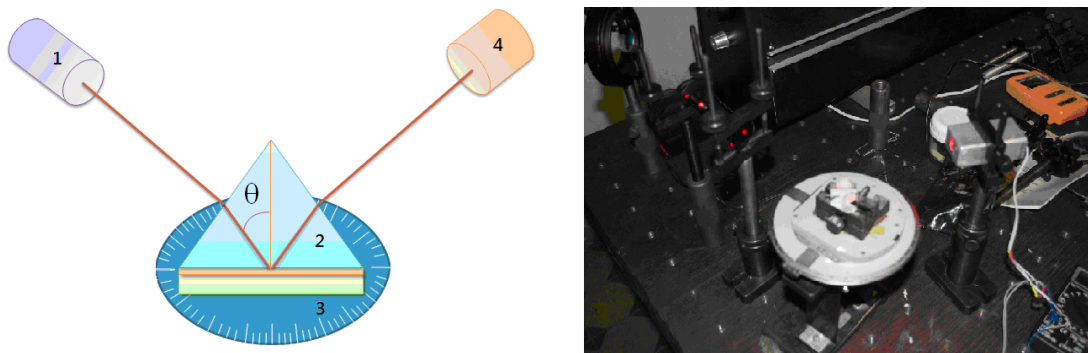


Рис. 3.12. Структурна схема та макет експериментальної установки для досліджень параметрів сенсора зміни показника заломлення, що працює на явищі плазмонного резонансу. До схеми увійшли: 1 – лазер, 2 – скляна призма, 3 – кутомірний столик, 4 – фотоприймач

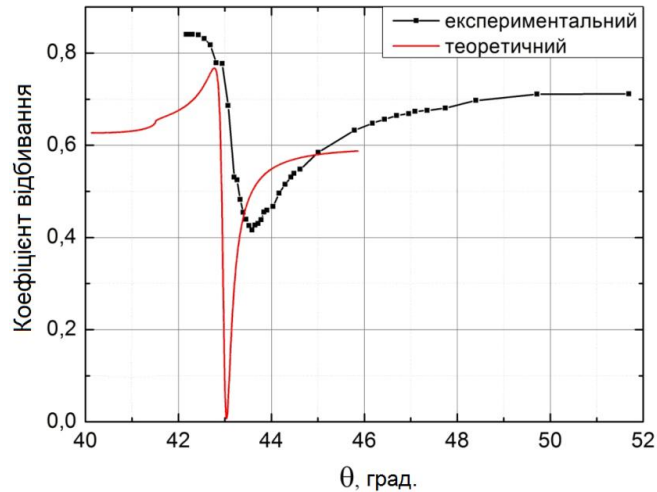


Рис. 3.13. Експериментальні та теоретичні результати дослідження залежності коефіцієнта відбивання від кута падіння променя на призмий сенсор для довжини хвилі 0,633 мкм

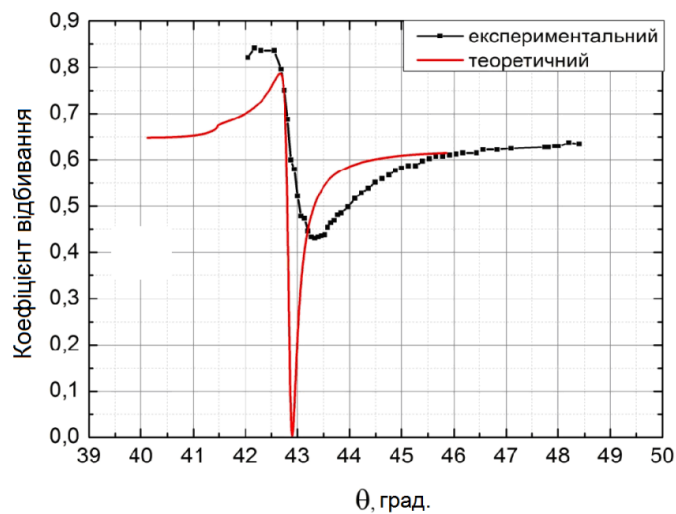


Рис. 3.15. Експериментальні та теоретичні результати дослідження залежності коефіцієнта відбивання від кута падіння променя на призмий сенсор для довжини хвилі 0,650 мкм

Порівнявши результати досліджень, можна зробити висновок, що існує незначне неспівпадіння положення кута поверхневого плазмонного резонансу. Для довжини хвилі 0,633 мкм воно складає  $\Delta\theta = 0,55^\circ$ , а для довжини хвилі 0,650 мкм  $\Delta\theta = 0,45^\circ$ . Таке відхилення можна пояснити неточностями

отриманих товщин шарів при виготовленні, а також тим, що реальні значення комплексних показників металів відрізнялись від використаних при розрахунках.

Варто зауважити, що неспівпадіння за глибиною коефіцієнта відбивання в мінімумі може бути викликано дифузією і розсіянням в шарах металів, напилених на поверхню призми, оскільки для теоретичних розрахунків коефіцієнта відбивання ці явища не враховувалися [391].

Запропонований сенсор може бути корисним для дослідження різних хімічних та біологічних середовищ.

### 3.3. Порівняльний аналіз резонансу поверхневих плазмон-поляритонів та хвильоводних мод у призмових структурах

В призмовій структурі з тонкою металевою плівкою виникає резонанс поверхневих плазмон-поляритонів, коли показник заломлення матеріалу призми більший ніж показник заломлення середовища, що прилягає до металевої плівки [58]. В цьому випадку при ретельно відібраних параметрах структури коефіцієнт відбивання пучка від металевої плівки може бути рівним нулю. Приклад такої структури показаний на рис. 3.15а. На основі такої структури розроблені пристрої, за допомогою яких можна вимірювати зміну показника заломлення рідкого середовища під впливом хімічних чи біохімічних реагентів. Можлива інша призмовева структура, яка дещо відрізняється від наведеної на рис. 3.15б. В цій структурі на металеву плівку нанесена тонка плівка діелектрика, яка при товщинах більших відповідної виличини, може стати планарним хвильоводом [392].

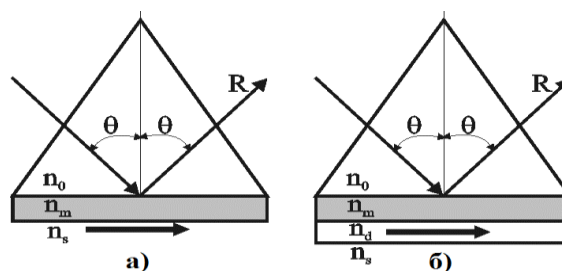


Рис. 3.15. Призмовева структура плазмон-поляритонного та хвильоводного резонансів



Як зазначалось вище, при певних параметрах такої призмової структури виникає резонанс хвилеводних мод, причому для обох поляризацій, або резонанс плазмон – поляритонів для хвиль ТМ поляризації. Знову ж таки, при ретельно підібраних параметрах структури при резонансах плазмон – поляритонів чи хвилеводних мод можна досягнути коефіцієнта відбивання лазерного пучка від металевої плівки близького до нуля [392].

При зміні показника заломлення середовища, що прилягає до діелектричної плівки, мінімум коефіцієнта відбивання зміщується за кутом. Експериментальні дослідження показали, що зміна кута мінімального відбивання досягає в кращому випадку кількох десятих долей кутового градуса при реальних змінах показника заломлення досліджуваних біохімічних водних розчинів [392]. Існує інший метод фіксації зміни показника заломлення в досліджуваних середовищах. В цьому випадку підбирають такий кут падіння лазерного пучка на металеву плівку, щоб коефіцієнт відбивання був мінімальний, бажано близьким до нуля. При невеликій зміні показника заломлення резонанс порушується і коефіцієнт відбивання стає суттєво відмінним від нуля [33]. За результатами можна зробити висновок про високу чутливість коефіцієнта відбивання до зміни показника заломлення.

Отже, проведемо теоретичне порівняння характеристик двох типів призмових структур та знайдемо їх параметри для досягнення вищої чутливості до зміни показника заломлення досліджуваного середовища.

### **3.3.1. Особливості кутових залежностей коефіцієнта відбивання у призмових структурах**

Аналіз таких призмових (багатошарових) структур проводився матричним методом, детально описаним в роботі [393]. Спершу дослідження проводились при таких параметрах: показник заломлення матеріалу призми  $n = 1,76$ , довжина хвилі випромінювання лазера  $\lambda = 0,6328$  мкм, плівка металу із срібла, яке має діелектричну проникність на довжині хвилі  $\lambda = 0,6328$  мкм:  $-17,62 - i0,42$  [333],

показник заломлення діелектричного шару  $n_d = 1,479$ , показник заломлення досліджуваної рідини  $n_s = 1,333$ , товщина діелектричного шару 0,8 мкм. При таких параметрах структури мінімум коефіцієнта відбивання спостерігався для хвиль TE поляризації при товщині плівки металу 50,4 мкм, а для хвиль TM поляризації – 56,4 нм [394]. При таких товщинах параметри металевої плівки співпадають з параметрами об'ємних зразків. На рис. 3.16 наведені залежності коефіцієнтів відбивання від кута падіння лазерного пучка на металеву плівку.

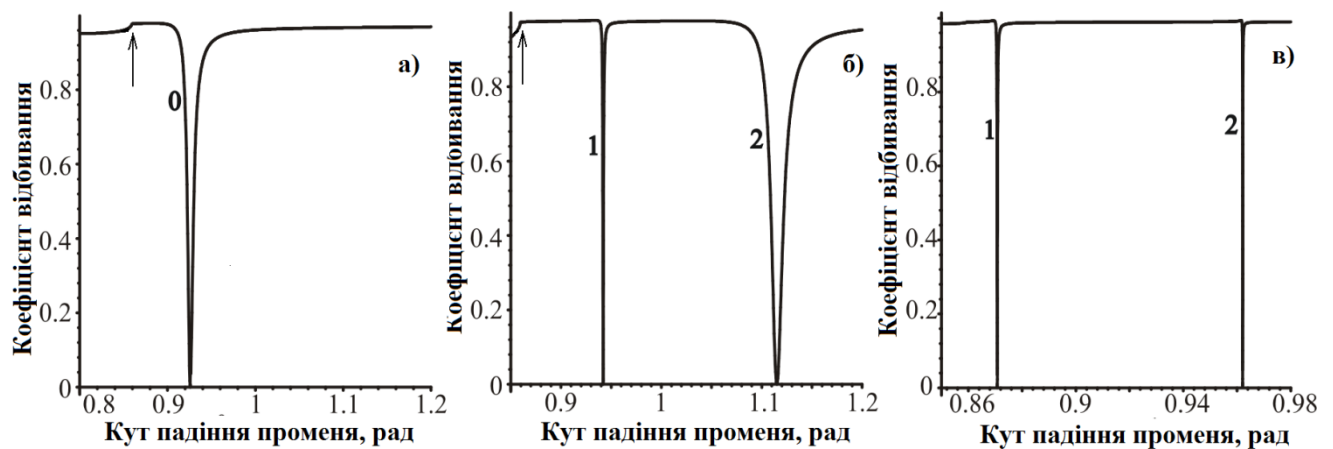


Рис. 3.16. Залежності коефіцієнта відбивання від кута падіння пучка на металеву плівку: а) ТМ поляризація, товщина діелектрика рівна нулю, б) ТМ поляризація, товщина діелектрика 0,8 мкм, в) ТЕ поляризація, товщина діелектрика 0,8 мкм.

Стрілкою позначені кути (відповідають куту повного внутрішнього відбивання) у відповідності до виразу  $\theta = \arcsin\left(\frac{n_0}{n_s}\right)$ .

На рис. 3.16а представлена кутова залежність коефіцієнта відбивання від кута падіння пучка на металеву плівку, і мінімум відбивання ( $R_{\min} = 7,7 \cdot 10^{-5}$ ,  $\theta_{\min} = 0,9258$  рад) спостерігаємо при резонансі поверхневих плазмон-поляритонів. Очевидно, що кут мінімального відбивання повинен задовільняти такій умові:

$$\theta_{0\min} > \arcsin\left(\frac{n_s}{n_0}\right) \quad (3.6)$$

На рис. 3.16б наведені кутові залежності коефіцієнта відбивання для хвиль ТМ поляризації при наявності діелектричного шару. Перший мінімум ( $R_{1\min} = 5,5 \cdot 10^{-5}$ ,  $\theta_{1\min} = 0,942017$  рад), виникає за зарахунок хвилеводного резонансу, і він може реалізуватись за таких умов:

$$\arcsin\left(\frac{n_d}{n_0}\right) > \theta_{1\min} > \arcsin\left(\frac{n_s}{n_0}\right). \quad (3.7)$$

Причиною другого мінімуму ( $R_{2\min} = 6,9 \cdot 10^{-5}$ ,  $\theta_{2\min} = 1,115$  рад) є резонанс поверхневих плазмон-поляритонів, і цей резонанс може спостерігатись при куті, що задовільняє такій умові:

$$\theta_{2\min} > \arcsin\left(\frac{n_d}{n_0}\right). \quad (3.8)$$

Як бачимо, кути  $\theta_1 = \arcsin\left(\frac{n_s}{n_0}\right) = 0,8593$  рад,  $\theta_2 = \arcsin\left(\frac{n_d}{n_0}\right) = 0,9979$  рад

грають роль меж, що визначають області можливих резонансних явищ та розділяють природу цих явищ (плазмон-поляритонний чи хвилеводний резонанс).

На рис. 3.16в наведені кутові залежності коефіцієнта відбивання для хвиль ТЕ поляризації. Маємо два мінімуми  $R_{1\min} = 1,7 \cdot 10^{-5}$ ,  $\theta_{1\min} = 0,8708$  рад,  $R_{2\min} = 4,74 \cdot 10^{-3}$ ,  $\theta_{2\min} = 0,9621$  рад, які виникають за рахунок резонансу хвилеводних мод у діелектричному шарі з товщиною 0,8 мкм. Ці мінімуми для хвиль ТЕ поляризації знизу та зверху обмежуються кутами  $\theta_1$  і  $\theta_2$ .

При зменшенні товщини діелектричного шару мінімуми коефіцієнта відбивання за рахунок резонансу хвилеводних мод будуть зміщуватися вліво на кутовій залежності, а кількість мінімумів коефіцієнта відбивання зменшуватися, аж поки зовсім не зникнуть. Причому, це характерно для обох поляризацій. Проте, мінімум відбивання для хвиль ТМ поляризації, що виникає завдяки резонансу поверхневих плазмон-поляритонів, не зникає при зменшенні товщини діелектричного шару.

### 3.3.2 Чутливість зміщення мінімуму коефіцієнта відбивання до зміни показника заломлення навколишнього середовища

Якщо показник заломлення  $n_s$  середовища, яке прилягає до діелектричного шару чи до металевої плівки, змінюється, то, відповідно, відбувається зміщення мінімуму коефіцієнта відбивання. Чутливість  $S_m$  зміщення мінімуму коефіцієнта відбивання до зміни  $n_s$  можна визначити за формулою 3.5. Очевидно, що при цьому  $n_s$  повинно бути достатньо малим. В наших числових експериментах  $\Delta n_s = 10^{-4}$  [382, 394]. Початкове значення  $n_s$  рівне 1,333.

Розрахунок чутливості за формулою (3.5) проводився для тих самих даних, що і кутові залежності коефіцієнта відбивання, відображені на рис. 3.17. Чутливість  $S_m$  для плазмон-поляритонного резонансу за відсутності діелектричного шару (рис. 3.16а) складає 1,12 рад. Але чутливість за рахунок плазмон-поляритонного резонансу за наявності діелектричного шару  $d = 0,8$  мкм різко зменшується і практично рівна нулю (мінімум 2 рис. 3.16б). Навіть при зміні  $n_s$  на 0,1 кут мінімального відбивання з точністю до  $10^{-4}$  не зміщується. Це можна пояснити тим, що при плазмон-поляритонному резонансі електромагнітне поле швидко зменшується при відході від металевої плівки. Тому поле в середовищі з показником заломлення  $n_s$  буде дуже низьким за наявності діелектричного хвилеводу, і тим самим зміна показника заломлення досліджуваного середовища практично не впливає на поширення електромагнітного поля в призмовій структурі за наявності діелектричного шару.

Мінімум 1 на рис. 3.16б формується за рахунок хвилеводного резонансу в діелектричному шарі. В цьому випадку електромагнітне поле є приблизно однакове в поперечному перерізі хвилеводу, і починає швидко ослаблятися в досліджуваному середовищі при відході від межі діелектрик – рідина. Тому слід очікувати певної чутливості мінімального кута відбивання до зміни  $n_s$ . Для даного випадку чутливість, розрахована за виразом (3.5), складає 0,1 рад, тобто на порядок менша ніж при плазмон-поляритонному резонансі. Це знову можна

пояснити тим, що поле на межі діелектрик – рідина у випадку хвилеводного резонансу є меншим ніж поле на межі метал – рідина у випадку плазмон – поляритонного резонансу.

Для хвиль ТЕ поляризації у призмівій структурі різкого мінімуму коефіцієнта відбивання від металевої плівки можна досягнути при резонансі хвилеводної моди (мод), який може виникнути лише за наявності між металевою плівкою та досліджуваною рідиною діелектричного шару, причому, товщиною більше певної величини. Чутливість, розрахована за формулою (3.5), для другого мінімуму (рис. 3.16в) складає 0,0423 рад, а для першого мінімуму – 0,32 рад. Така велика відмінність у величині чутливості для двох мінімумів пояснюється тим, що перший мінімум розміщується ближче до кута повного внутрішнього відбивання  $\theta_1$  ніж другий мінімум. Тому для першого мінімуму поле в рідині буде повільніше зменшуватися при відході від межі діелектрик – рідина ніж для другого мінімуму. Отже, можна очікувати, що зміною товщини діелектричного шару можна підводити перший мінімум якнайближче до кута повного внутрішнього відбивання  $\theta_1$  і тим самим збільшувати чутливість. В Таблиці 3.4 наведено кути мінімального відбивання  $\theta_{1\min}$  та чутливість  $S_m$  для різних товщин діелектричного шару. Для розрахунку використано кут повного внутрішнього відбивання  $\theta_1$  рівний 0,8593 рад при  $n_s = 1,333$ .

Таблиця 3.4 Чутливість хвилеводного резонансу та кут мінімального відбивання в залежності від товщини діелектричного шару

1	$d_d$ , мкм	0,225	0,23	0,73	0,8	1,224
2	$\theta_{1\min}$ , рад	0,85931	0,85950	0,85993	0,8708	0,85986
3	$S_m$ , рад	0,86	0,81	0,65	0,32	0,61

Аналізуючи таблицю 3.4, можна зробити висновок про добру кореляцію між чутливістю та близькістю кута мінімального відбивання  $\theta_{1\min}$  до кута повного внутрішнього відбивання  $\theta_1$ . Але навіть при найкращих умовах

чутливість  $S_m = 0,86$  рад при хвильоводному резонансі для хвиль ТЕ поляризації є меншою ніж чутливість  $S_m = 1,12$  рад плазмон – поляритонного резонансу при відсутності діелектричного шару.

Висока чутливість до зміни характеристик водного розчину при хвильоводному резонансі для хвиль ТЕ поляризації, що приведена в роботі [392], обумовлена порами в діелектричному шарі, у які проникають молекули органічного походження, що у свою чергу приводить до зміни показника заломлення діелектричного хвильоводного шару, а не лише досліджуваної рідини.

Наші попередні дослідження проводились для показника заломлення призми  $n_0 = 1,76$  [392]. Оптимізація (отримання максимальної чутливості  $S_m$ ) плазмон–поляритонного резонансу без діелектричного хвильоводу може бути проведена лише за рахунок зміни показника заломлення матеріалу призми. Але спершу треба з'ясувати, в яких межах зміни  $n_s$  можна отримати лінійну залежність зміни кута мінімального коефіцієнта відбивання.

На рис. 3.17а наведено цю залежність. Точки розраховані згідно формули (3.5), а пряма лінія побудована за аналітичною залежністю  $\theta_{1\min} = 1,12(n_s - 1,333) + 0,9258$  для  $n_0 = 1,76$ , всі інші дані відповідають рис. 3.16а. Отже, маємо лінійність даної характеристики в широких межах зміни  $n_s$  аж до 1,37.

На рис. 3.17б представлена залежність  $S_m$  від показника заломлення матеріалу призми  $n_0$ . Можна зробити однозначний висновок, що чутливість збільшується при зменшенні  $n_0$ .

Для дослідження водних розчинів показник заломлення матеріалу призми цілком можна зменшити до 1,479 (плавлений кварц) для довжини хвилі лазерного випромінювання 0,6328 мкм. В цьому випадку чутливість  $S_m$  рівна 2,52 рад. Кут мінімального відбивання  $\theta_{1\min}$  становить 1,254163 рад при  $n_s = 1,333$ .

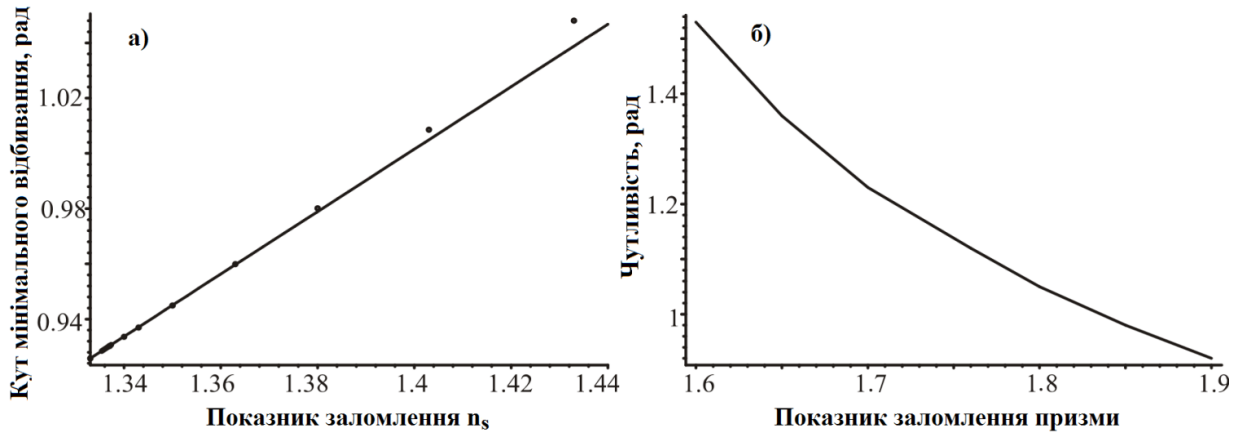


Рис. 3.17. Залежність мінімуму коефіцієнта відбивання від показника заломлення досліджуваної рідини (а) та залежність чутливості  $S_m$  від показника заломлення матеріалу призми  $n_0$  (б)

### 3.3.3. Чутливість коефіцієнта відбивання від металевої плівки до зміни показника заломлення навколишнього середовища

Для призмових структур при певних параметрах мінімальні коефіцієнти відбивання на кутових залежностях близькі до нуля (див. рис. 3.16). Тому цікаво, як будуть змінюватися коефіцієнти відбивання при зміні  $n_s$  при порушенні резонансу. Ці залежності наведені на рис. 3.18. Для хвиль ТМ поляризації криву 0 на рис. 3.18а розраховано при товщині діелектрика рівній нулю, криві 1 і 2 розраховано при товщині діелектрика 0,8 мкм. Для хвиль ТЕ поляризації криві 1 і 2 рис. 3.19б розраховано при товщині діелектричного шару 0,8 мкм, криву 3 отримано при товщині діелектричного шару 0,73 мкм.

Отже, для ТМ поляризації маємо максимальну чутливість у випадку плазмон–поляритонного резонансу у призмовій структурі без діелектричного шару (крива 0 рис. 3.18а). Якщо в структурі присутній діелектричний шар, то у випадку плазмон–поляритонного резонансу чутливість практично рівна нулю (крива 2 рис. 3.18а, що практично співпадає з віссю абсцис). Електромагнітне поле дуже швидко зменшується при віддаленні від металевої плівки за експонентою  $i$ , як наслідок, величина поля стає незначною в досліджуваному середовищі, оскільки між металевою плівкою та досліджуваним середовищем

розміщений діелектричний шар. Чутливість структури при резонансі хвильової моди (крива 1 рис. 3.18а за наявності діелектричного шару) дещо менша чутливості при плазмон-поляритонному резонансі у структурі без діелектричного шару.

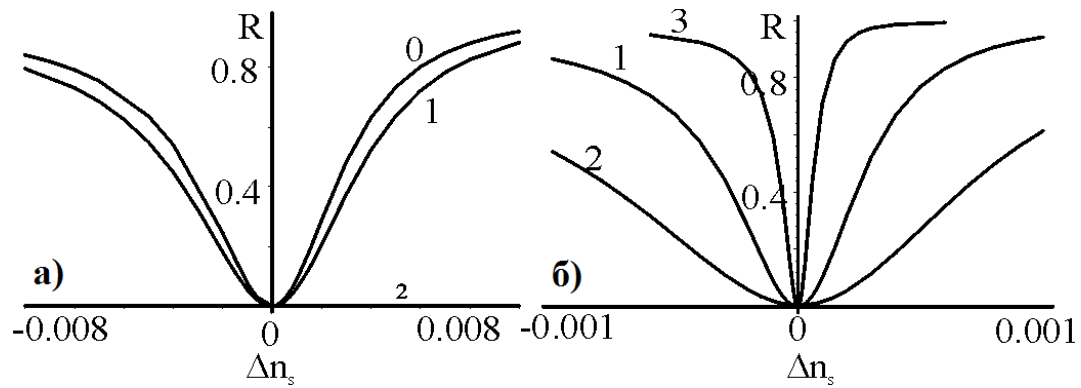


Рис. 3.18. Залежність коефіцієнта відбивання від показника заломлення досліджуваної рідини: а) ТМ поляризація, б) ТЕ поляризація

Проте, в цілому чутливість коефіцієнта відбивання до зміни показника заломлення  $n_s$  для хвиль ТМ поляризації є значно нижчою ніж у випадку порушення резонансу хвильових мод для хвиль ТЕ поляризації (рис. 3.18б). Знову ж таки бачимо, що чутливість є вищою для тих резонансів, які розташовані ближче до кута повного внутрішнього відбивання  $\theta_1$ . Максимальну чутливість отримано для плівки товщиною 0,73 мкм, оскільки кут  $\theta_{1\min} = 0,8599$  рад дуже близький до  $\theta_1 = 0,8593$  рад.

Через це наші більш детальні дослідження щодо чутливості до порушення резонансу за рахунок зміни  $n_s$  будуть стосуватися лише хвиль ТЕ поляризації. Варто зазначити, що поблизу резонансу зміна коефіцієнта відбивання  $\Delta R$  пропорційна  $\Delta n_s^2$ , а отже є нелінійною залежність  $R$  від  $n_s$ , що не є бажаним результатом. Проте, якщо підібрати такий кут, що при заданому незбуреному  $n_s = 1,333$  коефіцієнт відбивання стане рівним 0,5, то отримаємо майже лінійну залежність  $R$  від  $n_s$  (див. рис. 3.18б). В цьому випадку чутливість  $S_R$  ми можемо визначити так:



$$S_R = \frac{R(n_S + \Delta n_S) - 0,5}{\Delta n_S}. \quad (3.9)$$

За даною методикою розраховані чутливості  $S_R$  для таких параметрів призмової структури  $n_d = 1,479$ ,  $d = 50,4$  нм,  $\lambda = 0,6328$  мкм. Ці дані зведені в Таблицю 3.5 при сталому значенні  $n_S = 1,333$ .

Другий рядок Таблиці 3.5 стосується  $n_d = 1,76$ , а третій рядок –  $n_d = 1,6$ . Бачимо, що чутливість зростає при наближенні кута падіння лазерного пучка до кута повного внутрішнього відбивання. Також чутливість зростає із зменшенням показника заломлення матеріалу призми. За цим методом можна зареєструвати зміни  $n_S$  порядку  $10^{-7}$ .

Таблиця 3.5 Чутливість зміни коефіцієнта відбивання до  $n_S$

1	$d_d$ , мкм	0,225	0,23	0,73	0,8	1,224
2	$S_R$ ( $n_d = 1,76$ )	$3,2 \times 10^4$	$0,95 \times 10^4$	$5,6 \times 10^3$	$1,4 \times 10^3$	$6,1 \times 10^3$
3	$S_R$ ( $n_d = 1,6$ )	$4,1 \times 10^4$	$1,1 \times 10^4$	$6,5 \times 10^3$	$1,6 \times 10^3$	$6,8 \times 10^3$

Отже, максимальну чутливість зміни мінімуму кута відбивання до зміни показника заломлення рідини можливо досягнути в призмовій структурі без хвилеводного шару при реалізації плазмон–поляритонного резонансу. Чутливість зростає при зменшенні показника заломлення матеріалу призми, причому, цей висновок стосується обох типів поляризації. Чутливість, яка визначається за зміною коефіцієнта відбивання в залежності від показника заломлення, є вищою для хвиль ТЕ поляризації ніж для ТМ поляризації, і вона зростає при наближенні мінімального кута відбивання до кута повного внутрішнього відбивання.

### **3.4. Взаємодія електромагнітного випромінювання з плазмонними структурами в умовах високих температур на прикладі призмового сенсора**

Як показано вище, оптичні характеристики сенсорних елементів, що працюють на явищі поверхневого плазмонного резонансу, залежать від параметрів призми, геометричних та оптичних параметрів металевої плівки та параметрів навколишнього середовища. Проте, на характеристики та чутливість таких резонансних елементів також суттєво впливають коливання температури. Окрім температурно-індукованих оптико-механічних характеристик, умови резонансу та відповідні вихідні величини змінюються внаслідок термофізичних властивостей оптичних компонентів, таких як призми, металевої плівки та досліджуваного середовища [395].

Вплив температури на поверхневий плазмонний резонанс, як правило, виникає з двох причин. Однією з причин є коливання температури зразка, обумовлені змінами температури навколишнього середовища, оскільки при дистанційному зондуванні в режимі реального часу сенсор може піддаватися впливу середовищ з високою температурою. Крім того, коливання температури можуть відбуватися в лабораторних експериментах. Іншою причиною є локальний ефект нагріву, який виникає з поширенням плазмонних хвиль на поверхні. Відомо, що коливання температури впливають на призму (термооптичний ефект) та властивості металів (через значне фонон-електронне розсіювання) [396]. Вищезазначені ефекти від зміни температури можуть впливати на чутливість сенсора. У цьому контексті теоретично проаналізовано вплив температури на характеристики сенсора на основі поверхнево-плазмонного резонансу [397, 398].

#### **3.4.1. Математична модель температурної залежності параметрів сенсорного елемента**

Математична модель для температурної залежності включає в себе термооптичний ефект і фонон-електронне розсіювання разом з електрон-електронним розсіюванням у металевому шарі. Ми розглядаємо сенсорний

елемент, який включає в себе металеву плівку, нанесену на скляну призму. Для покращення адгезії металевої плівки використовується тонкий шар хрому товщиною 5 нм з показником заломлення  $3.4259 - i4.2732$ . Тонка металева плівка покрита захисним шаром з показником заломлення 1,47 і товщиною 3 нм. Температурна залежність оптичного відгуку системи, що базується на призмі, залежить в основному від зміни показника заломлення скла (плавлений кварц), діелектричної проникності та товщини металевої плівки (срібло), тому досліджувалися лише ці параметри.

В значеннях термо-оптичного коефіцієнту  $dn/dT$  залежність показника заломлення від температури можна виразити таким чином:

$$n_{FS}(T) = n_{FS}(T_0) + (T - T_0) \cdot \frac{dn}{dT}. \quad (3.10)$$

Показник заломлення та термооптичний коефіцієнт є функціями довжини хвилі. В результаті термооптичний коефіцієнт для плавленого кварцу змінюється у вигляді функції довжини хвилі, як показано нижче:

$$2n_{FS}(\lambda) \frac{dn_{FS}}{dT}(\lambda) = GR + HR^2, \quad (3.11)$$

$$R = \lambda^2 / (\lambda^2 - \lambda_g^2), \quad (3.12)$$

де  $n_{FS}(\lambda)$  – показник заломлення за кімнатної температури,  $\lambda_g$  рівна  $0.109 \mu m$ ,  $G$  – коефіцієнт теплового розширення і рівний  $-1.6548 \cdot 10^{-6} K^{-1}$ ,  $H$  є температурним коефіцієнтом екситонної забороненої зони і рівний  $31.7794 \cdot 10^{-6} K^{-1}$  [396].

Частотнозалежна діелектрична проникність металу представлена моделлю Друде наступним чином:

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\omega_c)}, \quad (3.13)$$

де  $\omega_p$  - частота плазми. При заданій температурі, враховуючи ефект теплового розширення, її можна розрахувати за формулою:

$$\omega_p(T) = \omega_p(T_0) \exp\left(-\frac{1}{2} \int_{T_0}^T \alpha_V(T) dT\right), \quad (3.14)$$

де  $T_0$  - температура в приміщенні;  $\alpha_V(T)$  - коефіцієнт теплового розширення металу, який змінюється з температурою, як зазначено нижче:

$$\alpha_V(T) = \frac{\gamma C_V(T)}{K}, \quad (3.15)$$

де  $C_V(T)$  - питома теплоємність, яка визначена Дебаївським наближенням;  $\gamma$  - константа Грюнзіена і рівна 2,45;  $K$  - об'ємний модуль, який рівний 101,0 ГПа.

Частота  $\omega_c$  - це загальна сума частоти фотонно-електронного розсіювання та частоти електрон-електронного розсіювання  $\omega_c = \omega_{ce} + \omega_{cp}$  з:

$$\omega_{ce}(T) = \frac{1}{6} \pi^4 \frac{\Gamma \Delta}{h E_F} \left[ (k_B T)^2 + \left( \frac{h \omega}{4 \pi^2} \right)^2 \right], \quad (3.16)$$

$$\omega_{cp}(T) = \omega_0 \left[ \frac{2}{5} + 4 \left( \frac{T}{T_D} \right)^5 \int_0^{T_D/T} \frac{x^4}{\exp(x) - 1} dx \right], \quad (3.17)$$

де  $\Gamma$  - постійна, що дає середню поверхню розсіювання імовірності Фермі;  $\Delta$  - фракційне розсіювання Умкплеппа;  $\omega_0$  є постійною для кожного металу;  $E_F$  - енергія Фермі;  $h$  - постійна Планка;  $k_B$  є постійною Больцмана;  $T_D$  - температура Дебая.

Зміна товщини металеві півки з температурою записується наступним чином:

$$d(T) = d_0 \exp\left(\int_{T_0}^T \alpha'_L(T) dT\right), \quad (3.18)$$

де  $d_0$  - товщина металеві півки при кімнатній температурі, а відповідне вираження коригованого коефіцієнта термічного розширення  $\alpha'_L(T)$  можна записати наступним чином:

$$\alpha'_L(T) = \alpha_L(T) \frac{1 + \mu}{1 - \mu}, \quad (3.19)$$

де  $\mu$  – число Пуассона металу,  $\alpha_L(T)$  – коефіцієнт лінійного теплового розширення матеріалу.

### 3.4.2. Вплив температури на параметри матеріалів сенсора

На першому етапі ми дослідили зміну показника заломлення призми з врахуванням температури, значення термооптичного коефіцієнта  $dn/dT$  для кварцу та зміну показника заломлення металевієї плівки з врахуванням температури, коефіцієнта теплового розширення, а також фонон-електронного і електрон-електронного розсіювання.

Розраховану залежність термооптичного коефіцієнта плавленого кварцу від довжини хвилі наведено на рис.3.19. Термооптичний коефіцієнт плавленого кварцу швидко змінюється в області коротких довжин хвилі до 0,7 мкм.

Розрахований коефіцієнт термічного розширення металу при різних температурах представлений на рис.3.20.

Коефіцієнт термічного розширення для двох металів (срібло і золото) швидко змінюється при температурах нижче температури Дебая (відповідно 215 К та 170 К). Коли температура перевищує температуру Дебая, коефіцієнт термічного розширення практично незмінний.

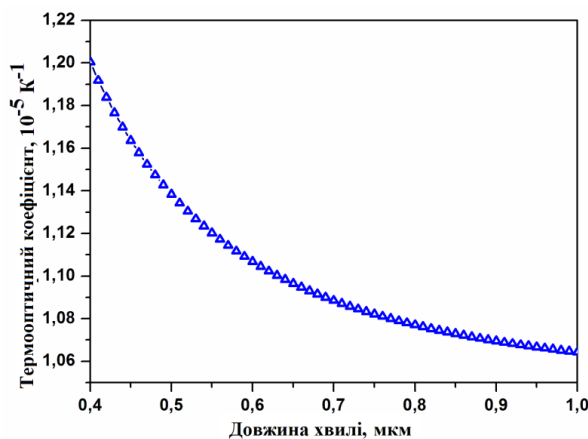


Рис. 3.19. Залежність термооптичного коефіцієнта плавленого кварцу від довжини хвилі

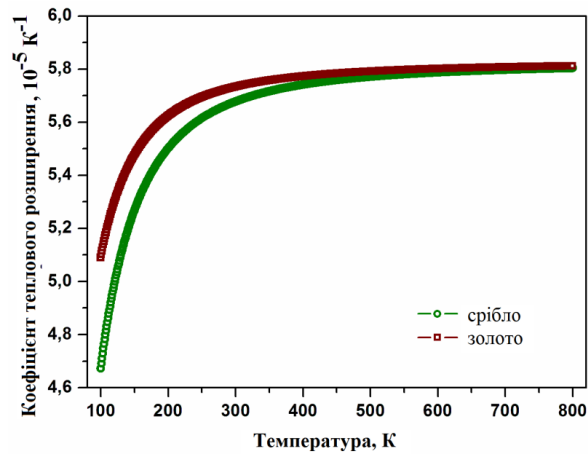


Рис. 3.20 Зміна коефіцієнта теплового розширення плівок срібла та золота з температурою

Зміна дійсної та уявної частин показника заломлення з температурою наведені на рис.3.21а,б, відповідно для срібла та золота.

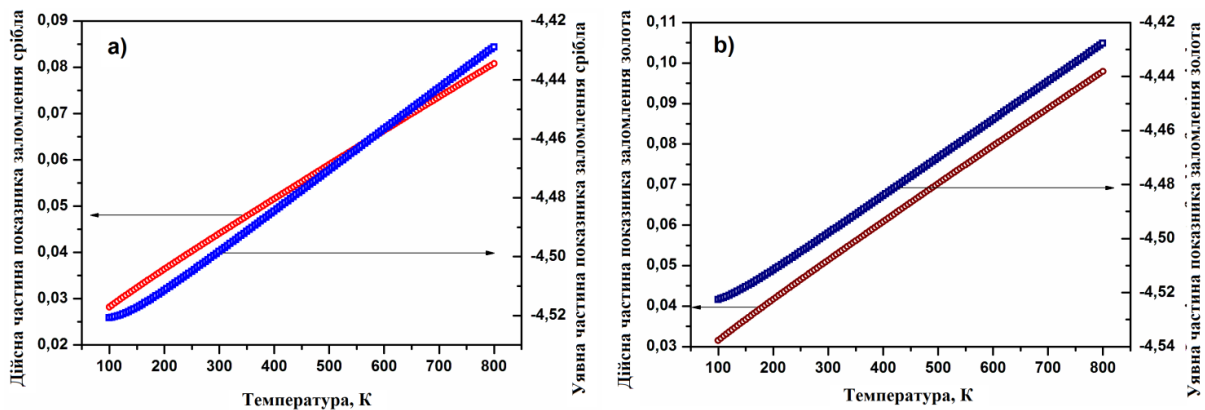


Рис. 3.21.Зміна дійсної та уявної частин показників заломлення срібла (а) та золота (б) з температурою

Рівняння (3.13), (3.16) та (3.17) відповідно показують різницю частоти та плазмонної частоти, що є сукупністю фонон-електронного та електрон-електронного розсіювання зі зміною температури. Обидві частоти збільшуються, коли температура підвищується і діелектрична константа металу змінюється з температурою відповідно до виразу (3.14). Ще один параметр, який залежить від температури це товщина металевої плівки. На рис. 3.22 наведено залежність товщини металевих плівок від температури.

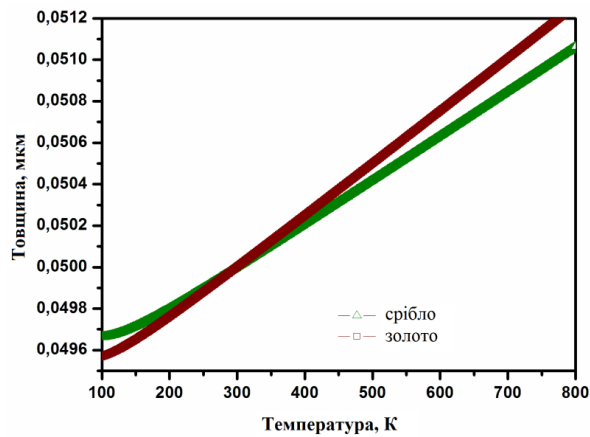


Рис. 3.22. Залежність товщини металевих плівок від температури

Товщина срібної плівки змінюється з 49,66 нм до 51,06 нм для температурного інтервалу від 100 до 800 К. Товщина золотої плівки змінюється з 49,57 нм до 51,52 нм на такому ж температурному інтервалі.

### 3.4.3. Вплив температури на оптичний відгук призмового сенсорного елемента

На наступному етапі досліджено температурний вплив на зміщення піку спектрів відбивання резонансного плазмонного сенсорного елемента. Зміна довжини хвилі резонансу з температурою залежить від властивостей призми та тонкого металевого шару. На рисунку 3.23 показана зміна відбивання від кута падіння при кімнатній температурі 300 К, де робоча довжина хвилі становить 632,8 нм, а показник заломлення навколишнього середовища 1,028 (повітря). Срібло вибрано як матеріал металевієї плівки, його товщина розрахована відповідно до (3.18). Показник заломлення срібла для довжини хвилі 632,8 нм становить  $0,056206 - i4,2776$  [333].

Резонансний пік зсувається в область менших кутів нахилу, при зміні температури. Тому, беручи до уваги температурну залежність всіх параметрів сенсора, на рис. 3.24 наведені резонансні криві відбивання в залежності від кута падіння при температурі від 100 до 800 К. Пік резонансу змінюється з кута падіння з 45,03 до 44,80 в межах температурного інтервалу.

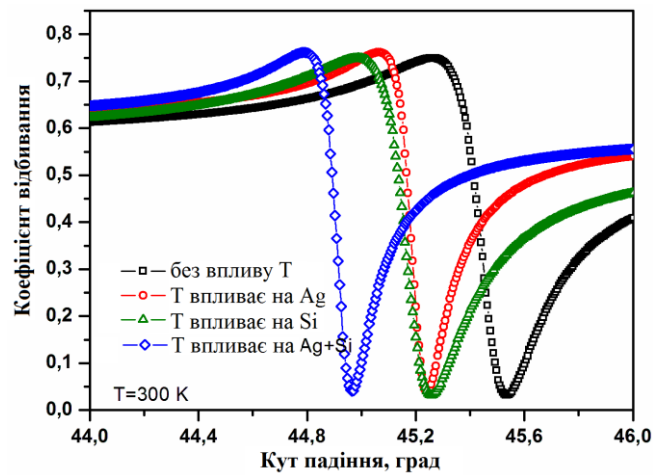


Рис. 3.23. Залежність відбивання від кута падіння без і з впливом температури (плівка металу срібло)

Слід зазначити, що резонансний спектр розширюється при збільшенні температури і змінюються значення коефіцієнта відбивання. Зміна резонансних кривих поверхневих плазмонів важлива в контексті чутливості сенсорного елемента.

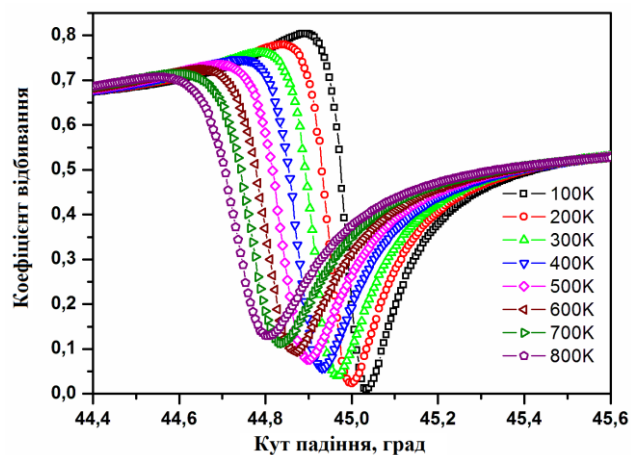


Рис. 3.24. Залежність коефіцієнта відбивання від кута падіння при різних температурах сенсорного елемента, що містить тонку плівку срібла

На рисунку 3.25 показана залежність кута резонансу від показника заломлення навколишнього середовища при різних температурах. Залежність кута резонансу від показника заломлення навколишнього середовища при різних температурах показує, що чутливість змінюється із зміною температури,



оскільки криві для температури 100 К та 800 К мають практично схожий нахил [399].

Такі ж дослідження проводилися для призового сенсорного елементу з тонкою плівкою золота. Коефіцієнт заломлення золота використаний  $0,056206 - i4,2776$  для довжини хвилі 632,8 нм відповідно до [333].

Залежність коефіцієнта відбивання від кута падіння при кімнатній температурі 300 К, беручи до уваги окремо вплив температури на всі матеріали сенсорного елементу, представлені на рис. 3.26.

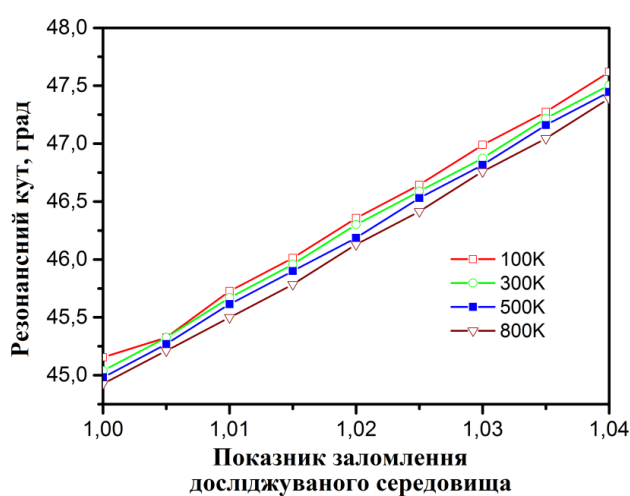


Рис. 3.25. Залежність кута резонансу сенсорного елементу від показника заломлення навколишнього середовища при різних температурах

З рис. 3.26 видно, що сенсорний елемент з плівкою золота є чутливішим до зміни температури порівняно з сенсорним елементом з плівкою срібла, оскільки резонансні криві елемента сенсора поверхнево-плазмонного резонансу на золоті зміщуються з кута резонансу 46,84 до 45,33 градусів, беручи до уваги лише вплив температури на тонку металеву плівку, тоді як такий зсув становить від 45,54 до 45,24 для сенсорного елементу на основі срібла.

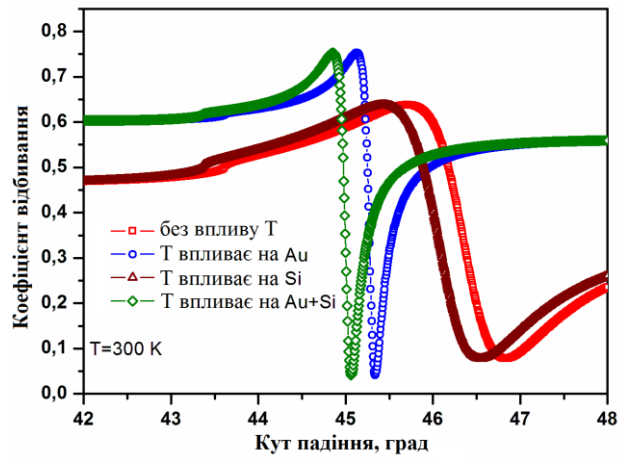


Рис. 3.26. Залежність відбивання від кута падіння без і з впливом температури (плівка металу – золото)

Залежності коефіцієнта відбивання від кута падіння в діапазоні температури від 100 до 800 К з урахуванням температурних залежностей всіх параметрів сенсорного елемента представлені на рис. 2.27.

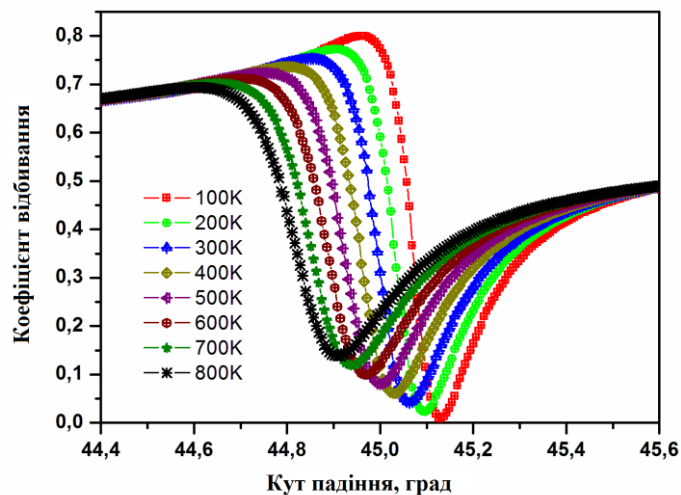


Рис. 3.27. Залежність коефіцієнта відбивання від кута падіння при різних температурах для сенсорного елемента, що містить тонку плівку золота

Положення резонансного піку зміщується в сторону менших кутів падіння променя з 45,13 до 44,90 град. при збільшенні температури від 100 до 800 К. Крім того, спектр резонансу розширюється, що безпосередньо пов'язане з

точністю, з якою сенсор може визначити значення показника заломлення досліджуваного середовища.

### **3.5. Висновки до третього розділу**

Призмона хвилеводна структура може бути використана для реєстрації зміни показника заломлення досліджуваних середовищ. У випадку призмонавої структури, що містить два діелектричні шари, інтенсивне збуджуюче випромінювання з малою довжиною хвилі буде поглинатися в досліджуваному середовищі, а його показник заломлення стане комплексною величиною з додатною уявною величиною. Тут буде виникати люмінесценція з одночасним підсиленням, причому, певна довжина хвилі буде в призмі поширюватися під певним кутом.

Теоретично та експериментально досліджено характеристики сенсора зміни показника заломлення, що працює на явищі поверхневого плазмонного резонансу. Проведено дослідження впливу різних параметрів на положення кута поверхневого плазмонного резонансу та на значення коефіцієнта відбивання в мінімумі. Досліджено чутливість сенсора та параметри, які на неї впливають.

Встановлені нові закономірності, що визначають зв'язок між параметрами призмонавої сенсорної системи та її чутливістю. Показано, що найвища чутливість зміни кута мінімального відбивання до зміни показника заломлення досліджуваного середовища можлива в призмонавій структурі без хвилеводного шару при реалізації плазмон–поляритонного резонансу. Чутливість зростає при зменшенні показника заломлення матеріалу призми, причому, цей висновок стосується обох типів поляризації. Чутливість, яка визначається за зміною коефіцієнта відбивання в залежності від показника заломлення, є вищою для хвиль TE поляризації ніж для TM поляризації, і вона зростає при наближенні кута мінімального відбивання до кута повного внутрішнього відбивання

Проведено детальний аналіз температурної залежності чутливості сенсора, що працює на явищі поверхневого плазмонного резонансу. Показано, що

температура впливає на зміну кута резонансу. Фізичні причини вищезгаданих явищ були представлені в термінах зміни властивостей складових матеріалів сенсора, зокрема, тонкої плівки металу та призми. Залежність показника заломлення призми від температури впливає на результат відгуку сенсорного елемента. Варто зазначити, що вплив температури на тонку металеву плівку має вирішальну роль у результуючій кривій відбивання.

## РОЗДІЛ 4. РЕЗОНАНСНІ ЯВИЩА В ГРАТКОВИХ МІКРО- ТА НАНОСТРУКТУРАХ

### 4.1. Хвилеводний та плазмон-поляритонний резонанси в періодичних мікро- та наноструктурах

Як відомо, ППП це електромагнітні моди, локалізовані на межі розділу двох середовищ з протилежними за знаком діелектричними сталими, наприклад, метал-діелектрик. Якщо уважно поглянути на бінарну ґратку, наприклад, металеву на діелектричній підкладці, то можна виявити хвилеводи скінченої довжини: метал-діелектрик-метал; діелектрик-метал-діелектрик. Для інших ґраток можна знайти хвилеводи ще таких структур: метал-діелектрик-діелектрик, діелектрик-діелектрик-діелектрик. Для останніх хвилеводів діелектрики відрізняються показниками заломлення. Хвилеводи скінченої довжини можуть служити мікрорезонаторами. Тому, дещо незвичні явища реалізуються у вузькому спектральному діапазоні і супроводжуються резонансом електромагнітного поля. Отже, для того щоб передбачити, в якому спектральному діапазоні та при яких параметрах виникають аномальні ефекти, а також, щоб краще зрозуміти суть цих ефектів, дослідження резонансних явищ в планарних ґратках доцільно почати з вивчення хвилеводних ефектів.

Використовуючи АТМЗХ для аналізу дифракції електромагнітних хвиль в/на діелектричних ґратках на діелектричних або металевих підкладках можна дослідити умови виникнення резонансних явищ в них. За певних умов відбувається резонанс, який полягає в різкому підсиленні електромагнітного поля всередині ґратки. Ґратки можуть бути або металевими або діелектричними. У такій структурі може бути збуджений плазмон-поляритонний резонанс, який призводить до високого поглинання металевою плівкою з одночасним високим пропусканням у вузькому спектральному діапазоні.

При дифракції на періодичних структурах можна спостерігати різноманітні ефекти при певних співвідношеннях між параметрами ґратки та параметрами плоскої хвилі, що падає на періодичну структуру: просвітлення рельєфною

ґраткою межі двох середовищ, причому просвітлення можна досягнути в широкому спектральному діапазоні (резонанс поля відсутній), та цілий ряд резонансних явищ, при яких амплітуда поля в ґратці є набагато більша ніж амплітуда плоскої падаючої хвилі на ґратку: 1) коефіцієнт відбивання від прямокутної діелектричної ґратки, розміщеної на діелектричній підкладці рівний одиниці за рахунок хвилеводного резонансу; 2) коефіцієнт відбивання від діелектричної ґратки, розміщеної на металевій підкладці, рівний нулю за рахунок хвилеводного резонансу у діелектричній ґратці і, що приводить до повного поглинання; 3) коефіцієнт відбивання від плоскої металевої поверхні, збуреної металевою або діелектричною ґраткою незначної амплітуди, рівний нулю за рахунок резонансу поверхневої плазмон-поляритонної хвилі; 4) коефіцієнт пропускання тонкої металевої плівки, оточеної двома діелектричними ґратками, досить близький до одиниці за рахунок хвилеводного резонансу у ґратках; 5) коефіцієнт пропускання тонкої металевої плівки, оточеної двома діелектричними або металевими ґратками незначної амплітуди, досить близький до одиниці за рахунок резонансу поверхневої плазмон-поляритонної хвилі; 6) можна отримати резонанс поля і, відповідно високе поглинання, при розміщенні металевої ґратки значної товщини на металевій підкладці, тут спостерігається резонанс плазмон-поляритонної хвилі або хвилеводної моди в хвилеводі обмеженої довжини, який виступає резонатором електромагнітних коливань; 7) високе пропускання металевої ґратки з вузькими щілинами за рахунок резонансу поверхневих плазмон-поляритонних хвиль та резонансу хвилеводних мод, причому високе пропускання більше ніж передбачено апертурною теорією, тут також хвилевод обмеженої довжини виступає в якості резонатора; 8) при періодичному розміщенні нанодротів спостерігається на певній довжині хвилі резонанс плазмонів, що приводить до підсиленого поглинання, причому пік поглинання може розщеплюватися за рахунок електромагнітної взаємодії.

Резонанс оптичних хвиль у вище перерахованих структурах підтверджується наступними супровідними явищами: підвищене поглинання

енергії електромагнітних хвиль, спектральні залежності добре апроксимуються функцією Лоренца, коефіцієнт відбивання на резонансній довжині хвилі менший ніж на позарезонансних довжинах хвиль. Резонанс поверхневих плазмон-поляритонних хвиль спостерігається лише для хвиль ТМ поляризації. Всі ці явища можна проаналізувати і точно визначити параметри ґраток і падаючої плоскої хвилі, при яких відбуваються вище перелічені ефекти.

#### **4.2. Хвилеводно-резонансні характеристики періодичних структур на прикладі ґратки з хвилеводним шаром**

Незважаючи на те, що в останні роки вивчаються структури, що працюють на явищі хвилеводного резонансу, мало уваги приділяється дослідженню інтенсивності спектрів відбивання хвилеводної ґратки, особливо керованим пікам спектрів відбивання хвилеводних ґраток з двома максимумами відбивання [400]. Ця періодична структура має важливе значення при вивченні спектральних параметрів, які мають потенціальне застосування в галузі біології та медицини [401]. У цій частині роботи ми зосереджуємося на структурі, яка складається з одновимірної ґратки, виготовленої сухим травленням в алмазоподібній вуглецевій плівці (АВП) на підкладці з плавленого кремнезему, яка має два резонансні піки в спектрах відбивання при кутовому падінні світлового променя. АВП активно вивчаються протягом останнього десятиліття в галузі інженерії матеріалів та фізики твердого тіла. Такий матеріал складається з щільного аморфного вуглецю або вуглеводню. Механічні властивості АВП знаходяться між рівнями графіту та алмазу, що означає, що ці плівки мають низький коефіцієнт тертя та високу твердість [402]. Завдяки цим властивостям, а також високій стійкості до зносу і корозії, хімічній інертності, високій електричній ємності, інфрачервоній прозорості, високому показнику заломлення та чудовій гладкості поверхні, АВП знайшли широке практичне застосування в механіці, електриці та оптиці [403]. Останніми роками з'явилися роботи щодо періодичних структур на основі АВП, де вони використовуються в якості сенсорів [404]. Системи зондування, побудовані з використанням цих елементів,

можуть бути дуже чутливими до змін концентрації різних хімічних розчинів через зміни показника їх заломлення. Довгоперіодичні ґратки, покриті АВП плівками, можуть бути у 15 разів більш чутливими, ніж чисті довгоперіодичні ґратки до варіацій показника заломлення навколишнього середовища в межах певного діапазону [405]. Тому для використання унікального потенціалу АВП та періодичних конструкцій на їх основі необхідно знати основні структурні параметри для їх відтворюваної реалізації. Отже, метою даної частини роботи було детальне дослідження залежності положення піків спектру відбивання синусоїдальної ґратки на хвилеводі від структурних параметрів, таких як період, товщина та глибина ґратки, товщина шару хвилепроводу та показника заломлення навколишнього середовища.

#### 4.2.1. Залежність спектральних характеристик ґратки з хвилеводним шаром від геометричних параметрів

Модель хвилеводної ґратки в умовах ТМ поляризації, що використовувалась у наших розрахунках [406], зображена на рис. 4.1. Структуру можна розділити на два шари, а саме, верхній шар ґраткою а нижній шар є хвилеводом. Ґратка розміщена на підкладці з плавленого кварцу з показником заломлення, який розраховано на основі дисперсійних рівнянь [336]. Геометричні параметри ґратки: період  $\Lambda = 428$  нм, глибина дифракційної ґратки ( $d_g$ ) і товщина хвилеводу ( $d_w$ ) 75 нм і 155 нм, відповідно.

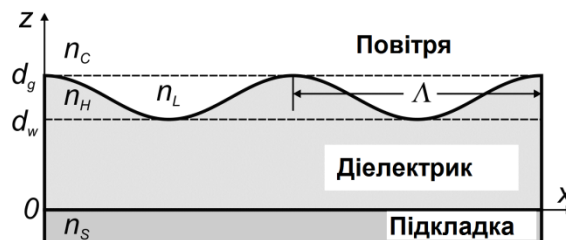


Рис. 4.1. Схема хвилеводної ґратки

Показник заломлення АВП, використаний в нашому розрахунку з [407], де оптичні властивості синтезованої плівки АВП в ідентичних умовах



досліджувались спектроскопічною еліпсометрією. Експериментальні дисперсійні криві були екстрапольовані поліномом п'ятого порядку, щоб відповідати вимірним даним, як показано на рис. 4.2. Дані моделювання дійсної (рис.4.2а) та уявної (рис.4.2б) частин показника заломлення показують співпадіння з експериментальними кривими наведеними у роботі [407] 99,92% та 99,91% відповідно.

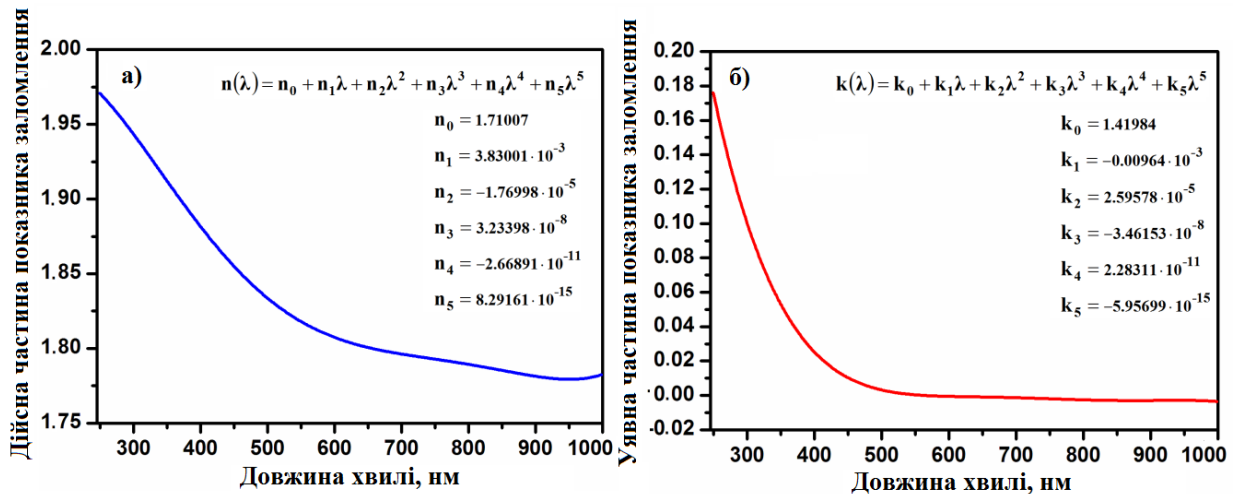


Рис. 4.2. Залежність показника заломлення тонкої плівки АВП з товщиною 230 нм від довжини хвилі

Загалом, резонансна довжина хвилі в значній мірі залежить від періоду ґратки. Таким чином, перший етап наших досліджень – це перевірка даної концепції. Як показано на рис. 4.3а, невелике збільшення періоду ґратки зсуває положення піку відбивання в довгохвильову область спектра. Зсув піків лінійно пропорційний до періоду ґратки, як це показано на рис. 4.3б. Видно, що зміна періоду на 1 нм призводить до зміщення першого піку (пік при нижчій області довжин хвиль) до 1,2 нм і другий (пік при вищому діапазоні довжин хвиль) до 1,5 нм.

На наступному етапі наших досліджень ми проаналізували вплив товщини хвилеводного шару і глибини ґратки на спектри відбивання структури. Ефект зміни товщини хвилеводного шару (при постійній глибині ґратки 75 нм) представлений на рис. 4.4.

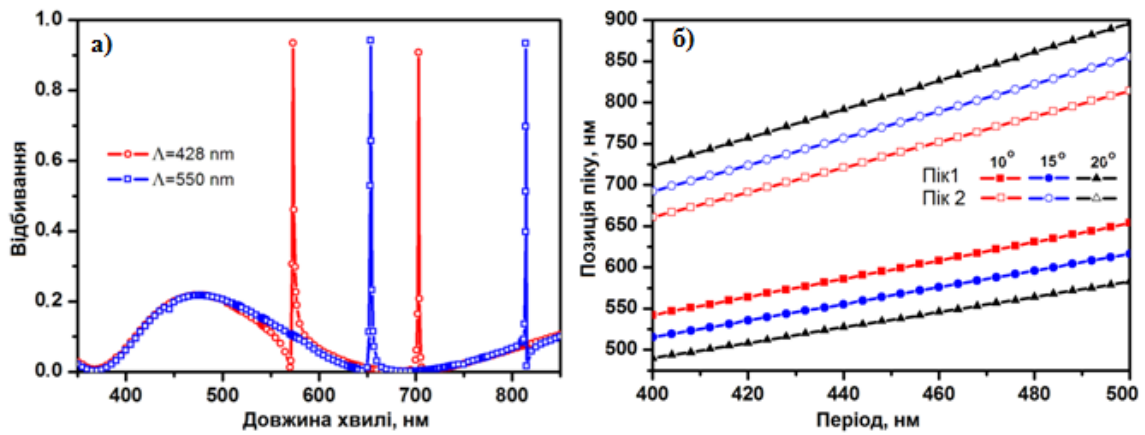


Рис. 4.3. Приклади позиції піків відбивання в результаті зміни періоду ґратки (а), та залежності позиції піків від періоду ґратки (б). Кут падіння дорівнює  $10^\circ$

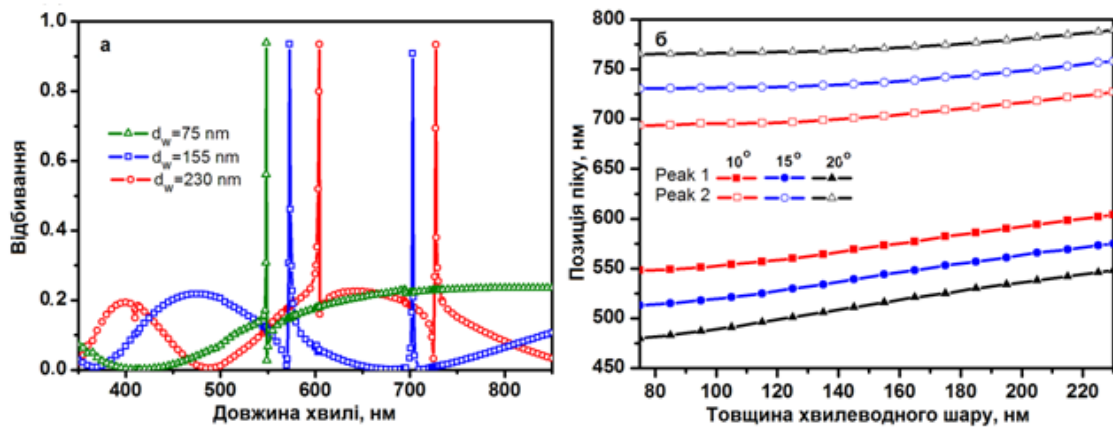


Рис. 4.4. Залежність відбивання від довжини хвилі при різних товщинах хвильоводного шару та фіксованій глибині ґратки (а); залежність позиції піків відбивання від товщини хвильоводного шару (б)

Шляхом налаштування глибини однорідного шару (який знаходиться під рельєфною структурою поверхні) можна отримати кілька піків, які знаходяться в області довжин хвиль від 350 нм до 850 нм, як показано на рис. 4.4а. Слід зазначити, що довжина резонансної хвилі може бути легко переналаштована зміною товщини хвильоводного шару (див. 4.4б). Зміна товщини хвильоводного шару в 1 нм призводить до зміщення першого піку до 0,4 нм, а другого до 0,2 нм. Якщо глибина хвильоводного шару зменшується, то резонансні піки зсуваються в короткохвильову область.

Слід також зазначити, що у разі малої товщини хвильоводного шару, форма спектральних кривих змінюється. Один пік з'являється за нульового порядку

резонансної хвильоводної моди. Два піки може з'явитися при вищих порядках (1, 2, 3, ...), коли товщина хвильоводного шару достатньо велика.

Ефект від зміни глибини ґратки при постійній загальній товщині структури ( $d_w + d_g = 230$  нм) представлений на рис. 4.5а, а відповідні результати для постійної товщини хвильоводних шарів ( $d_w = 155$  нм) представлені на рис. 4.5б.

З рис. 4.5а видно, що одночасна зміна товщини ґратки та товщини хвильоводного шару має невеликий вплив на форму та положення піків відбивання.

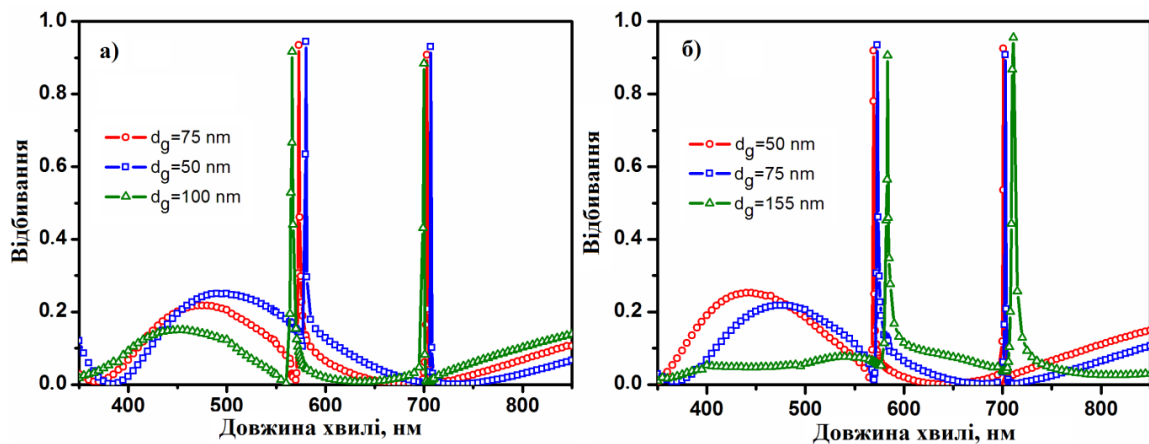


Рис. 4.5. Приклади зміни положення піків відбивання внаслідок зміни глибини ґратки: (а) загальна товщина всієї конструкції є постійною ( $d_w+d_g=230$ нм); (б) товщина шару хвильоводу є постійною ( $d_w=155$ нм)ю Кут падіння променя становить  $10^\circ$

Слід також зазначити, що другий пік менш чутливий до зміни глибини ґратки. Зміна глибини ґратки за фіксованої товщини шару хвильоводу призводить до збільшення ширини в половині максимуму піків відбивання та невеликого зсуву піків в довгохвильову область, як показано на рис. 3.6б.

#### 4.2.2 Порівняння результатів чисельного моделювання з експериментальними даними

У цій частині роботи порівнюємо чисельні симуляції та експериментальні спектри відбивання, отримані з субмікронної дифракційної ґратки, виготовленої сухим травленням в АВП, що працює в умовах хвильоводного резонансу.

Аморфний гідрогенований алмаз, такий як вуглецева плівка, легована SiOx (a-C:H:SiOx) товщиною 230 нм, була синтезована шляхом прямого осадження іонного пучка з гексаметилдисилоксану з H<sub>2</sub> як газу-носія. Дифракційна ґратка в фоторезисті була створена за допомогою голографічної літографії (HeCd лазер,  $\lambda=442$  нм). Далі проведено плазмове хімічне травлення АВП в CF<sub>4</sub>/O<sub>2</sub> газах. Мікрофотографія SEM отриманої аналізованої структури показана на рис. 4.6

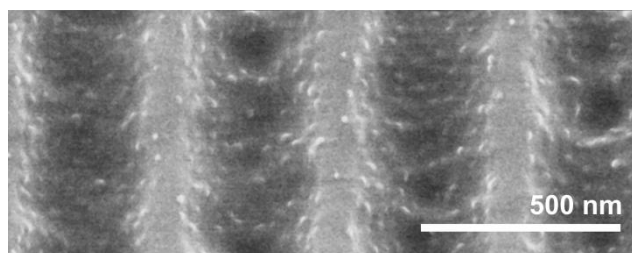


Рис. 4.6. SEM мікрофотографія періодичної структури, що виготовлена на основі АВП.

Ця ґраткова структура має період близько 428 нм, загальна товщина всієї структури становить приблизно 230 нм. Спектри відбивання поляризованого білого світла були отримані з використанням ПЗЗ-спектрометра та моторизованого стенду відбивання. Для нормальних вимірювань відбивання при 45° на оптичному шляху падаючого променя було поміщене нахилене вікно з плавленого кварцу. Експериментально отриманий показник заломлення плівки АВП (товщина 210-250 нм) становить 1,82-1,88 при  $\lambda=632,8$  нм. За спектрами пропускання та відбивання плівки DLC на підкладці з плавленого кварцу встановлено, що плівка прозора до 3 еВ ( $> 413,3$  нм). Таким чином, поглинання АВП матеріалу є невисоким в досліджуваній області, де присутні піки, і цей матеріал може бути використаний для виготовлення елементів, що працюють на явищі хвилеводного резонансу.

Залежність відбивання від довжини хвилі та кута падіння наведено на рис. 4.7. Можна помітити, що є два резонансні піки, коли кут падіння променя відмінний від нуля, а при нормальному падінні спектр відбивання має лише один пік. Варто зазначити, що вищі дифракційні порядки відповідають за збудження хвилеводного резонансу. Детальні теоретичні та експериментальні

результати залежності відбивання від довжини хвилі під різними кутами падіння променя показані на рис. 4.8а та 4.8б відповідно.

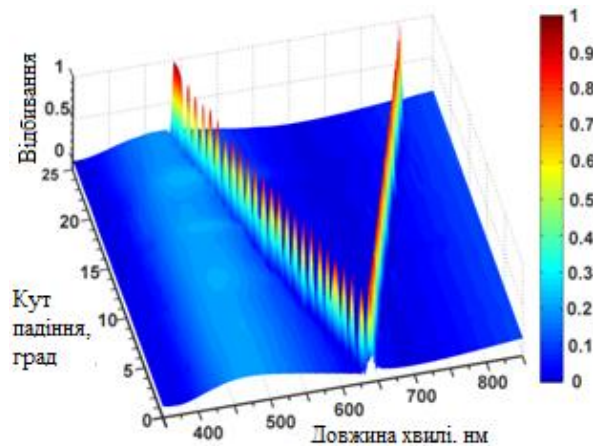


Рис. 4.7. Залежність відбивання від довжини хвилі та кута падіння

Результати моделювання вказують на те, що для нормального падіння світлової хвилі очікується одиничний пік на довжині хвилі 637 нм, тоді як для кута падіння  $10^\circ$  очікуються два резонансні піки на довжинах хвиль 573 нм і 703 нм, при  $15^\circ$  - на 544 нм і 737 нм та при  $20^\circ$  - на 516 нм і 771 нм. Результати експерименту показують, що при нормальному падінні один пік є на довжині хвилі 656 нм, при куті падіння променя  $10^\circ$  два резонансні піки – 594 нм і 716 нм, при  $15^\circ$  два резонансні піки – 565 нм та 748 нм, а при  $20^\circ$  два резонансні піки – 537 нм і 781 нм.

Відстань між піками при різних кутах падіння (наприклад, відстань між положенням першого піка у спектрі відбивання вимірюваного за кутами падіння  $10^\circ$  і  $15^\circ$ ,  $15^\circ$  та  $20^\circ$  та ін) співпадає між теоретичними результатами та експериментальними спектрами. Вона збільшується зі збільшенням кута падіння для обох (розрахованих та експериментальних) випадків. У таблиці 4.1 наведені основні результати, з яких можна побачити, що відстані у масштабі довжини хвилі ( $\Delta\lambda$ ) між першим піком та другим піком (виміряні при кутах падіння променя  $10^\circ$ ,  $15^\circ$  та  $20^\circ$ ) є однаковими як для моделювання, так і для експериментальних результатів. Тобто, існує деяке систематичне зміщення положень піків в експериментальних спектрах у порівнянні з результатами моделювання.

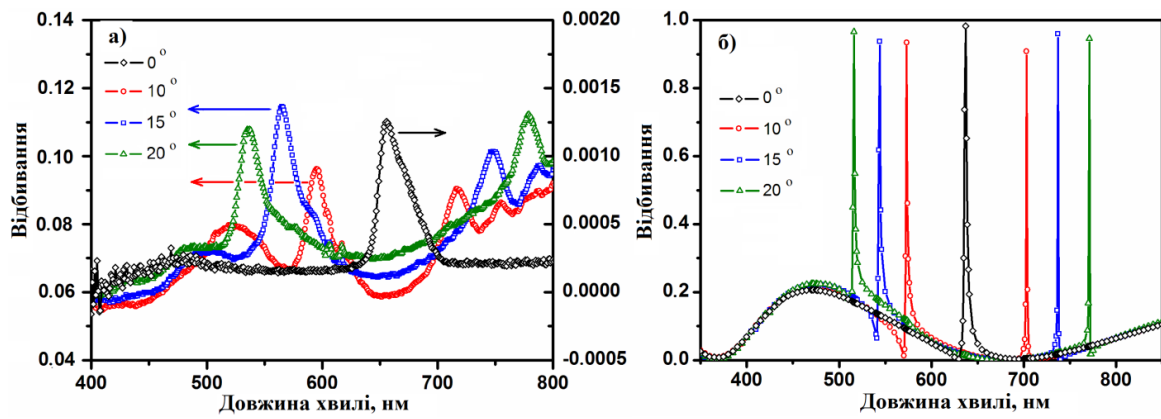


Рис. 4.8. Спектри відбивання за різних кутів падіння променя: а) експериментальні результати; б) чисельні результати

Такий системний характер зсуву даних моделювання відносно експериментальних даних, що зберігають взаємні положення піків, показує, що експериментально виміряні спектри відбивання під різними кутами падіння можуть бути використані для подальшого аналізу, де важливі взаємні положення піків.

Незважаючи на зсуви резонансних довжин хвиль, обумовлені зміною кута падіння, експериментальні результати добре узгоджуються з теоретично розрахованими, хоча резонансні піки в експериментально виміряних спектрах відбивання зміщуються у довгохвильову область, а їх ширина перевищує теоретично розраховану. Слід зазначити, що різниця між розрахунковими та експериментальними результатами, викликана складністю виготовлення ґраток з точно заданими структурними параметрами.

Таблиця 4.1. Відстань ( $\Delta\lambda$ ) між положеннями піків при кутах падіння променя  $10^\circ$ ,  $15^\circ$  та  $20^\circ$

Тип результатів	$\Delta\lambda$ між положеннями перших піків, нм			$\Delta\lambda$ між положеннями других піків, нм		
	$10^\circ-15^\circ$	$15^\circ-20^\circ$	$10^\circ-20^\circ$	$10^\circ-15^\circ$	$15^\circ-20^\circ$	$10^\circ-20^\circ$
Моделювання	29	28	57	34	34	68
Експеримент	29	28	57	34	34	68

Складність часто є результатом відхилення від ідеальної нанорозмірної ґратки, зміщення положення резонансу та розширення ширини смуги. Для аналізованої структури розбіжність між експериментальними та теоретичними піками в спектрах відбивання має такий вигляд: для першого піка це 21 нм, а для другого піка – 11 нм. Це явище можна пояснити неоднорідністю хвилеводного шару або змінами періоду структури. Збільшення періоду в нашому експерименті оцінювалось вимірюванням кута дифракції з використанням діодного лазера з робочою довжиною хвилі 405 нм. Промінь лазера падав на зразок по нормалі і сканував його по лінії посередині сенсорного чіпа. Точність фіксування кута дифракції становила 0,01 градуса. Таким чином, було встановлено, що період ґратки змінювався вздовж зразка в межах  $\pm 1$  нм, а отже контролювався достатньо точно. Тому найбільш імовірно, що цей зсув з'являється через зміну товщини хвилеводного шару, крім того, він має неоднорідну товщину, як це видно з рис. 4.6.

Беручи до уваги мінімальний розподіл періоду та аналіз залежностей від піку (див. рис.4.3б, рис.4.4б), згідно з цими розрахунками, положення першого піка менш чутливі до зміни періоду і більш чутливі до товщини хвилеводного шару. Що стосується поведінки другого піку, то він має безпосередньо протилежні залежності (див. рис.4.3б, рис.4.4б). Тому можна відзначити, що основною причиною різниці між положеннями піків в спектрах відбивання в теоретичних та експериментальних результатах є товщина хвилеводу (оскільки перший пік зміщений більше, ніж другий (рис. 4.8)). Таким чином, можна оцінити фактичну товщину хвилеводного шару за допомогою експериментальних результатів з рис. 4.8а та порівняння їх з теоретичними результатами з рис. 4.8б. У нашому випадку фактична товщина хвилеводного шару, визначена з рис. 4.4б, використовуючи експериментальні значення піків (з рис. 4.8), становить приблизно 200 нм.

Відбивання досліджуваної структури при резонансі становить близько 12%. Ця відносно низька ефективність пов'язана з втратами тонких плівок АВП, недоліками на поверхні ґратки та процедурою вимірювання. Хоча ефективність

виготовленого пристрою порівняно низька, вона може використовуватися в резонансних сенсорних пристроях, оскільки висока ефективність не є суттєвою в застосуванні сенсорів, що працюють на явищі хвилеводного резонансу, а ключовим є зміна резонансної довжини хвилі.

#### **4.2.3 Хвилеводна ґратка як сенсорний елемент.**

Дифракція структури на основі хвилеводної ґратки спричинена зовнішніми факторами такими як незначна зміна показника заломлення через адсорбцію молекули на поверхні ґратки, оптичний шлях світла, яке проходить через ґратку у хвилевод і в результаті викликається зміна резонансної довжини хвилі. Тому для того, щоб дослідити можливість використання запропонованої АВП-ґратки як сенсора, ми розраховували залежності кривих відбивання за різних показників заломлення навколишнього середовища (див. рис. 4.9). Ці характерні максимуми коефіцієнта відбивання від довжини хвилі можуть бути застосовані в оптичних сенсорних системах [408].

У випадку використання повітря ( $n=1,00$ ) та води ( $n=1,33$ ) в якості навколишнього досліджуваного середовища резонансна довжина хвилі першого піку становить 549,1 нм і 534,6 нм, відповідно.

Резонансна довжина хвилі другого піку становить 730,3 нм та 772,4 нм відповідно (див. рис. 4.9а). Наші теоретичні результати добре узгоджуються з експериментальними результатами, представленими в роботі [6], де було встановлено збільшення відстані між двома піками з підвищенням показника заломлення середовища.

Слід також зазначити, що другий пік чутливіший до зміни показника заломлення навколишнього середовища, ніж перший, як показано на рис. 4.9б, і експериментально продемонстровано у роботі [404]. Коли показник заломлення середовища збільшується, другий резонансний пік зміщується в область більших довжин хвиль. У нашому аналізованому випадку, коли показник заломлення навколишнього середовища збільшився з 1,00 до 1,33, перший пік змістився з 549,1 нм до 531,9 нм, а другий пік змістився з 730,3 нм до 772,4 нм.



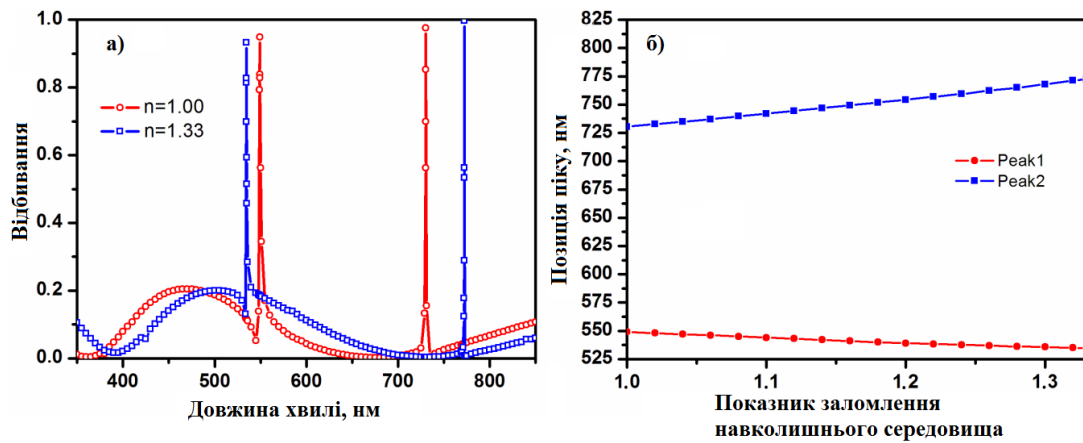


Рис. 4.9. Приклади зсуву положення піків відбивання внаслідок зміни показника заломлення навколишнього середовища (а). Залежність позиції піків відбивання від показника заломлення навколишнього середовища (б). Кут падіння променя становить  $14^\circ$

На закінчення варто зробити узагальнюючі висновки, що спектр відбивання синусоїдальної ґратки з хвилеводним шаром має єдиний резонансний пік при нормальному падінні і два піки при похилому падінні променя. Положення резонансних довжин хвиль зміщується в більш довгохвильову область, якщо будь-який з параметрів (період, глибина ґратки, товщина хвилеводного шару) в ґратці збільшується. Зсув довжини хвилі лінійно залежить від зміни періоду і товщини хвилеводного шару незалежно від кута падіння (тобто більше нуля). Положення першого піку менш чутливе до зміни періоду і більш чутливе до зміни товщини хвилеводного шару, в той час як другий пік має прямо протилежні залежності. Отже, наші результати показують, що досліджувана структура може бути використана як сенсорний елемент.

### 4.3. Резонансні явища в дифракційних структурах на основі металевих ґраток

Оптичне пропускання і відбивання світла мікро- та наноструктурами на основі металевих дифракційних ґраток привернули велику увагу через їх фундаментальне значення для керування світлом в субхвильовому масштабі і різноманітне застосування в оптиці та фотоніці. Крім того, надзвичайно високе

оптичне пропускання забезпечує широкий спектр застосувань за рахунок як високої ефективності пропускання, так і одночасно високого підсилення локального поля на певних довжинах хвиль, що може бути досягнуто за рахунок геометрії поверхні металу. Пояснення екстраординарного оптичного пропускання до цих пір обговорюється та багато різних теорій є зареєстровано для пояснення цього явища [409]. В [410] показано, що поверхневі електромагнітні режими відіграють ключову роль у виникненні резонансного пропускання. Проте, в роботах [118, 411] повідомлялося, що для металевих ґраток існують два резонанси пропускання: один з них пов'язаний з поверхневими плазмон-поляритонами на обох горизонтальних поверхнях металеві ґратки, а другий пов'язаний з модами резонатора або хвилеводу, розташованих всередині щілин. Однак, у науковій літературі можна знайти багато досліджень, присвячених тільки ТМ поляризації хвиль і відповідних спектральних залежностей пропускання ґратки. У той же час, залежність пропускання для ТЕ поляризації від товщини і особливостей структури може дати корисну інформацію, щоб пояснити аномалію високого пропускання таких ґраток [412]. З іншого боку, елементи, які використовують цей механізм можуть демонструвати нові оптичні властивості і забезпечувати нові функціональні можливості. Розуміння зв'язку хвиль в металевих мікро- та наноструктурах має фундаментальний інтерес і практичне значення в проектуванні оптичних пристроїв, які могли б стати важливими елементами майбутніх мікро- і нанооптичних систем.

У цій частині роботи досліджено структури на основі ґратки, що пропускають ТМ і ТЕ-поляризоване світло. Таке дослідження сприяє розумінню походження підсиленого оптичного пропускання субмікронними структурами. Зокрема, ми змоделювали інтенсивність розподілу поля всередині щілини і на поверхнях металеві одновимірної ґратки, що дозволило нам пояснити природу резонансів і визначити умови високого пропускання [413–415].

### 4.3.1. Спектральні характеристики одновимірних дифракційних ґраток в умовах ТЕ і ТМ поляризацій

Механізм надзвичайного оптичного пропускання через структури на основі металеві ґратки досліджувався АТМЗХ. На першому етапі нашого дослідження ми провели чисельні розрахунки пропускання ( $T$ ) і суми пропускання і відбивання ( $T+R$ ) в залежності від товщини одновимірної металеві ґратки (див. рис. 4.10) для довжини хвилі 1,5 мкм з параметрами: період ґратки ( $\Lambda$ ), ширина ( $a$ ) і висота ( $d_m$ ) щілин.

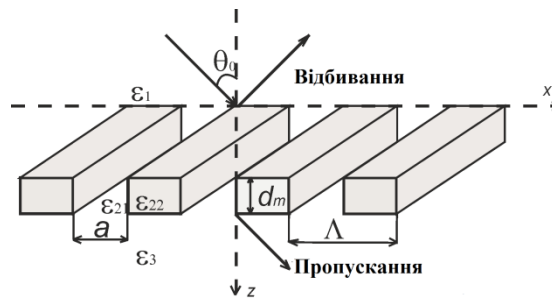


Рис. 4.10. Геометрія металеві ґратки

Середовища, що обмежують структуру характеризуються діелектричною проникністю  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_3$ , ґратка характеризується діелектричними проникностями  $\epsilon_{21}$ ,  $\epsilon_{22}$ . Параметри ґратки для ТЕ і ТМ поляризації є наступні:  $\Lambda = 1,3 \mu\text{m}$ ,  $\epsilon_{21} = 9.0$ ,  $a = 0.26 \mu\text{m}$ ;  $\Lambda = 1.46 \mu\text{m}$ ,  $\epsilon_{21} = 1.0$ ,  $a = 0.143 \mu\text{m}$ . Срібло (Ag) було обране в якості матеріалу ґратки за рахунок типових властивостей благородних металів. Діелектрична постійна срібла екстраполювалася рівнянням  $\epsilon_{22} = 4 - 54\lambda^2 + i\lambda(0,38 + 0,71\lambda^2)$  для довжин хвиль  $0,4 \mu\text{m} \leq \lambda \leq 2 \mu\text{m}$ .

Результати розрахунків для хвиль ТЕ поляризації представлені на рис. 4.11а і для хвиль ТМ поляризації на рис. 4.11б. Легко бачити, що високе оптичне пропускання може бути отримане як для ТЕ, так і ТМ поляризацій. Рис. 4.11 вказує на те, що в локальних максимумах сума пропускання та відбивання висока і, коли глибина ґратки зростає, то зростає поглинання в ґратці.

Розглянемо в першу чергу детальніше випадок ТЕ поляризації. Рис. 4.12 показує розраховане пропускання і суму спектрів пропускання та відбивання для срібної ґратки.

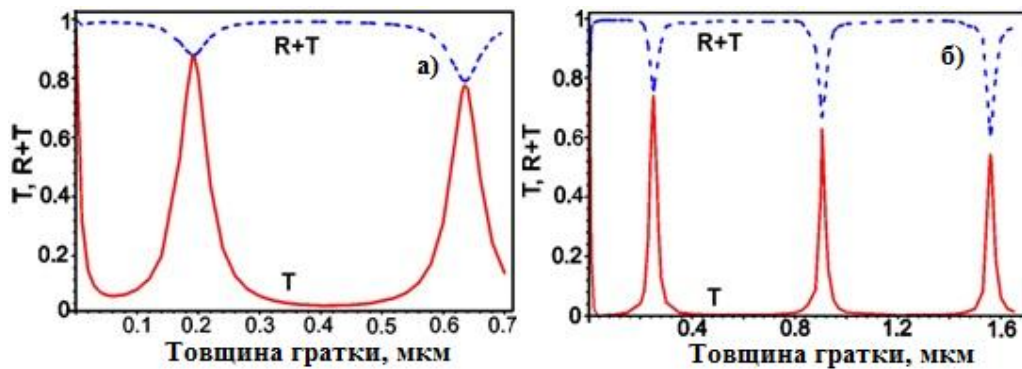


Рис. 4.11. Залежність пропускання та суми пропускання і відбивання від товщини ґратки

Параметри, які використовуються в розрахунках, є наступні:  $\varepsilon_{21}=9,0$ ,  $a=0,26\mu\text{m}$  і  $\Lambda=1,0\mu\text{m}$ . Числа біля кривих вказують товщину ґратки в мікрометрах. З рис. 4.12 видно, що пропускання в локальних точках зменшується, коли довжина хвилі зростає, і вона близька до нуля для довжин хвиль більше 1,8 мкм. Ці факти можна пояснити відсутністю хвилеводного ефекту всередині щілини для довжин хвиль більших за 1,8 мкм (для ТЕ поляризації). Отже, щілина є мікрорезонатором для певної довжини хвилі, яка утворює стоячі і біжучі хвилі.

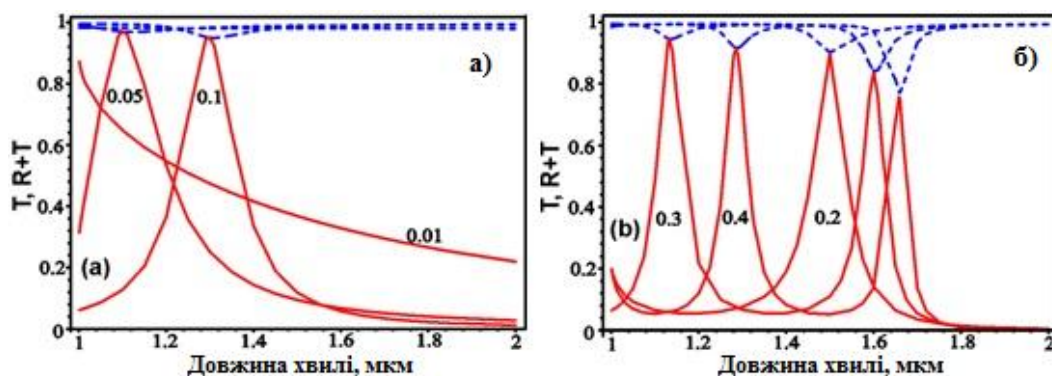


Рис. 4.12. Залежність коефіцієнта пропускання, суми коефіцієнтів пропускання та відбивання від довжини хвилі для різних товщин ґратки в умовах ТЕ поляризації

Цей висновок підтверджується рис. 4.13, який представляє розподіл тангенціальної складової модуля напруженості електричного поля вздовж координати, тобто вздовж періоду ґратки для глибини ґратки  $d_m = 0.05 \mu\text{m}$  (рис. 4.13а) і для  $d_m = 0.2807 \mu\text{m}$  (рис. 4.13б) і довжини хвилі  $1.1 \mu\text{m}$ .

На рис. 4.13 крива 1 відповідає розподілу поля, обчисленому при  $z = 0$ , крива 2 обчислена при  $z = d_m/4$ , крива 3 обчислена при  $z = d/2$ , крива 4 - при  $z = 3d/4$ , і крива 5 - при  $z = d$ . Крива 3 (рис. 4.13а) описує розподіл поля в пучності стоячої хвилі. Криві 2 і 4 (див. рис. 4.13б) відповідають пучності стоячої хвилі і крива 3 відповідає вузлу стоячої хвилі.

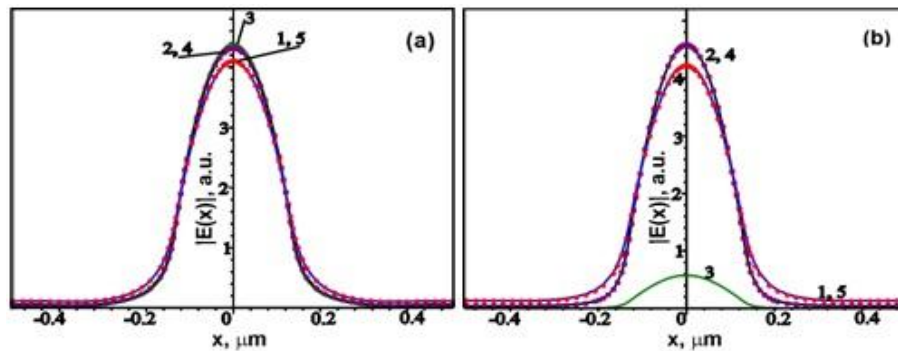


Рис. 4.13. Розподіл тангенціальної складової модуля напруженості електричного поля вздовж періоду ґратки з довжиною хвилі  $1,1 \mu\text{m}$  для різної товщини ґратки:  $0,05 \mu\text{m}$  (а) та  $0,2807 \mu\text{m}$  (б).

Напруженість поля перевищує одиничну амплітуду падаючої хвилі в кілька разів вздовж щілини ґратки і менше одиниці поза щілиною. Електромагнітне поле зосереджене над щілиною при певних параметрах ґратки, коли резонанс поля з'являється всередині щілини. В результаті ми отримали підсилене пропускання з одночасним підсиленням поглинання. Слід зазначити, що модулі інтенсивності поля практично рівні в точках, симетричних відносно площини  $z = d/2$ .

Більш детальний аналіз показує, що такий вираз є правильним:

$$E_x(x, z) \approx (-1)^{m+1} E_x(x, d - z), \quad (4.1)$$

де  $m = 1, 2, 3, \dots$ . Як слідує з (4.1), для парних чисел  $m$  при  $z = d/2$  вузол стоячої хвилі знаходиться всередині щілини, а при непарному  $m$  є пучність стоячої хвилі.

У випадку ТМ поляризації, спектральні криві (рис. 4.14) розраховуються при  $\varepsilon_{21} = 1.0$ ,  $a = 0.143 \mu\text{m}$ , і  $\Lambda = 1.0 \mu\text{m}$ .

Числа у кривих вказують глибину ґратки в мікронах. Крива з номером 0,01 показує пропускання металевої тонкої плівки поміщеної в середовище з показником заломлення 1,0. Існує тільки одна мода пропускання всередині щілини, незаповненої діелектриком.

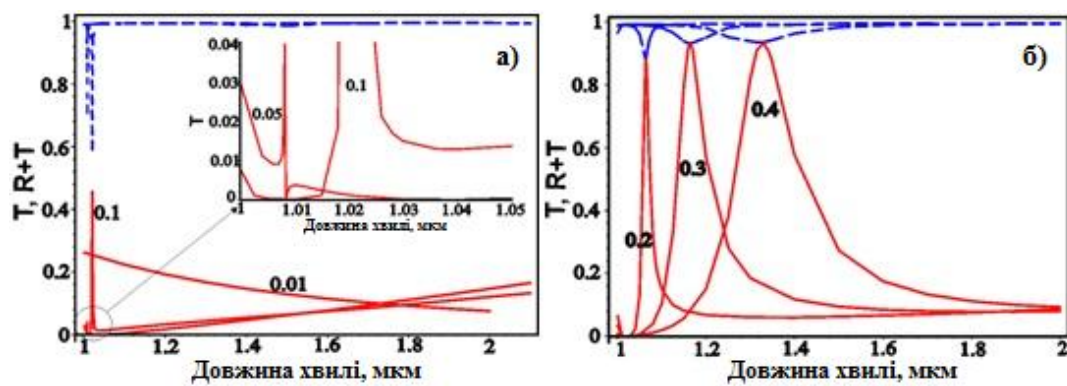


Рис. 4.14. Залежність коефіцієнта пропускання, суми коефіцієнтів пропускання та відбивання срібної ґратки з різною товщиною ґратки в умовах ТМ поляризації

Можна бачити, що пропускання на довжині хвилі більшій за 1 мкм значно менше, ніж для більш довгих хвиль (наприклад, при довжині хвилі 1,01 мкм при товщині 0,05 мкм (див всередині рис. 4.14а)). У цих випадках поглинання в ґратці є вищим і відповідні піки є вузькими, ніж інші. Близьке значення цих довжин хвиль до періоду ґратки свідчать про те, що цей ефект може бути обумовлений плазмон-поляритонним резонансом на поверхні ґратки. Цей факт підтверджується залежностями розподілу тангенціальної складової інтенсивності модуля електричного поля вздовж координати для ґратки з глибиною 1,0 мкм (рис. 4.15).

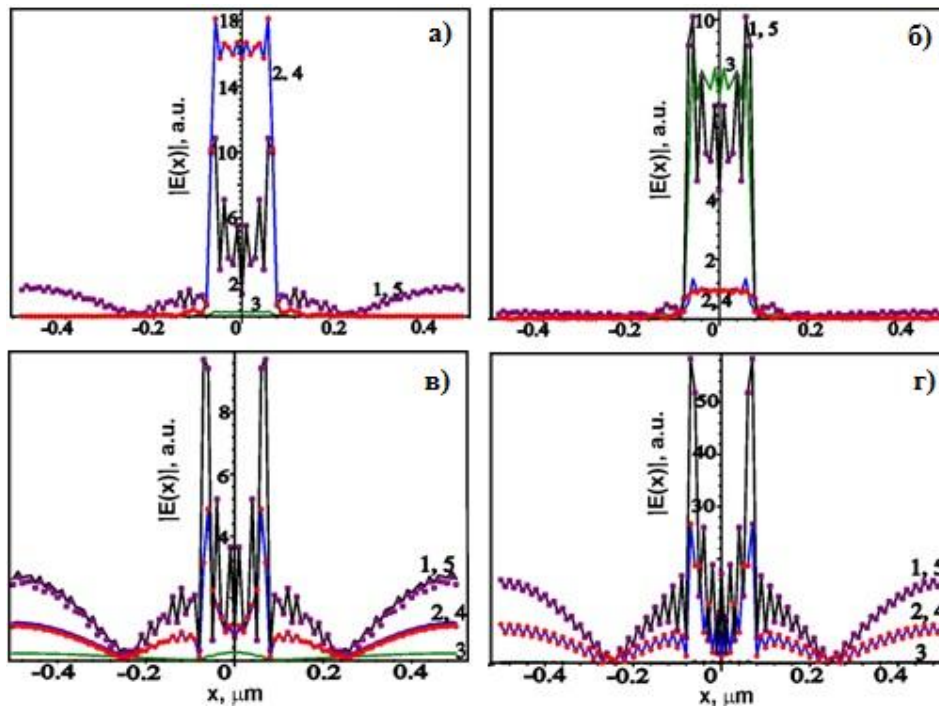


Рис. 4.15. Розподіл тангенціальної складової напруженості електричного поля модуля в межах періоду ґратки для товщини ґратки 1,0 мкм на довжинах хвиль 1,02355 мкм (а) та 1,349 мкм (б); для товщини ґратки 0,05 мкм при довжині хвилі 1,00816 мкм: (в) у розрахунках врахована уявна частина діелектричної постійної металу; (г) уявна частина діелектричної константи металу є незначною

Рис. 4.15а відповідає довжині хвилі 1.02355 мкм і рис. 4.15б відповідає 1.349 мкм. Напруженість поля на поверхні металеві ґратки досягає 2 одиниці для довжини хвилі 1,02355 мкм і викликає значні поверхневі струми і, отже, втрати Джоуля. В результаті спостерігається поглинання у вузькому спектральному діапазоні і відносно низьке пропускання. Крива 3 відповідає вузлу стоячої хвилі, криві 2 і 4 відповідають пучності стоячої хвилі для довжини хвилі 1.02355 мкм,  $d_0 = 0.1108$  мкм,  $\Delta d = 0.4446$  мкм, і  $m = 2$ . Таким чином, дві пучності і три вузли стоячої хвилі вміщуються в щілині дифракційної ґратки з глибиною 1,0 мкм.

Напруженість поля на поверхні металеві ґратки значно менша за 1 для довжини хвилі 1.349 мкм і втрати Джоуля є незначними. Таким чином, поверхневий плазмонний резонанс відсутній і, в результаті, спостерігається високе пропускання. Крива 3 відповідає пучності стоячої хвилі, криві 2 і 4

відповідають вузлам стоячої хвилі для цієї хвилі,  $d_0 = 0.41185 \mu\text{m}$ ,  $\Delta d = 0.58815 \mu\text{m}$ , і  $m = 1$ . Два вузла і одна пучність стоячої хвилі вміщуються в щілину дифракційної ґратки з глибиною  $1,0 \mu\text{m}$ .

Модулі інтенсивності поля в точках, симетричних відносно площини  $z = d/2$ , рівні (як і в випадку ТЕ поляризації). Більш детальний аналіз показує, що при дифракції хвилі ТМ поляризації на бінарній металевій ґратці може бути застосований такий вираз:

$$E_x(x, z) \approx (-1)^m E_x(x, d - z), \quad (4.2)$$

де  $m = 1, 2, 3, \dots$ . Як слідує з (4.2), для непарних чисел  $m$  при  $z = d/2$  вузол стоячої хвилі знаходиться всередині щілини, і навіть є пучність стоячої хвилі, тобто ситуація протилежна випадку ТЕ поляризації. Рівняння (4.1) і (4.2) показують, що для парного  $m$  розподіл поля по ґратці при ТЕ поляризації описує суму обох – симетричної і асиметричної функцій відносно осі  $z$ . Слід зазначити, що значення симетричної функції набагато менше, ніж асиметричної при ТЕ поляризації, і навпаки, для ТМ поляризації. Ситуація протилежна для непарних  $m$ . Цей висновок був зроблений на основі чисельного розрахунку розподілу поля всередині щілини і на поверхні ґратки. Згідно з цими розрахунками, якщо рухатися всередині щілини вздовж осі  $z$  від  $z = 0$  (якщо щілина досить довга), то першою буде пучність стоячої хвилі, тоді другий вузол стоячої хвилі, а потім знову пучність і т.д. Для ТЕ поляризації ситуація буде протилежною.

Можна зробити висновок, що плазмонний резонанс на поверхні ґратки призводить до втрат Джоуля і низького пропускання. Цей висновок підтверджується рис. 4.15в,г, який показує розподіл інтенсивності модуля електричного поля вздовж періоду ґратки для наступних параметрів: довжина хвилі  $1,00816 \mu\text{m}$ , глибина ґратки  $0,05 \mu\text{m}$ . На рис. 4.15в наведені результати, коли врахована уявна частина діелектричної проникності срібла. Результати розрахунку в разі, коли уявна частина діелектричної проникності металу незначна, представлені на рис. 4.15г. Пропускання цієї ґратки для металу становить  $0,04$  для довжини хвилі  $1.00816 \mu\text{m}$  (див. рис. 4.14а). Значна



напруженість поля (3 в.о.) локалізована на поверхні ґратки, таким чином, там є плазмонний резонанс (рис. 4.15в).

Можна очікувати значних втрат Джоуля в тому випадку, коли враховується уявна частина діелектричної проникності металу. Коли уявною частиною діелектричної проникності металу нехтується, то на межі ґратки з однорідними середовищами поле збільшується до 20 в.о. і всередині щілини до 50 в.о. Таким чином, плазмонний резонанс є і на поверхні ґратки, і в щілині. Пропускання такої ґратки дорівнює одиниці для довжини хвилі 1.00816 мкм. Обидві ґратки мають різні характеристики на довжині хвилі 1.00816 мкм зі збільшенням товщини ґратки. Пропускання ґратки з втратами менше ніж 0,04; пропускання ґратки без втрат дорівнює 1 на резонансних глибинах  $d_0 = 0.05 \mu\text{m}$ ,  $d_1 = 0.473 \mu\text{m}$ ,  $d_2 = 0.911 \mu\text{m}$ . Насправді, чисельні розрахунки показують, що пропускання ґратки є більшим ніж 0,997 для всіх аналізованих глибин.

Отже, можемо зробити висновок, що резонансне пропускання для ТМ поляризації досягається за рахунок хвилеводного ефекту і збудження плазмон-поляритонів на металевих поверхнях за рахунок металевої ґратки, що робить невелике збурення в площині металу. Коефіцієнт пропускання зменшується, коли збільшується поглинання в ґратці в результаті плазмонного резонансу. Хвилеводний ефект всередині щілини можливий для будь-якої ширини щілини, і він може забезпечити аномально високий коефіцієнт пропускання. Резонансне пропускання для ТЕ поляризації відбувається тільки за рахунок хвилеводного ефекту і існує мінімальна ширина щілини, де можливе високе пропускання. Пропускання металевої ґратки, розміщеної між двома шарами діелектрика, є високим, зокрема для ТЕ поляризації. Резонансне пропускання досягається в результаті інтенсивного поля, яке створила ґратка всередині діелектричного шару над щілиною. Період і товщина металевої ґратки, товщина діелектричних шарів, показники заломлення ґратки і діелектричних шарів є основними параметрами, які визначають положення піків і амплітуд пропускання. Ця структура може бути використана для конструювання селективного вузькосмугового фільтра для інфрачервоної області спектра [355].

### 4.3.2. Дослідження особливостей розподілу електромагнітного поля металевими мікроструктурами в умовах ТЕ і ТМ поляризацій

Розглянемо найпростішу ідеальну ґратку (див. рис. 4.10), що складається з однакових розділених паралельних щілин, розміщених на діелектричній підкладці. Для дослідження обрано три різних ґратки з різними параметрами і матеріалами.

Спершу досліджено ґратку, розміщену на діелектричній підкладці з високим показником заломлення. Матеріалом ґратки вибрано золото з показником заломлення  $0,49410 + i10.353$  на робочій довжині хвилі  $\lambda = 1.5$  мкм; період ґратки 1.3 мкм, товщина ґратки 0,325 мкм. В якості матеріалу підкладки вибрано вісмут з показником заломлення  $6,0517 + i4.5716$  на робочій довжині хвилі. На рис. 4.16 показано розподіл електромагнітного поля для ТЕ (рис. 4.16 а) і для ТМ (рис. 4.16 б) поляризацій.

Для електромагнітного поля ТЕ поляризації найбільш інтенсивне поле формується над і в щілинах ґратки (близько  $5 \cdot 10^4$  (В/м)) і воно рівномірно зменшується віддаляючись від ґратки. В підкладці поле не формується. Для ТМ поляризації найбільш інтенсивне поле розподілене на краях ґратки (близько  $4.2 \cdot 10^4$  (В/м) ) і, воно також рівномірно зменшується при віддаленні від ґратки. В підкладці поле також не формується.

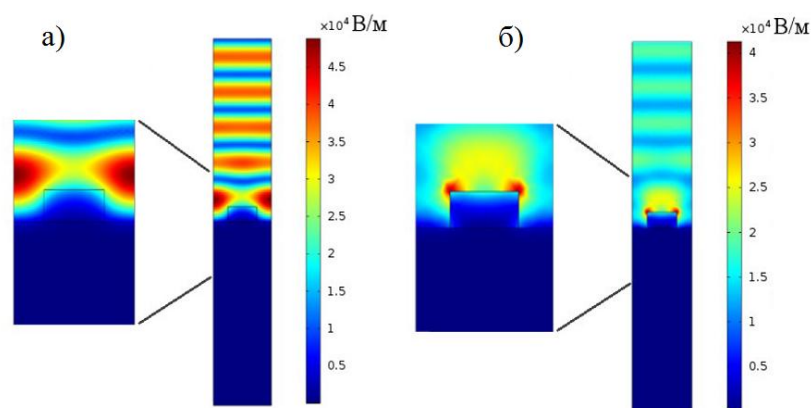


Рис. 4.16. Розподіл електромагнітного поля для ТЕ поляризації (а) і для ТМ поляризації (б) для ґратки з золота, розміщеної на підкладці з вісмуту. Робоча довжина хвилі 1.5 мкм.

На наступному етапі досліджень вибрано підкладку з набагато меншим показником заломлення, а саме арсенід галію з показником заломлення  $n=3.4049$ . Всі інші параметри такі ж як і у першій ґратці. Розподіл електромагнітного поля для ТЕ і для ТМ поляризацій для такої ґраткової структури наведено на рис. 4.17а,б. Як і в попередньому випадку для електромагнітного поля ТЕ поляризації найбільш інтенсивне поле зосереджено над щілинами ґратки (близько  $4.7 \cdot 10^4$ (В/м) ) і рівномірно зменшується при віддаленні від ґратки. Однак, величина електромагнітного поля зменшилась, і в підкладці можемо побачити невелике поле близько  $1.5 \cdot 10^4$ (В/м). Така ж картина спостерігається для ТМ поляризації – найбільш інтенсивне поле також розподілене на кутах ґратки близько  $4.2 \cdot 10^4$ (В/м) і воно менше за величиною ніж у попередньому випадку (див. рис. 4.16б). В підкладці формується дуже слабке поле (близько  $1.5 \cdot 10^4$ (В/м) ).

Далі ми дослідили розподіл електромагнітного поля для ґратки з золота на робочій довжині хвилі  $\lambda=0.6328$  мкм. Період ґратки рівний 1.3 мкм, товщина ґратки 0,65 мкм, матеріал підкладки – GaAs з показником заломлення  $3,875 + i0.19834$ . Показник заломлення золота на робочій довжині хвилі рівний  $0,1837 + i3.4313$ . Розподіл електромагнітного поля для ТЕ і для ТМ поляризацій для такої ґраткової структури представлено на рис. 4.18а,б.

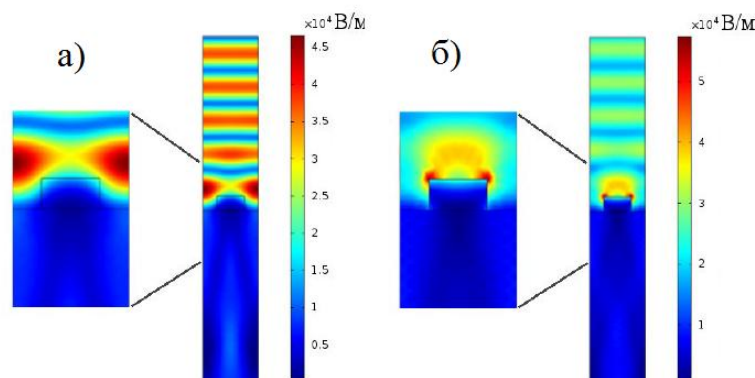


Рис. 4.17. Розподіл електромагнітного поля для ТЕ (а) і для ТМ поляризацій (б) для ґратки з золота, розміщеної на підкладці з арсеніду галію ( $\lambda=1.5$  мкм)

Як бачимо, для електромагнітного поля ТЕ поляризації найбільш інтенсивне поле зосереджено в щілині ґратки ( $4.5 \cdot 10^4$  В/м), а також над ґраткою (близько  $5.5 \cdot 10^4$  В/м). В підкладці формується дуже слабе поле (близько  $0.5 \cdot 10^4$  В/м), але тільки під щілинами.

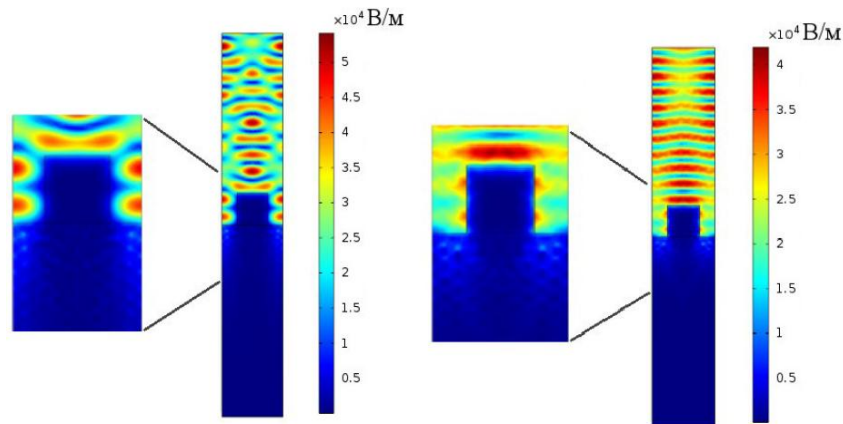


Рис. 4.18. Розподіл електромагнітного поля для ТЕ і для ТМ поляризацій для ґратки з золота, розміщеної на підкладці з арсеніду галію ( $\lambda=0.6328$  мкм)

Для ТМ поляризації найбільш інтенсивне поле  $4.2 \cdot 10^4$  В/м локалізоване над ґраткою. На краях ґратки всередині щілин також утворюється електромагнітне поле з інтенсивністю близько  $4.2 \cdot 10^4$  В/м. В підкладці також формується слабе поле – близько  $0.5 \cdot 10^4$  В/м, однак воно більш інтенсивне ніж в ґратці з меншою висотою.

### 4.3.3. Високе оптичне пропускання три-шаровою резонансною хвилеводною структурою

На наступному етапі вивчення резонансних явищ в одновимірних дифракційних структурах досліджено розподіл інтенсивності полів всередині щілини і на поверхнях металевої ґратки, розміщеної між двома діелектричними шарами. Це дозволило нам пояснити природу резонансів і визначити умови високого пропускання [415]. Показано, що металева ґратка, розміщена між двома шарами діелектрика може призвести до явища підвищеного пропускання в інфрачервоній області без допомоги поверхневих плазмон-поляритонних мод

[355]. Запропонована структура забезпечує високе пропускання поляризованого поля ТЕ для вузької смуги довжин хвиль. Величина і положення піку пропускання сильно залежать від геометричних параметрів структури.

Для того, щоб дослідити механізм збільшення пропускання за допомогою металевої ґратки, розміщеної між двома шарами діелектрика (див рис. 2.21), проведемо ряд розрахунків для ТЕ-поляризованого світла, що падає на структуру з наступними параметрами:  $\varepsilon_{22} = 9,0$ ,  $\varepsilon_{21} = \varepsilon_m$ ,  $\Lambda = 1,3$  мкм, і  $a = 0,143$  мкм. Діелектрична стала діелектричних шарів є  $\varepsilon_d = 9,0$ .

Хвилеводний ефект з низьким загасанням всередині щілини є неможливим для таких параметрів структури. Для такої щілини постійна поширення є  $\beta = (0,0715 - i1,23) \text{ мкм}^{-1}$ , тому бінарна металева ґратка з глибиною 1,0 мкм і без діелектричних шарів має пропускання менше, ніж 0,0001 [342]. Якщо ґратка обмежена шарами діелектрика, що реалізують хвилеводний ефект, то можна домогтися підвищеного пропускання (рис. 4.19).

На рис. 4.19а показані залежності пропускання і відбивання від товщини діелектричних шарів  $da$  за глибини ґратки 0,2 мкм. Можна бачити, що при фіксованій товщині діелектричних шарів можливе значне пропускання ґратки. Можна також припустити, що таке високе пропускання є результатом хвилеводного ефекту в діелектричних шарах.

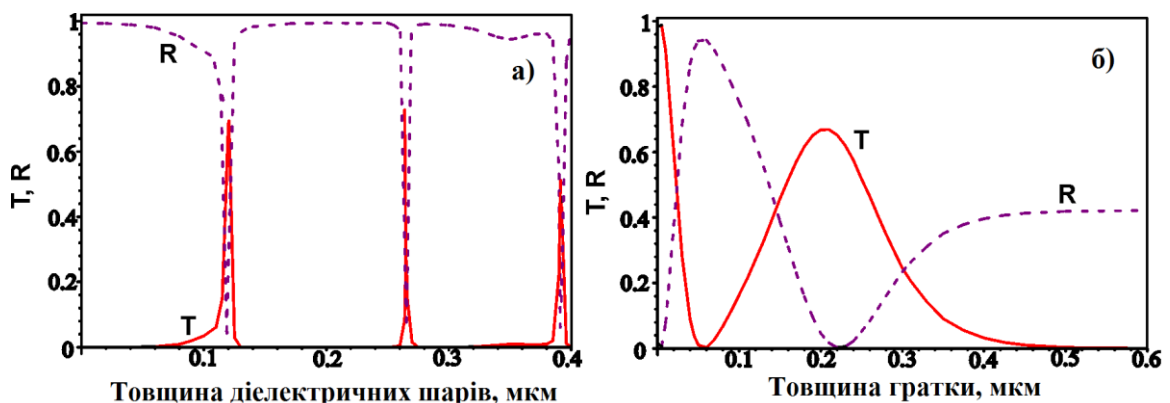


Рис. 4.19. Залежності спектрів пропускання і відбивання металевої ґратки від товщини діелектричних шарів (а) та товщини ґратки (б).

Найменша резонансна товщина діелектричного шару залежить від глибини ґратки. Глибина ґратки  $d_m = 0,1$  мкм відповідає товщині діелектричних шарів  $d_d = 0,1146$  мкм,  $d_m = 0,2$  мкм відповідно  $d_d = 0,1204$  мкм, і  $d_m = 0,3$  мкм відповідає  $d_d = 0,1212$  мкм. Таким чином, глибина ґратки має невеликий вплив на резонансні товщини діелектричних шарів. Цей результат узгоджується з теорією хвилеводів, оскільки фаза відбитої хвилі на межі діелектрика і металу змінюється незначно зі зміною товщини металевої плівки в діапазоні  $0,1 \dots 0,3$  мкм. Хвилеводні моди, які поширюються всередині сусідніх щілин, між собою не взаємодіють, оскільки електромагнітне поле проникає в метал на глибину скін-шару. Рис. 4.19б показує залежності коефіцієнтів пропускання і відбивання від товщини ґратки при сталих товщинах шарів діелектриків  $0,1212$  мкм. Пропускання наближається до нуля, коли товщина ґратки збільшується до  $0,6$  мкм. З іншого боку, відбивання не досягає одиниці. Пропускання є більше  $69\%$  за товщини ґратки  $0,2$  мкм. На рис. 4.20 наведено залежність коефіцієнта пропускання від довжини хвилі. Пропускання має особливість у вузькій смузі спектра, що пояснюється резонансом.

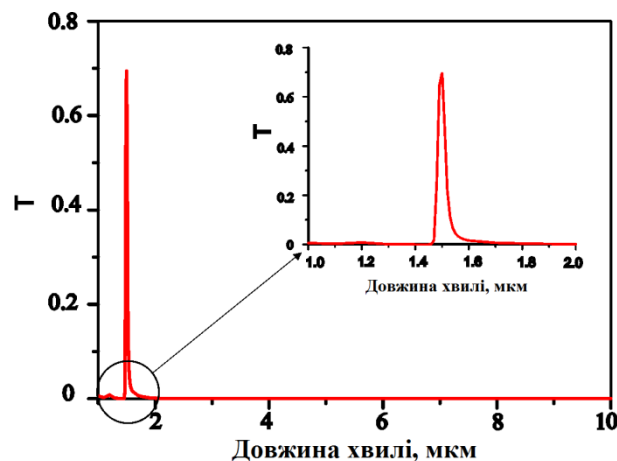


Рис. 4.20. Спектр пропускання металевої ґратки, розміщеної між двома шарами діелектрика, з товщиною шару діелектриків  $0,1204$  мкм і товщиною ґратки  $0,2$  мкм

Розподіл модуля напруженості електричного поля по координаті  $x$ , тобто в межах періоду ґратки представлений на рис. 4.21. Криві 1 і 5 відповідають

розподілу поля на межі діелектричних шарів і однорідних середовищ з діелектричною проникністю  $\varepsilon = 1,0$ . Криві 2 і 4 відповідають розподілу поля на межі ґратки і діелектричних шарів. Крива 3 відповідає розподілу поля всередині ґратки, поміщеної між двома шарами діелектрика. Розрахунки розподілу поля проведено в залежності від товщини діелектричних шарів при постійній глибині ґратки 0,2 мкм (4.21а) і від глибини ґратки при постійній товщині діелектричних шарів 0,1212 мкм (4.21б).

Рис. 4.21а представляє результати обчислення, коли враховувалась уявна частина діелектричної проникності металу. Результати, представлені на рис. 4.21б, відповідають випадку, коли уявною частиною діелектричної проникності металу можна знехтувати. Можна бачити, що в разі нехтування уявною частиною діелектричної проникності металу, пропускання дорівнює 1, а відбивання дорівнює 0. Для цього випадку криві 1, 5 і 2, 4 з графічною точністю збігаються.

Амплітуди поля в відносних одиницях значно вище, ніж одинична амплітуда падаючої хвилі. Таким чином, резонанс поля відбувається в діелектричних шарах.

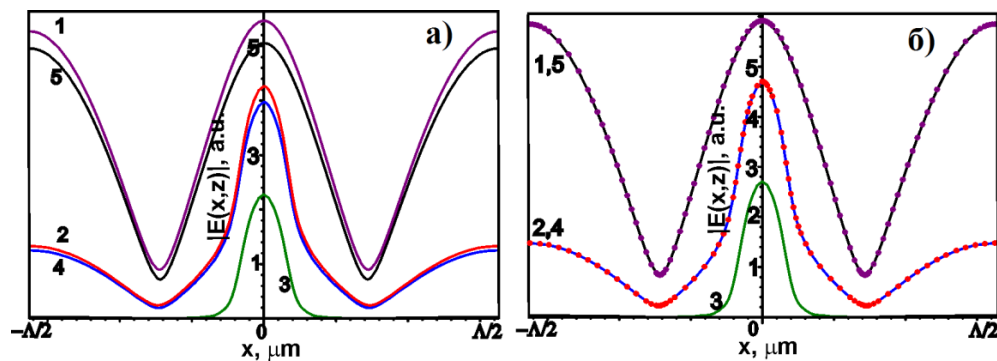


Рис. 4.21. Розподіл тангенціальної складової модуля напруженості електричного поля вздовж періоду ґратки для товщини шарів діелектриків 0,1204 мкм і глибини ґратки 0,2 мкм: (а) уявна частина діелектричної проникності металу врахована при розрахунках, (б) уявною частиною діелектричної проникності металу можна знехтувати. Точки представляють собою криві 4 і 5 (б).

З іншого боку, інтенсивність цього резонансу визначається товщиною ґратки. Криві 1, 5 і 2, 4 розходяться зі збільшенням товщини ґратки. У цьому випадку поле зменшується всередині щілини, якщо враховується уявна частина діелектричної проникності металу. Резонанс відсутній всередині щілини, оскільки стала поширення має велику уявну складову в щілині, тут маємо своєрідне підсилення фотонів.

Можна вважати, що два хвилеводи (резонатори) з'єднані щілиною і коефіцієнт зв'язку визначається довжиною щілини (товщиною ґратки). Високий коефіцієнт пропускання досягається в результаті інтенсивного поля, що формується ґраткою в шарі діелектрика над щілиною. Такий механізм підвищеного пропускання є неможливим для ТМ поляризації, оскільки стала поширення має незначну уявну частину навіть для ширини щілини, що значно менша, за довжину хвилі. Тому наявність діелектричних шарів тільки знижує пропускання в результаті поширення хвилі в діелектричних шарах, як у хвилеводі. Це дає додаткові втрати електромагнітної енергії при взаємодії поля з металевією поверхнею.

#### **4.4 Резонансні характеристики масиву металевих нанодротів, розміщених на діелектричній підкладці.**

В теперішній час проводяться інтенсивні як теоретичні так і експериментальні дослідження плазмонного резонансу в самих різноманітних металевих наноструктурах, таких як сферичні, еліпсоїдні, циліндричні металеві наночастинки, а також діелектричні наночастинки, покриті металами. Поверхневі плаزمони можуть бути збуджені резонансною взаємодією падаючої хвилі колективного коливання електронів у благородному металі, що приводить до надзвичайної чутливості поверхневого плазмона до показника заломлення навколишнього середовища. Ця характеристика дозволяє застосувувати поверхневий плазмонний резонанс для вивчення адсорбентів на поверхні, шорсткості поверхні та інших явищ. Наприклад, пристрої на основі резонансу широко застосовуються для підсилення оптичних явищ в різних структурах в



сенсорних застосуваннях, у фотокаталізі та антибактеріальних застосуваннях, в хімічних областях, у сонячній енергетиці [46, 47] та ін.

Плазмонний резонанс також можна спостерігати в ґратках, що представляють собою періодично розташовані нанодропи на діелектричній підкладці. Нанодропи можуть бути квадратного чи прямокутного перерізу, причому ширина нанодропу набагато менша за період ґратки, а період менший ніж довжина хвилі.

#### **4.4.1. Дифракція на металевих ґратках з параметрами, за яких реалізується резонанс локалізованих плазмонів**

Дослідженню дифракції на металевих ґратках з параметрами, за яких реалізується резонанс локалізованих плазмонів, опубліковано відносно невелике число робіт порівняно з величезним масивом праць, які присвячені дифракції світла на ґратках. При резонансі поверхневих плазмон–поляритонів виникають великі поля у відповідності до теоретичного аналізу [348], проте резонанс проявляється у вузькій спектральній області. Але при практичному виготовленні таких ґраток, в яких проявляється вузькосмуговий резонанс, результати експерименту суттєво відрізняються від теоретичних передбачень [406]. Це пояснюється тим, що при виготовленні ґраток не реалізується їх строга періодичність. Проте, можна очікувати, що резонанс локалізованих плазмонів в металевих наногратках буде спектрально широкосмуговим, тому невелике порушення періодичності не суттєво вплине на резонанс в експериментальних зразках. Отже, доцільно провести дослідження резонансу локалізованих плазмонів в металевих наногратках, щоб прогнозувати властивості експериментально виготовлених нанограток.

Приклад наноструктури, що представляє собою періодичне розміщення нанодропів на діелектричній підкладці показаний на рис. 4.22.

Для такої ґратки з золотими та срібними нанодропами розміром  $30 \times 30 \text{ нм}^2$  на підкладці з плавленого кварцу, показник заломлення якого складає 1,45, було проведено комп'ютерне моделювання спектральних характеристик методом

зв'язаних хвиль [417–419]. Золото і срібло вибрані з тієї точки зору, що їхні дійсні частини діелектричної проникності в широкому спектральному діапазоні мало відрізняються, а уявні частини проникності в області виникнення локалізованого плазмонного резонансу суттєво різні [333].

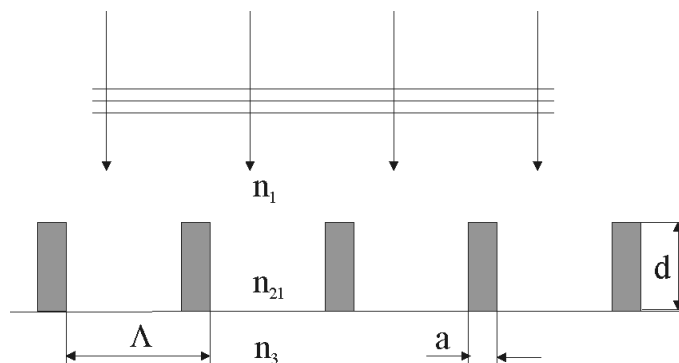


Рис. 4.22. Зображення ґратки з нанодротоми:  $n_3$  - показник заломлення підкладки,  $n_1$  – показник заломлення середовища над ґраткою,  $n_{21}$  показник заломлення середовища між нанодротоми.

Можна очікувати, що тут також буде проявлятися резонанс поверхневих плазмонів, але, оскільки розсіяне світло на окремому нанодроті буде взаємодіяти з сусідніми нанодротоми, то при резонансі плазмонів можуть проявлятися певні особливості, наприклад, суттєве збільшення полів на поверхні нанодротів

На рис. 4.23 представлені спектральні залежності коефіцієнта відбивання (криві 1) та поглинання (криві 2) в наногратках з золота. В наногратці спостерігається поглинання за рахунок резонансу плазмонів приблизно на довжині хвилі 0,52 мкм. На такій же довжині хвилі спостерігається резонансне поглинання для сферичних наночастинок золота, розміщених хаотично в рідині.

Можна зробити також висновок, що поглинання зростає із збільшенням показника заломлення оточуючого середовища та із зменшенням періоду ґратки. Але для нанограток із золота плазмонний резонанс не є яскраво виражений, оскільки співвідношення між уявною та дійсною частиною діелектричної сталої не сприяють інтенсивному прояву резонансу плазмонів. З цієї точки зору більш характерно проявляється резонанс плазмонів для нанограток із срібла.

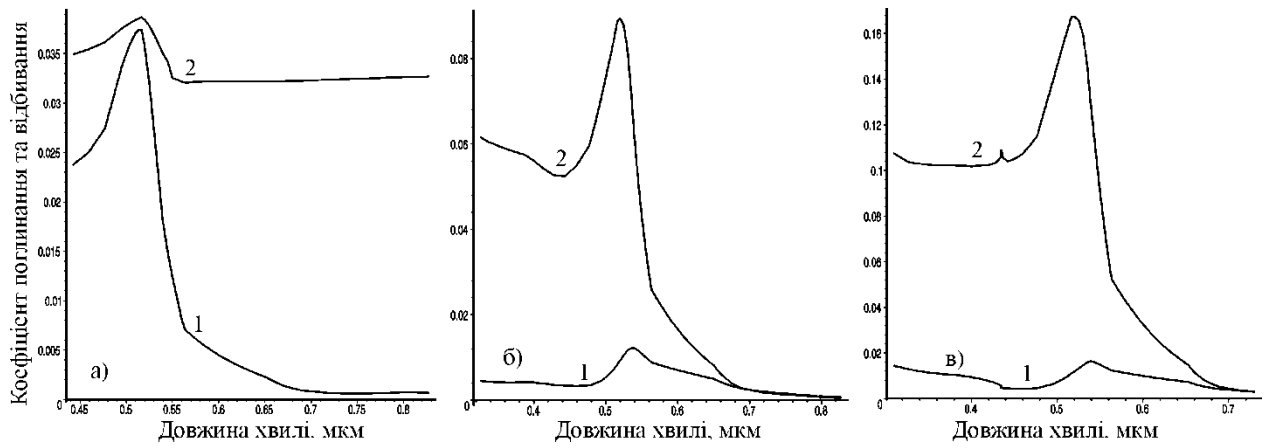


Рис. 4.23. Спектральні залежності коефіцієнта відбивання та поглинання наногратки: (а) –  $n_1 = 1$ ,  $n_{21} = 1.45$ ,  $\Lambda = 0.55$  мкм; (б) –  $n_1 = 1.45$ ,  $n_{21} = 1.45$ ,  $\Lambda = 0.55$  мкм; (в) –  $n_1 = 1.45$ ,  $n_{21} = 1.45$ ,  $\Lambda = 0.3$  мкм.

Спектральні залежності для срібла представлені на рис. 4.24. Розмір нанодотів складає  $30 \times 30$  нм. Період ґратки рівний  $0,55$  мкм. На рис. 4.24а наведені спектральні дані для наступних параметрів:  $n_1 = 1$ ,  $n_{21} = 1.45$ ,  $\Lambda = 0.55$  мкм. Бачимо, що спектральна крива поглинання має два піки на довжинах хвиль на  $0,36$  мкм і  $0,4025$  мкм.

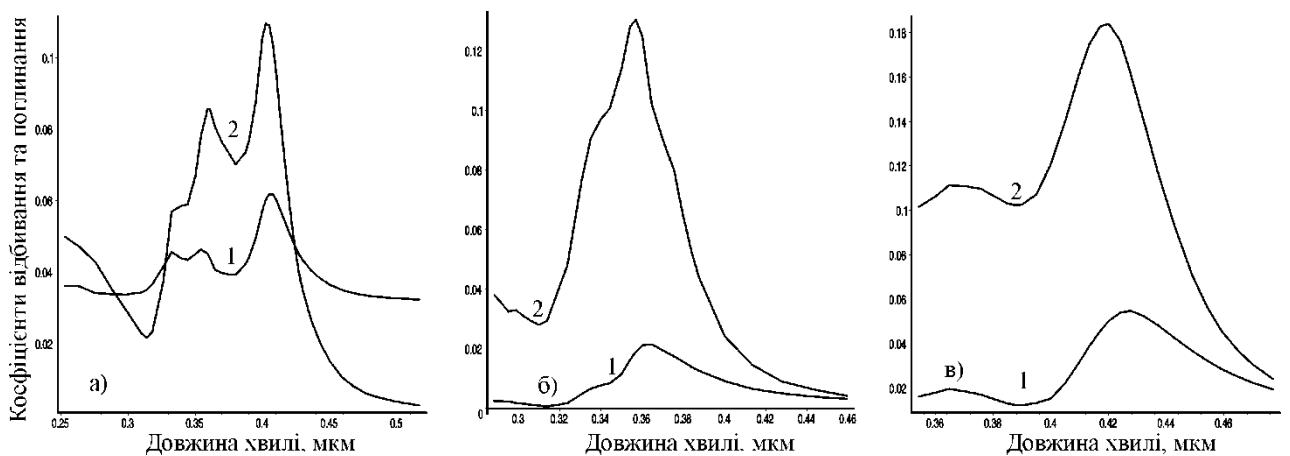


Рис. 4.24 Спектральні залежності коефіцієнта відбивання та поглинання наногратки із срібла: 1– спектральні залежності коефіцієнта відбивання, 2 – спектральні залежності коефіцієнтів поглинання.

На довжині хвилі 0,38 мкм спостерігається локальний мінімум. Більш детальні дослідження підтверджують таку структуру спектральної кривої. Можна стверджувати, що ці піки пояснюються плазмонним резонансом в частинах нанодроту, які контактують із середовищем з  $n=1$  і  $n=1.45$ . Для підтвердження цієї гіпотези проведені дослідження для  $n_1 = n_{21} = 1$  (рис. 4.24б) та для  $n_1 = n_{21} = 1.45$  (рис. 4.24в). Період ґратки для рис. 4.24 складає 0,55 мкм.

Розщеплення піків поглинання можна пояснити ще іншим чином. Оскільки маємо регулярну періодичну структуру, то на резонанс плазмонів впливає взаємозв'язок між сусідніми нанодротоми. Подібна ситуація виникає в електротехніці, коли маємо зв'язок між двома ідентичними високо добротними контурами. Частотна характеристика також має провал між двома максимумами. Якщо контури низькодобротні, то частотна характеристика є одnogорбою, що відповідає спектральній характеристиці наногратки із золота. Але для остаточного висновку стосовно природи розщеплення піків поглинання необхідно провести додаткові дослідження.

#### **4.4.2. Резонанс поверхневих локалізованих плазмонів у системі періодично розташованих золотих та срібних нанодротів на діелектричній підкладці**

В цій частині роботи ми досліджували наногратки з періодично розташованих нанодротів квадратного перерізу  $50 \times 50$  нм<sup>2</sup> з срібла та золота на діелектричній підкладці, щоб бачити якісні та кількісні відмінності для цих двох металів. Такий розмір взято з тієї точки зору, що такі структури неважко виготовляти з використанням сучасних технологій рентгенівської або електронної літографії, а також з тої причини, що в таких наногратках не проявляються резонанси інших видів, наприклад резонанс в щіліні, чи резонанс поверхневих плазмон-поляритонів. Також було враховано при виборі розмірів нанодротів те, що резонанс локалізованих поверхневих плазмонів також переважно досліджується при розмірі металевих наночастинок сферичної форми діаметром

20...100 нм. Періодичне розташування на підкладці нанодротів круглого перерізу може мати практично теоретичний інтерес, оскільки, навіть якщо виготовити нанодроти круглого перерізу певного діаметру і достатньої довжини, то їх важко періодично розташувати на діелектричній підкладці. Також для визначення тенденції, як впливає розмір нанодротів на спектральні характеристики, були дослідженні наногратки зі срібла при розмірі нанодротів  $30 \times 30 \text{ нм}^2$ .

Для визначення кількості зв'язаних хвиль АТМЗХ для досягнення необхідної точності розрахунку спершу були отримані залежності коефіцієнтів відбивання, пропускання та поглинання від  $N$ , які відображені на рис. 4.25. Кількість використаних зв'язаних хвиль є непарним числом. Різниця для  $N$  для двох сусідніх точок рис. 4.25 складає 4. Розрахунки проведені при нормальному падінні плоскої хвилі на ґратку [420].

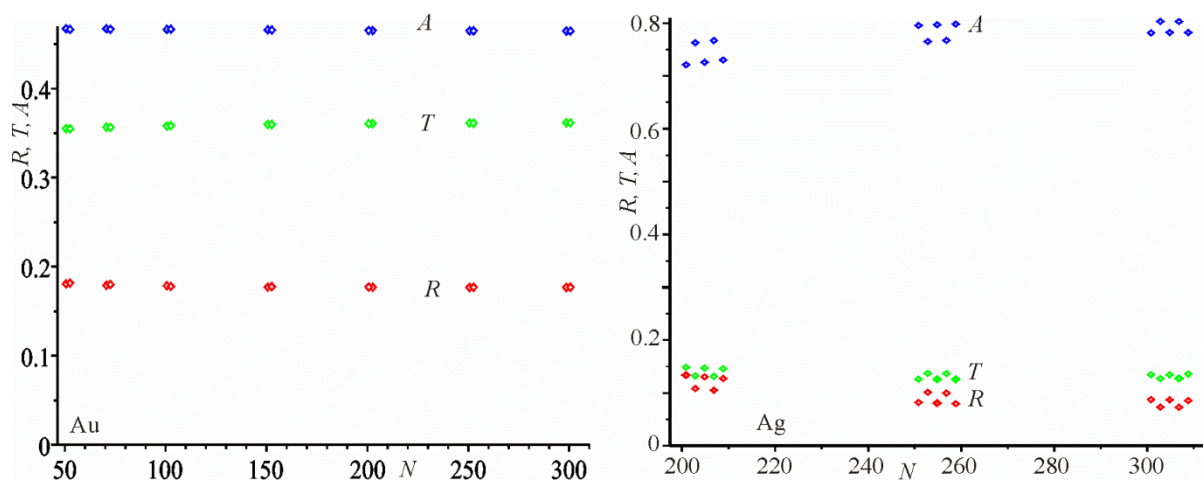


Рис. 4.25. Залежність коефіцієнтів відбивання ( $R$ ), пропускання ( $T$ ) та поглинання ( $A=I-T-R$ ) від кількості ( $N$ ) врахованих зв'язаних хвиль при розрахунку АТМЗХ для ґраток з такими параметрами:  $d=50\text{нм}$ ,  $\epsilon_1=\epsilon_{21}=1$ ,  $\epsilon_3=2.25$ ,  $\Lambda=0.1 \text{ мкм}$  на довжинах хвиль 530 і 379 нм для золота та срібла, відповідно.

Ці рисунки демонструють, що для золота при  $N>301$  результати комп'ютерного розрахунку від  $N$  практично не залежать. Для срібла

спостерігається тенденція насичення при  $N > 301$ , але наявні незначні стрибки при зміні  $N$  на одиницю, наприклад  $N=299$  і  $N=301$ . Крім цього потрібно врахувати, що час комп'ютерного розрахунку зростає у  $2^3=8$  разів при збільшенні  $N$  у два рази. Тобто  $N=301$  ми вибрали з точки зору задовільної точності розрахунку для срібла і прийняттого часу комп'ютерного аналізу. Таким чином, при  $N=301$  отримані всі наступні результати, за виключення точок, які отримані при  $N=299$  срібла, які відображені на рис. 4.26

Маючи спектральну залежність діелектричної проникності золота та срібла та знаючи необхідну кількість зв'язаних хвиль для досягнення необхідної точності, можна розрахувати спектральні залежності відбивання, пропускання та поглинання у ґратках, які по суті є основними залежностями.

На рис. 4.26 наведені спектральні залежності коефіцієнтів відбивання, пропускання та поглинання ґраток із золота та срібла в спектральних діапазонах 290...700 нм та 290...500 нм. Для золота маємо один широкий резонанс з максимумом 0,465 в спектрі поглинання на довжині хвилі 530 нм, а для срібла через малу уявну частину діелектричної проникності “широкий” резонанс розщеплюється на декілька вузьких піків, один з яких рівний 0,78 на довжині хвилі 379 нм. Таке розщеплення “широкого” резонансу для нанограток зі срібла на декілька вузьких піків можна пояснити тим, що розсіяння на нанодротах зі срібла є значно сильнішим за розсіяння на нанодротах з золота, що узгоджується з тим, що диференціальний переріз розсіяння оптичної хвилі на сферичних наночастинках зі срібла є більшим ніж переріз на частинках із золота [421]. Розсіяння в АТМЗХ описується зв'язаними хвилями ненульового порядку. В наших числових експериментах зв'язані хвилі ненульового порядку в області резонансу більші для срібла ніж для золота, причому амплітуда хвилі ненульового порядку може бути більшою ніж амплітуда падаючої хвилі. Отже, окремий нанодріт у ґратці буде взаємодіяти з падаючою хвилею та розсіяними хвилями, які між собою інтерферують, що призводить до розщеплення широкого резонансу на вузькі піки. Це твердження також узгоджується з тим, що поля у ґратці на довжині хвилі локального мінімуму поглинання є меншими ніж поля

на довжині хвилі локального максимуму. На довжині хвилі 0.365 мкм, де спостерігається локальний мінімум поглинання, максимальні поля складають 90 або 300 від. од. в залежності від методу розрахунку.

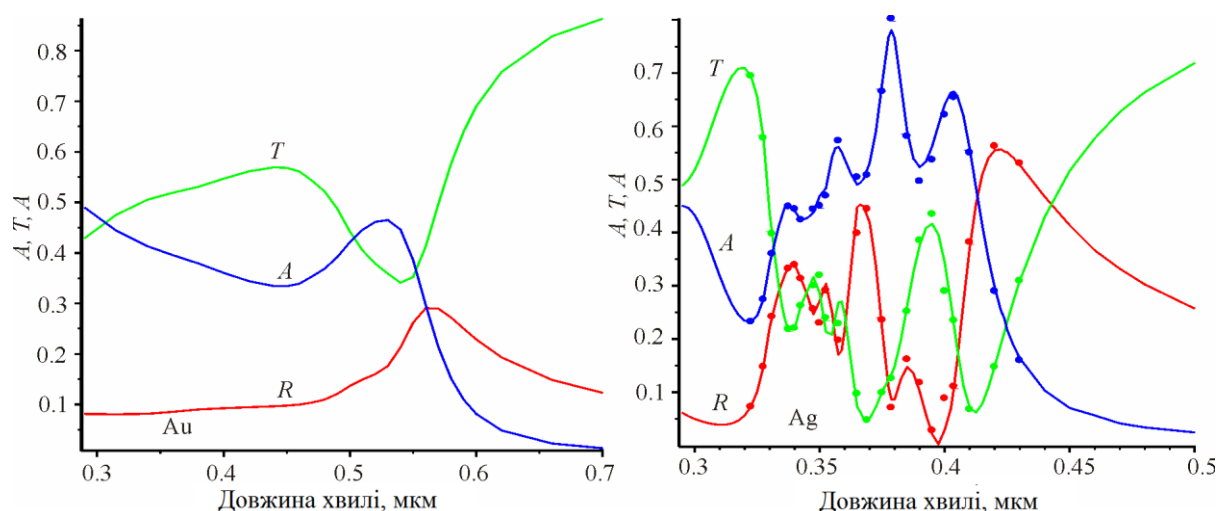


Рис. 4.26. Спектральні залежності коефіцієнтів відбивання (червоний колір), пропускання (зелений колір) та поглинання (синій колір) ґраток із золота та срібла при параметрах ґраток, як на рис. 4.25

Значення довжин хвиль 530 нм для золота і 379 нм для срібла, на яких отримано максимальне поглинання, використані для проведення комп'ютерних розрахунків, результати яких наведені на рис. 4.25, 4.27 та 4.28. Ці довжини хвиль вибрані з тієї точки зору, що при максимумі поглинання резонанс проявляється з “максимальною силою”. Неперервна крива для срібла на рис. 4.26 розрахована при  $N=301$ .

Крапки на рис. 4.26 для срібла розраховані при  $N=299$ . Бачимо, що ці точки в інтервалі довжин хвиль 0.34...0.41 мкм близькі до неперервних кривих і узгоджуються з рис. 4.25. Поза цим інтервалом точки добре лягають на криві.

В спектральній області прояву резонансу можливе суттєве підвищення полів на металевих нанодротах, оскільки це може бути корисним для практичного використання таких наноструктур, тим більше, що сучасні технології дозволяють їх виготовити. Тому нами проведено розрахунок полів вздовж одного періоду ґратки.

На рис. 4.27 наведено розподіл модуля напруженості електричного поля (тангенціальна складова) вздовж періоду ґратки, розрахований традиційним методом. Розподіл напруженості електричного поля вздовж періоду, який можна представити у вигляді комплексного ряду Фур'є при нормальному падінні на ґратку, можна записати наступним чином

$$E(x, z) = \sum_{j=-(N-1)/2}^{(N-1)/2} E_j(z) \cos\left(j \frac{2\pi}{\Lambda} x\right), \quad (4.3)$$

Де  $E_j(z)$  – коефіцієнти ряду Фур'є, які отримують з допомогою RCWA, кількість таких коефіцієнтів визначається кількістю зв'язаних хвиль  $N$ , використаних при розрахунку.

Розподіли полів, відображених на рис. 4.27, розраховані за виразом (4.3) при  $N=301$ . Бачимо, що максимальна напруженість поля для срібла є набагато більша ніж для золота, майже у вісім разів. Максимальне поле формується на межі метал–діелектрик на поверхні підкладки ( $z=d$ ) у вузькій координатній області. З цього рисунку також видно, що розподіл поля вздовж координати  $x$  має значні осциляції, що не є природнім. На цей ефект звернуто увагу в праці [345], і запропоновано дещо інший підхід для розрахунку полів, який узгоджується з роботою [245].

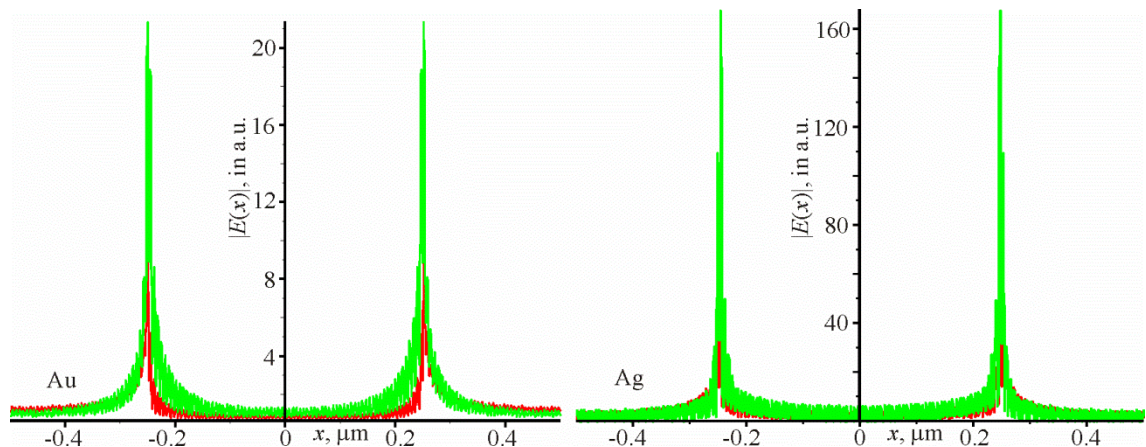


Рис. 4.27. Розподіли модуля напруженості електричного поля вздовж періоду ґратки, розраховані за методом роботи [252]:  $z=0$  – червоний колір,  $z=d$  – зелений колір. Довжина хвилі 530 nm для ґратки із золота і 379 nm для ґратки із срібла. Параметри ґраток як на рис. 4.25. Розміри нанодротів для золота та срібла складають  $50 \times 50 \text{ nm}^2$



Розподіл поля згідно роботи [345] можна записати таким чином

$$E(x, z) = \frac{\sum_{j=-(N-1)/2}^{(N-1)/2} \left( \left\| \frac{1}{\varepsilon(x)} \right\|^{-1} E_j(z) \right) \cos\left(j \frac{2\pi}{\Lambda} x\right)}{\varepsilon(x)}, \quad (4.4)$$

де  $\left\| \frac{1}{\varepsilon(x)} \right\|^{-1}$  – матриця Теплиця, яка побудована на основі коефіцієнтів ряду Фур'є

періодичної функції  $\frac{1}{\varepsilon(x)}$ ;  $\varepsilon(x)$  – функціональна залежність діелектричної

проникності ґратки,  $D(x, z) = \sum_{j=-(N-1)/2}^{(N-1)/2} \left( \left\| \frac{1}{\varepsilon(x)} \right\|^{-1} E_j(z) \right) \cos\left(j \frac{2\pi}{\Lambda} x\right)$  – тангенціальна

складова електричної індукції у ґратці, є неперервною на межі метал – діелектрик.

На рис. 4.28 наведені модулі електричних полів, розрахованих у відповідності до виразів, представлених в [348].

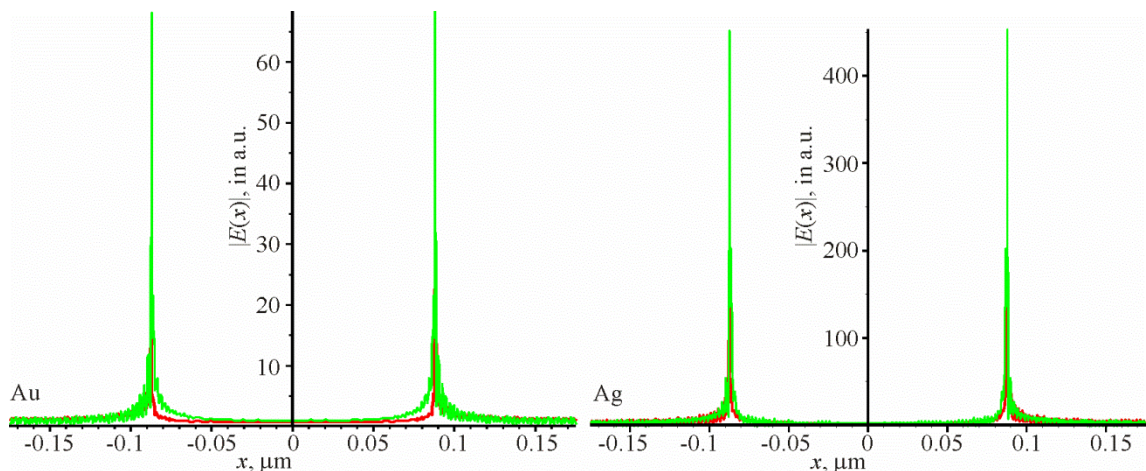


Рис. 4.28. Розподіли модуля напруженості електричного поля вздовж періоду ґратки, розраховані за методом роботи [345]:  $z=0$  – червоний колір,  $z=d$  – зелений колір. Довжина хвилі 530 нм для ґратки із золота і 379 нм для ґратки із срібла. Параметри ґраток як на рис. 4.25. Розміри нанодротів для золота та срібла складають  $50 \times 50 \text{ нм}^2$

Бачимо, що розподіл поля на рис. 4.28 суттєво відрізняється від розподілу поля, наведеного на рис. 4.27. Максимальні поля збільшилися приблизно в три рази як для золота, так і для срібла, також зменшилися осциляції. Піки на межі метал–діелектрик стали суттєво вужчими ніж на рис. 4.27.

Формули (4.3) і (4.4) стосуються розрахунку поля у ґратці, використовуючи амплітуди зв'язаних хвиль, які отримані АТМЗХ у відповідності до [330]. За формулою (4.3) розраховуються поля, як це слідує з інших праць Moharam M. G. et. al. Поле за формулою (4.4) розраховується у відповідності до роботи [345], де обґрунтована ця процедура і яка узгоджується з працею [260]. Процедура, що описана в [345], нам здається доцільною, оскільки розраховані поля таким методом мають менші осциляції, а ширина піків на межі метал-діелектрик є вужчими, що є ближчим до реальності. Таку відмінність полів, відображених на рис. 4.27 і 4.28, можна пояснити тим, що амплітуди зв'язаних хвиль, отримані безпосередньо з розв'язку системи диференціальних рівнянь АТМЗХ, відрізняються за модулем і за фазою від амплітуди хвиль, отриманих у відповідності до рівняння (4.5).

На основі формули (4.4), можна розрахувати коефіцієнти ряду Фур'є електричного поля згідно виразу

$$E'_j(z) = \frac{1}{\Lambda} \int_{-\frac{\Lambda}{2}}^{\frac{\Lambda}{2}} E(x, z) \exp\left(j \frac{2\pi}{\Lambda} x\right) dx. \quad (4.5)$$

Як показав розрахунок, складові поля у формулі (4.3)  $E_j(x, z) = E_j(z) \cos\left(j \frac{2\pi}{\Lambda} x\right)$  при  $x = F\Lambda$ , тобто на межі метал-діелектрик, відрізняються між собою за фазою, тому максимальне значення напруженості поля на рис. 4.27 є значно меншим ніж на рис. 4.28, причому пік є ширшим, а осциляції на рис. 4.27 є більшими ніж на рис. 4.28. Аналогічні компоненти поля у формулі (4.4)  $E'_j(x, z) = E'_j(z) \cos\left(j \frac{2\pi}{\Lambda} x\right)$  при  $x = F\Lambda$  для всіх  $j$  мають однакову

фазу, що приводить до суттєвого збільшення поля при  $x = F\Lambda$ , до зменшення ширини піку та осциляцій.

На рис. 4.26 відображені спектральні залежності коефіцієнтів відбивання, пропускання та поглинання для наногратки на основі нанодротів з золота та срібла, які розташовані на прозорій підкладці з діелектричною проникністю 2.25, що є типовим. Для того щоб підтвердити основні висновки, які стосуються спектральних залежностей, проведені додаткові розрахунки при інших параметрах ґраток. Ці залежності відображені на рис. 4.29, 4.30 і 4.31.

На рис. 4.29 наведені спектральні залежності коефіцієнтів відбивання, пропускання та поглинання ґраток із золота в спектральній області 290...700 нм для різних параметрів ґраток. Для рис. 4.29а резонансний максимум в поглинанні рівний 0.406 на довжині хвилі 503 нм для рис. 4.29б максимум поглинання рівний 0.582 на довжині хвилі 525 нм.

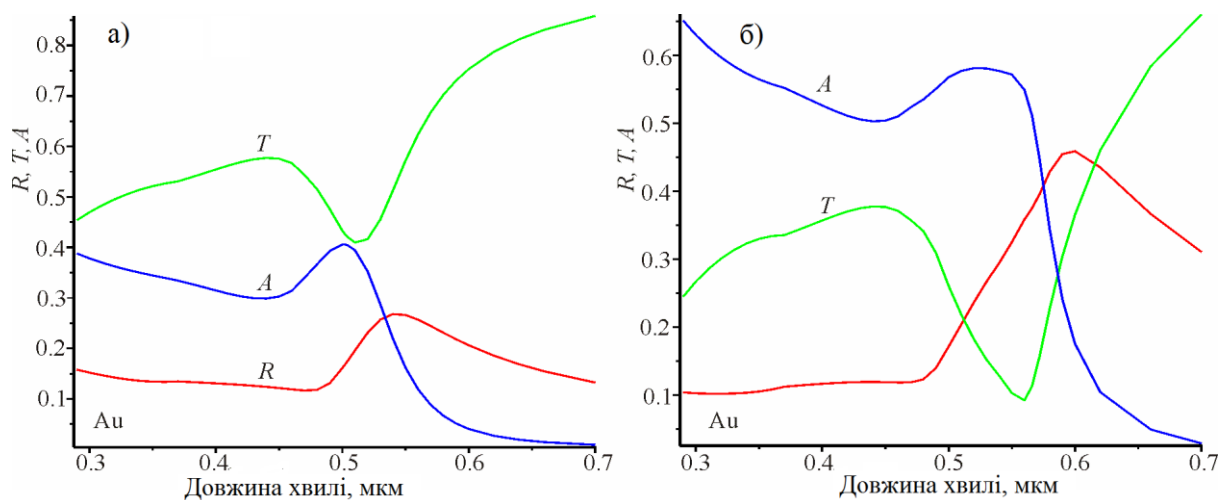


Рис. 4.29. Спектральні залежності відбивання, пропускання та поглинання для ґраток із золота: (а)  $\epsilon_1 = \epsilon_{21} = \epsilon_3 = 1$ ,  $\Lambda = 0,1$  мкм; (б)  $\epsilon_1 = \epsilon_{21} = \epsilon_3 = 2.25$ ,  $\Lambda = 0,1$  мкм.

Розміри нанодротів для золота складають  $50 \times 50$  нм<sup>2</sup>

Як бачимо, спектральні характеристики наногратки із золота якісно подібні, лише максимуми поглинання зміщуються у спектрі до більшої довжини хвилі при збільшенні діелектричної проникності оточуючого середовища. Тобто, при зміні діелектричної проникності середовища, що оточує періодичну структуру

нанодротів із золота, спектральні характеристики якісно не змінюються, а лише кількісно. Аналогічна властивість характерна для сферичних наночастинок. При збільшенні довжини хвилі коефіцієнти поглинання та відбивання для таких ґраток зменшуються, а коефіцієнт пропускання зростає. Для хвиль ТЕ поляризації коефіцієнт пропускання із збільшенням довжини хвилі зменшується. На цьому принципі ґрунтуються поляризатори для інфрачервоної області спектру.

На рис. 4.30 наведені спектральні залежності коефіцієнтів відбивання, пропускання та поглинання ґраток із срібла в спектральній області 290...500 нм для різних параметрів ґраток. Бачимо, що із збільшенням періоду ґраток максимальний пік зменшується, також зменшується загальна ширина резонансу. Спектральний характер коефіцієнтів відбивання, пропускання та поглинання для срібла є значно складніший ніж для золота. Причому, зі збільшенням періоду ґратки деякі піки поглинання зменшуються, а деякі піки навіть пропадають, особливо це помітно при  $\Lambda=0,35$  мкм.

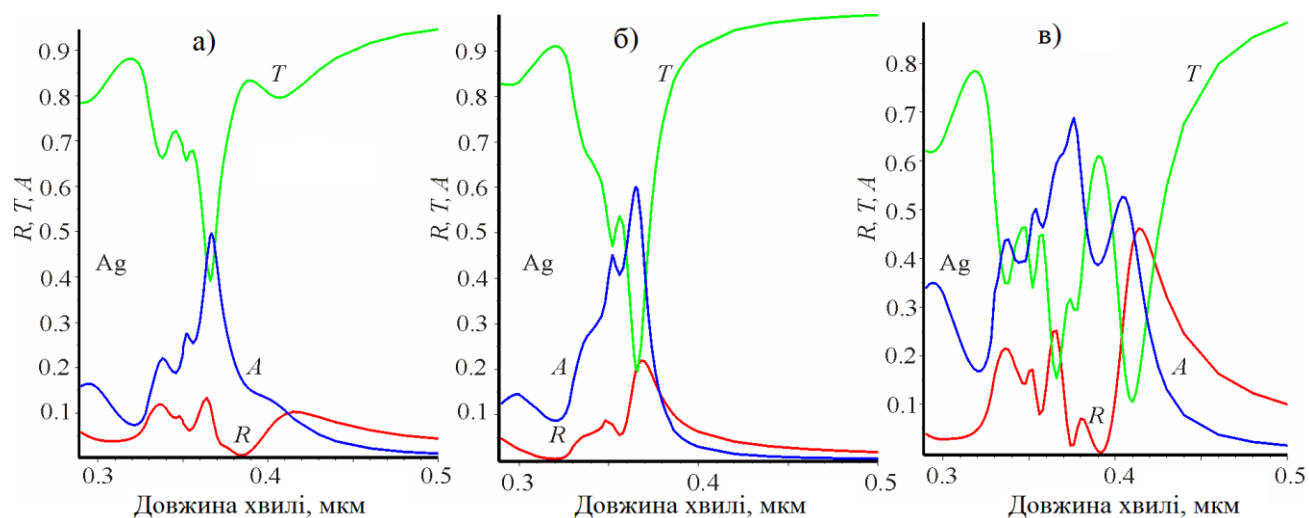


Рис. 4.30. Спектральні залежності відбивання, пропускання та поглинання для ґраток із срібла: (а)  $\epsilon_1 = \epsilon_{21} = 1$ ,  $\epsilon_3 = 2.25$ ,  $\Lambda = 0,35$  мкм; (б)  $\epsilon_1 = \epsilon_{21} = \epsilon_3 = 1$ ,  $\Lambda = 0,35$  мкм, (в)  $\epsilon_1 = \epsilon_{21} = 1$ ,  $\epsilon_3 = 2.25$ ,  $\Lambda = 0,15$  мкм. Розміри нанодротів для срібла складають

$$50 \times 50 \text{ нм}^2$$

На рис. 4.31 наведені спектральні характеристики коефіцієнтів відбивання, пропускання та поглинання для срібної ґратки, для якої квадратний нанодріт має розміри 30x30 нм. Бачимо, що спектральні характеристики (відбивання, пропускання та поглинання) якісно дещо подібні на рис. 4.26 для срібла, але максимальний коефіцієнт поглинання є меншим (0,45) в порівнянні з максимальним коефіцієнтом поглинання 0,78 рис. 4.26.

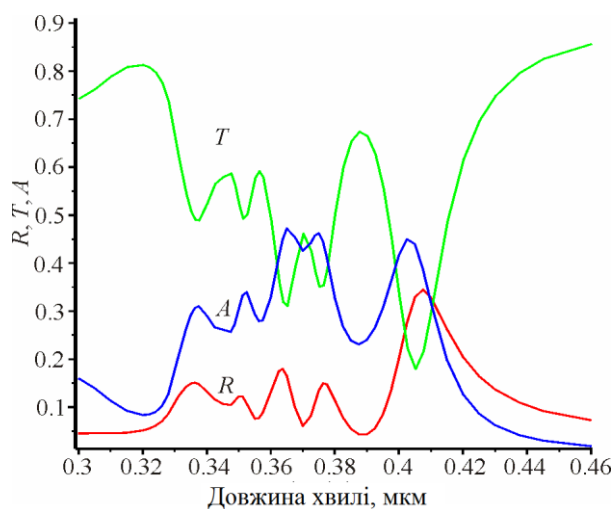


Рис. 4.31. Спектральні залежності відбивання, пропускання та поглинання для ґраток із срібла при таких параметрах ґратки:  $\epsilon_1 = \epsilon_{21} = 1$ ,  $\epsilon_3 = 2.25$ ,  $\Lambda = 0.1$  мкм,  $d = l = 0.03$  мкм.

Тобто, рис. 4.31 і рис. 4.26 підтверджують гіпотезу, що на спектральні характеристики впливає не лише взаємодія поля падаючої плоскої хвилі з нанодротоми, а також взаємодія поля розсіяного світла на нанодроті з сусідніми дротами. Для золота спектральні залежності коефіцієнтів відбивання, пропускання та поглинання є гладкими, один додатковий пік є ледь помітним (див. рис. 4.26). Така відмінність між спектральними характеристиками для ґраток із золота та срібла пояснюється тим, що диференціальний переріз розсіяння на нанодроті із срібла є значно більшим ніж переріз розсіяння на нанодроті із золота, що узгоджується з перерізами розсіяння сферичних наночастинок золота та срібла [422].

Резонанс плазмонів для ґраток із золота та срібла проявляється по різному завдяки тому, що уявна частина показника заломлення срібла є суттєво менша за уявну частину показника заломлення золота в спектральних областях прояву резонансу.

Для золота спостерігається резонанс у широкій спектральній області, в той же час резонанс для срібла розщеплюється на декілька вузьких піків. Цей ефект можна пояснити тим, що розсіяне світло на нанодротах інтерферує з плоскою хвилею, яка падає на ґратку. Із збільшенням періоду ґратки зі срібла коефіцієнт поглинання зменшується, амплітуди додаткових піків зменшуються, а сумарна ширина всіх піків також зменшується. При резонансі локалізованих поверхневих плазмонів суттєво підсилюються поля на поверхні нанодротів, особливо це характерно для срібла, де підсилення поля складає більше 400 відносних одиниць, якщо розрахунок поля проводився відповідно до роботи [345].

Відмінність між полями, що наведені на рис. 4.27 і рис. 4.28 і які розраховані за виразами (4.3) і (4.4), пояснюється тим, що компоненти поля у формулі (4.3) при  $x = F\Lambda$ , тобто на межі метал-діелектрик, відрізняються між собою за фазою, тому максимальне значення напруженості поля на рис. 4.27 є значно меншим ніж на рис. 4.28, причому пік є ширшим, а осциляції на рис. 4.27 є більшими ніж на рис. 4.28. Аналогічні компоненти поля у формулі (4.4) при  $x = F\Lambda$  для всіх  $j$  мають однакову фазу, що приводить до суттєвого збільшення поля при  $x = F\Lambda$  та до зменшення ширини піку та осциляцій.

Також потрібно відмітити, що поля на нанодротах, які формують ґратку, досягають декілька сотень відносних одиниць, що значно більше ніж поля, які виникають на окремих наночастинках, наприклад, сферичної форми. Це пояснюється періодичним розташуванням нанодротів на ґратці, і на певних довжинах хвиль наявна конструктивна інтерференція падаючої хвилі та розсіяних хвиль на сусідніх нанодротах, що приводить до підсилення поля. Цей висновок підтверджується також тим, що із збільшенням періоду ґратки, тобто при зменшенні коефіцієнта заповнення  $F$ , розсіяне поле на сусідніх нанодротах, що падає на певний нанодріт, зменшується, що приводить до зменшення

поглинання та зменшення поля на нанодротах а також до зменшення кількості піків. Зменшення кількості піків поглинання при збільшенні періоду ґратки свідчить також про те, що на спектральні характеристики має вплив розсіяне світло на дальніх сусідніх нанодротах. Для ансамбля наночастинок характерне хаотичне розташування, внаслідок цього поле на окремій наночастиці є сумою поля падаючої хвилі та розсіяних полів на сусідніх наночастинках, фаза яких може бути довільною, що приводить до малої ймовірності суттєвого підсилення поля на окремій наночастиці ансамбля.

Слід також зауважити, що такі наногратки можна виготовити з використанням рентгенівської або електронної літографії. Значне підсилення поля на періодично розташованих нанодротах може мати практичне застосування в комірках КРС, а також для підсилення люмінесценції завдяки значному підсиленню поля.

#### **4.5 Висновки до четвертого розділу**

Вивчено резонансні явища в ґраткових мікро- та наноструктурах, розглянуто умови виникнення в них хвилеводного, плазмон-поляритонного та плазмонного резонансів та фактори, які впливають на їх спектральні характеристики.

Результати досліджень показали, що оптичне пропускання визначається хвильовими властивостями щілини ґратки, і є мінімальна ширина щілини для ТЕ поляризації, де високе пропускання забезпечується хвилеводним ефектом. На противагу цьому, такого обмеження не існує для ТМ поляризації і екстраординарне пропускання отримується при субхвильовій щілині.

Резонансне пропускання для ТЕ поляризації відбувається тільки за рахунок хвилеводного ефекту і є мінімальна ширина щілини, при якій він виникає, а отже і високе пропускання. Пропускання металеві ґратки, розміщеної між двома шарами діелектрика, є високим зокрема для певних довжин хвиль ТЕ поляризації. Показано, що аномально високе пропускання реалізується на довжині хвилі, яка відповідає двом резонансам: хвилеводному резонансу в

діелектричних шарах та резонансу в діелектричній щілині металеві гратки. Два хвилеводи (вони ж резонатори) зв'язані між собою через щілину, і величина коефіцієнта зв'язку визначається довжиною щілини (товщиною гратки). Високе пропускання тут досягається за рахунок того, що з допомогою гратки над щілиною у діелектричному шарі формується інтенсивне поле, яке призводить до просочування енергії поля через щілину. Для хвиль ТМ поляризації такий механізм досягнення високого пропускання неможливо реалізувати, оскільки навіть для щілини, ширина якої набагато менша довжини хвилі, постійна поширення має малу уявну частину. Тому наявність діелектричних шарів лише зменшує коефіцієнт пропускання періодичної структури за рахунок поширення хвилі в діелектричних шарах як у хвилеводі, що приводить до додаткових втрат електромагнітної енергії при взаємодії поля з металевією поверхнею.

Проаналізовано взаємодію оптичного випромінювання з системою періодично розташованих квадратного перерізу золотих та срібних нанодротів на діелектричній підкладці. Резонанс плазмонів для ґраток із золота та срібла проявляється по різному, завдяки тому, що уявна частина показника заломлення срібла є суттєво менша ніж уявна частина показника заломлення золота в спектральних областях прояву резонансу. Для золота спостерігається резонанс у широкій спектральній області, в той же час резонанс для срібла розщеплюється на декілька вузьких піків. Цей ефект можна пояснити тим, що розсіяне світло на нанодротах інтерферує з плоскою хвилею, яка падає на ґратку. Із збільшенням періоду ґратки зі срібла коефіцієнт поглинання зменшується, амплітуди додаткових піків зменшуються, а сумарна ширина всіх піків також зменшується.



## **РОЗДІЛ 5. ЛОКАЛІЗОВАНІ ПОВЕРХНЕВІ ПЛАЗМОНИ В МЕТАЛЕВИХ НАНОЧАСТИНКАХ**

### **5.1. Оптичні властивості матеріалів наночастинок**

Головною особливістю наночастинок металів є наявність так званого локалізованого поверхневого плазмонного резонансу, тобто різкого збільшення інтенсивності поглинання і розсіювання для певної довжини хвилі падаючого світла, що потрапляє в резонанс з власною частотою коливань електронного газу в частинці. Параметри плазмонного резонансу – величина, положення в спектрі і півширина смуги – залежать від матеріалу частинки, її форми, розміру, структури, складу та стану навколишнього середовища. При цьому інтенсивність як поглинання, так і розсіювання в максимумі смуги надзвичайно велика, так що смуги плазмонного резонансу можуть бути дуже ефективними давачами в дослідженнях наночастинок і їхнього оточуючого середовища.

Незважаючи на те, що оптичні властивості металів обговорюються в багатьох посібниках і наукових статтях, в більшості випадків це експериментальні дані. А для того, щоб спрогнозувати властивості таких наноструктур і знайти їх оптимальні параметри для виявлення того чи іншого ефекту, необхідно провести комп'ютерне моделювання, яке в свою чергу вимагає аналітичного представлення оптичних характеристик металів. Тому в даній частині роботи на основі експериментальних робіт представляємо аналітичні залежності діелектричної проникності срібла, золота, міді та алюмінію від довжини хвилі.

#### **5.1.1. Аналітичне представлення спектральної залежності діелектричної проникності срібла, золота, міді та алюмінію.**

Спектральна область проявлення резонансу локалізованих поверхневих плазмонів в наночастинках залежить від металу, розміру та діелектричного оточення наночастинок, причому спектральний зсув резонансу для кожного металу не є кардинальним при зміні розміру та діелектричного оточення

наночастинок [165]. Експериментально показано, що резонанс локалізованих поверхневих плазмонів в наночастинках алюмінію спостерігається в ультрафіолетовій області [423], в наночастинках срібла резонанс плазмонів можна виявити приблизно на довжині хвилі 0.42 мкм, а в наночастинках золота резонанс плазмонів спостерігається на довжині хвилі 0.52 мкм, в наночастинках міді резонанс плазмонів зміщений в довгохвильову область, проявляється приблизно на довжині хвилі 0.65 мкм [28, 165].

На теперішній час відомі цілий ряд експериментальних залежностей діелектричних проникностей металів від довжини хвилі, які відображені в роботах [424–432]. Теоретичні Brendel-Borman model and Lorentz-Drude model Rakic et al. опубліковані в 1998 р. [433]. Ці моделі узагальнили експериментальні результати різних авторів, які отримані до 1998 року і були зібрані в книзі [434]. Очевидно, що ці моделі не співпадали з даними експериментів, які отримані в 2015...2017 роках.

Експериментальні спектральні залежності діелектричної проникності, які виміряні різними авторами в різні періоди часу, наприклад для срібла [424, 433], достатньо сильно відрізняються. Це можна пояснити тим, що використовувались вихідні метали різної чистоти, різні технології виготовлення зразків та різні методи вимірювань, які були доступні на час проведення досліджень від 60-тих років минулого століття [433] до 2017 року [432]. На основі даних [333] підібрано математичні вирази для дійсної та уявної частин діелектричної проникності срібла в діапазоні довжин хвиль від 0.4 до 2 мкм [113] і ці вирази використовуються в багатьох дослідженнях. Але ці дані виміряні з низькою точністю, що відзначено в роботі [113], а нижня межа підбраного аналітичного виразу 0.4 мкм є недостатньою для вивчення резонансних явищ в наночастинках срібла та в наногратках зі сріблом.

Всі дані вимірювань та теоретичних моделей можна знайти на сайті <https://refractiveindex.info>. Вивчення даних сайту для золота, срібла, міді та алюмінію та відповідних публікацій з точки зору виготовлення зразків та вимірювань показав, що, на наш погляд [435], найбільш достовірні дані

спектральних залежностей діелектричних проникностей для перших трьох металів наведені в роботах [424, 425], які опубліковані в 2015 році, і роботах [424, 427] для алюмінію. Дослідження, що описані в роботі [425], проводились з доволі чистими металами: Ag – 99.99%, Cu – 99.99%, Au – 99.999%, Al – 99.999%. Результати експериментів цих двох груп науковців [424, 425] практично співпадають у широкому спектральному діапазоні від 0.3 до 1.7 мкм. З цієї точки зору результати цих робіт були основою математичних виразів, які описують діелектричні проникності Ag, Au у спектральному діапазоні 0.29..2.0 мкм. Для міді на основі праць [424, 425] аналітичні вирази справедливі в діапазоні довжин хвиль 0.4..4.2 мкм. Аналітичні вирази для алюмінію знайдені за експериментальними даними робіт [424, 427] і є дійсними в діапазоні довжин хвиль 0.1..2 мкм.

Спершу проаналізовано експериментальні дані діелектричної проникності срібла [424–431] та теоретичні моделі [432]. Ці дані відображені на рис. 5.1. З рис. 5.1 можна зробити висновок, що експериментальні дані робіт [424, 425] дуже близькі між собою, і відсутні суттєві стрибки експериментальних даних при зміні довжини хвилі. Слід також відзначити, що експериментальні точки роботи [333], яка опублікована в 1972р., досить близькі до даних робіт [424, 425], проте спостерігаються стрибки проникності срібла від довжини хвилі, особливо уявної частини діелектричної проникності. На основі даних [424, 425] знайдені аналітичні залежності, для яких відповідні криві (на рис. 5.1 неперервні криві червоного кольору) найкраще лягають на експериментальні дані у спектральному діапазоні 0.29...2.066 мкм. Проте одною відносно нескладною функцією неможливо відобразити спектральну залежність діелектричної проникності срібла у заданому діапазоні довжин хвиль. Для дійсної частини проникності весь діапазон розділено на три інтервали: [0.29, 0.335], [0.335, 0.521], [0.521, 2.066] мкм; відповідно для кожного інтервалу вибрана своя функція:

$$\begin{aligned}
 r_1(\lambda) &= 1.3 - 2950(\lambda - 0.307)^2, \\
 r_2(\lambda) &= 16.3 - 50\lambda - 5\lambda^2, \\
 r_3(\lambda) &= 4.093 - 56\lambda^2.
 \end{aligned}
 \tag{5.1}$$

Для того щоб певні функції відображали діелектричну проникність лише на відповідному інтервалі, можна використати функцію Хевісайда, яка має наступний вигляд:

$$H(x) = \begin{cases} 1, & \text{if } x > 0, \\ \text{undefined}, & \text{if } x = 0. \\ 0, & \text{if } x < 0. \end{cases}
 \tag{5.2}$$

На основі функції Хевісайда можна сконструювати імпульсну функцію з амплітудою 1 та шириною, яка відповідає певному інтервалу  $\Pi(\lambda) = r_1(\lambda)[H(\lambda - 0.29) - H(\lambda - 0.335)]$ . Тоді реальну частину діелектричної проникності срібла в інтервалі  $[0.29, 2.066]$  можна записати так:

$$\begin{aligned}
 \Re(\varepsilon) &= r_1(\lambda)[H(\lambda - 0.29) - H(\lambda - 0.335)] + r_2(\lambda)[H(\lambda - 0.335) - H(\lambda - 0.521)] + \\
 &+ r_3(\lambda)[H(\lambda - 0.521) - H(\lambda - 0.2066)].
 \end{aligned}
 \tag{5.3}$$

Уявну частину діелектричної проникності срібла в діапазоні 0.29...2.066 мкм можна описати лише однією аналітичною функцією:

$$\Im(\varepsilon) = 0.03 + 0.36\lambda + 0.72\lambda^3 + 3\exp[-100(\lambda - 0.299)].
 \tag{5.4}$$

Бачимо, що експериментальні дані робіт [424, 425] дуже близькі між собою, особливо для реальної частини діелектричної проникності, а неперервна червона крива у відповідності до (5.3) лежить між експериментальними точками цих робіт. У вставці рис. 5.1а наведено спектральну залежність дійсної частини діелектричної проникності срібла в діапазоні довжин хвиль 0.29...0.5 мкм у відповідності до даних праць [424, 425] та формули (5.3). Слід також зауважити, що експериментальні точки для уявної частини діелектричної проникності праць

[424, 425] мають більші розбіжності в порівнянні з експериментальними точками дійсної частини проникності. Аналогічна картина спостерігається для міді та золота.

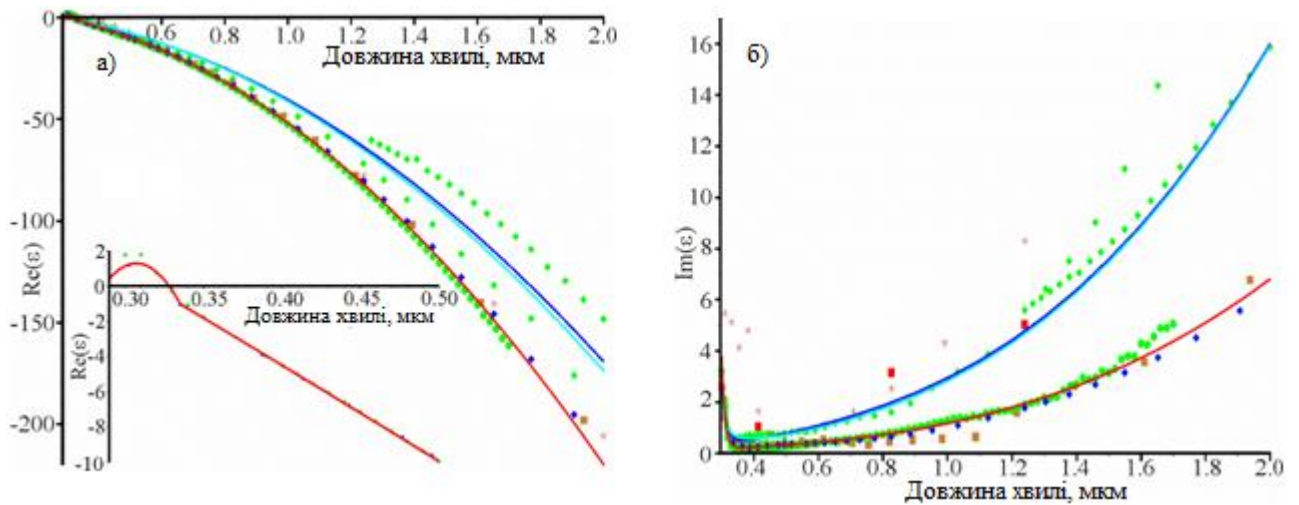


Рис. 5.1 Спектральні залежності дійсної (а) та уявної частин (б) діелектричної проникності срібла: зелені кола – дані роботи [424], сині ромби – дані роботи [425], зелені ромби – дані роботи [433], коричневі квадрати – дані роботи [333], червоні квадрати – дані роботи [427], коричневі зірки – дані роботи [429], сині криві – модель Бренден-Бормана [432], голубі криві – модель Друде-Лоренца [432], червоні криві – у відповідності до отриманих аналітичних виразів (5.3) і (5.4).

Для дійсної та уявної частин діелектричної проникності золота побудовані відповідні криві на основі праць [424 – 429, 430, 432, 433], проте на рис. 5.2 наведені лише експериментальні точки на основі праць [424, 425], а також неперервна крива на основі аналітичних виразів (5.7) і (5.8). Дійсну частину спектральної залежності діелектричної проникності золота на всьому діапазоні можна відобразити з допомогою чотирьох функцій у вигляді поліномів:

$$\begin{aligned}
 r_1(\lambda) &= -0.485 - 400(\lambda - 0.34)^2, \\
 r_2(\lambda) &= -1.0955 - 5(\lambda - 0.42) - 4.9(\lambda - 0.42)^2, \\
 r_3(\lambda) &= -1.3461 - 1300(\lambda - 0.47)^2, \\
 r_4(\lambda) &= -2.5161 - 67(\lambda - 0.5) - 35(\lambda - 0.5)^2 - \\
 &\quad - 4.9(\lambda - 0.5)^4 + 0.7(\lambda - 0.5)^6.
 \end{aligned}
 \tag{5.5}$$

Як наслідок, реальну частину діелектричної проникності золота можна записати з використанням функції Хевісайда таким чином:

$$\Re(\varepsilon) = r_1(\lambda)[H(\lambda - 0.29) - H(\lambda - 0.37)] + r_2(\lambda)[H(\lambda - 0.37) - H(\lambda - 0.47)] + r_3(\lambda)[H(\lambda - 0.47) - H(\lambda - 0.5)] + r_4(\lambda)[H(\lambda - 0.5) - H(\lambda - 0.2066)] \quad (5.6)$$

Для опису уявної частини золота достатньо використати дві таких функції:

$$\begin{aligned} g_1(\lambda) &= 5.99 - 1.2(\lambda - 0.36) + 170(\lambda - 0.36)^2 - 23000(\lambda - 0.36)^4, \\ g_2(\lambda) &= 0.27 + 1.4(\lambda - 0.46) + 0.5(\lambda - 0.46)^2 + 1.6(\lambda - 0.46)^3 + 5 \exp(-16(\lambda - 0.46)). \end{aligned} \quad (5.7)$$

Тоді спектральну залежність уявної частини діелектричної проникності золота можна записати так:

$$\Im(\varepsilon) = g_1(\lambda)[H(\lambda - 0.29) - H(\lambda - 0.46)] + g_2(\lambda)[H(\lambda - 0.46) - H(\lambda - 0.2066)]. \quad (5.8)$$

Спектральні залежності діелектричної проникності золота відображені на рис. 5.2. Можна побачити, що розбіжності між експериментальними даними робіт [428] і [429] для золота є більшими ніж для срібла. У вставці рис. 5.2а наведено спектральну залежність дійсної частини діелектричної проникності золота в діапазоні довжин хвиль 0.29...0.6 мкм у відповідності до даних праць [424, 425] та формули (5.6).

Останнім часом зростає зацікавленість до наночастинок міді, для яких резонанс локалізованих поверхневих плазмонів зсунутий в червону область спектру. Для дійсної та уявної частин діелектричної проникності міді побудовані відповідні криві на основі праць [333, 424 – 427, 429, 432], проте на рис. 5.3 наведені лише експериментальні точки на основі праць [424, 425], а також неперервна крива на основі аналітичних виразів (5.10) і (5.12). Для дійсної частини діелектричної проникності міді весь діапазон розбитий на три інтервали, а для уявної частини — на чотири інтервали:

$$\begin{aligned}
 r_1(\lambda) &= -0.7 - 25(\lambda - 0.3) + 1.3/1 + 100(1/0.55 - 1/\lambda)^2, \\
 r_2(\lambda) &= -6.024 - 80(\lambda - 0.56) - 15(\lambda - 0.56)^2 - 19(\lambda - 0.56)^3, \\
 r_3(\lambda) &= -135.65 - 176(\lambda - 1.65) - 50(\lambda - 1.65)^2.
 \end{aligned}
 \tag{5.9}$$

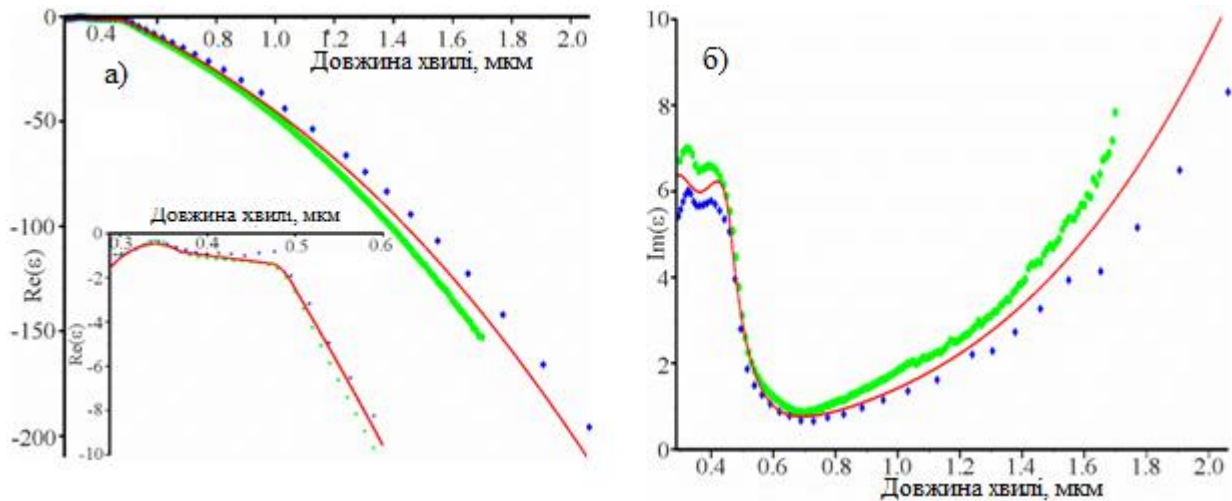


Рис. 5.2. Спектральні залежності дійсної (а) та уявної частин (б) діелектричної проникності золота: зелені кружки – дані роботи [424], сині ромби – дані роботи [425], червоні криві відповідають отриманим аналітичним виразам (5.6) і (5.8).

Таким чином реальну частину спектральної залежності діелектричної проникності міді можна записати так:

$$\begin{aligned}
 \Re(\varepsilon) &= r_1(\lambda)[H(\lambda - 0.3) - H(\lambda - 0.56)] + r_2(\lambda)[H(\lambda - 0.56) - H(\lambda - 1.65)] + \\
 &+ r_3(\lambda)[H(\lambda - 1.65) - H(\lambda - 4.2)].
 \end{aligned}
 \tag{5.10}$$

Для опису уявної частини міді потрібно використати такі чотири функції:

$$\begin{aligned}
 g_1(\lambda) &= 4.7 + 3.5(\lambda - 0.3), \\
 g_2(\lambda) &= 3 - \frac{2.99 \tanh[30(\lambda - 0.56)]}{1 + 50(\lambda - 0.56)^2}, \\
 g_3(\lambda) &= 0.59 + 0.74(\lambda - 0.62) + 2.9(\lambda - 0.62)^2 + 0.6(\lambda - 0.62)^4, \\
 g_4(\lambda) &= 3.2182 + 4.9(\lambda - 1.41) + 7.6(\lambda - 1.41)^2 + 0.05(\lambda - 1.41)^4 + 0.009(\lambda - 1.41)^6
 \end{aligned}
 \tag{5.11}$$

Тоді уявну частину діелектричної проникності міді можна записати таким чином:

$$\Im(\varepsilon) = g_1(\lambda)[H(\lambda - 0.3) - H(\lambda - 0.5)] + g_2(\lambda)[H(\lambda - 0.5) - H(\lambda - 0.62)] + g_3(\lambda)[H(\lambda - 0.62) - H(\lambda - 1.41)] + g_4(\lambda)[H(\lambda - 1.41) - H(\lambda - 4.2)] \quad (5.12)$$

Спектральні залежності діелектричної проникності міді відображені на рис. 5.3. У вставці рис. 5.3а наведено спектральну залежність дійсної частини діелектричної проникності міді в діапазоні довжин хвиль 0.3...0.85 мкм у відповідності до даних праць [424, 425] та формули (5.3а).

Як слідує з цього рисунку, експериментальні точки досить точно лягають на неперервну криву, причому для точної передачі спектральних залежностей довелось використати складніші функції, а не лише поліноми.

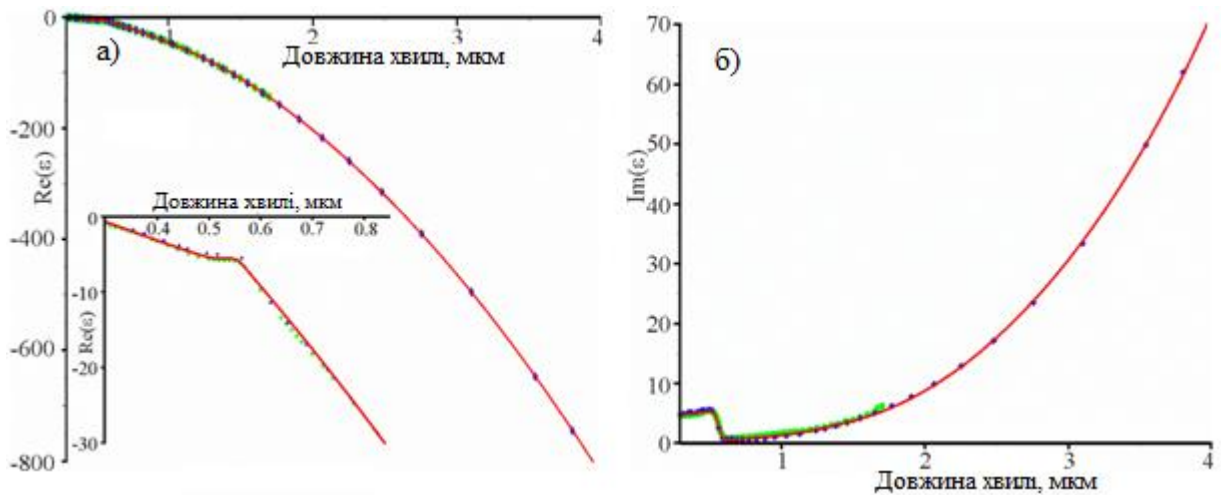


Рис. 5.3. Спектральні залежності дійсної (а) та уявної частин (б) діелектричної проникності міді: зелені кружки – дані роботи [424], сині ромби – дані роботи [425], червоні криві відповідають отриманим аналітичним виразам (5.10) і (5.12).

Резонанс локалізованих поверхневих плазмонів в наночастинках алюмінію виникає в ультрафіолетовій області спектру [423]. Спектральна залежність уявної частини діелектричної проникності Al має яскраво виражений локальний максимум на довжині хвилі 0.805 мкм [424, 426, 427, 432], що створює певні



труднощі для пошуку аналітичних залежностей. Однак, для дійсної та уявної частин діелектричної проникності алюмінію побудовані відповідні криві на основі цих праць, хоча на рис. 5.4 наведені лише експериментальні точки на основі праць [424, 427], а також неперервна крива на основі аналітичних виразів (5.14) і (5.16).

Дійсну частину спектральної залежності діелектричної проникності алюмінію в діапазоні 0,1..2 мкм можна описати з допомогою двох таких функцій:

$$\begin{aligned} r_1(\lambda) &= 0.1 - 40(\lambda - 0.09537) - 90(\lambda - 0.09537)^2, \\ r_2(\lambda) &= -39.963 - 140(\lambda - 0.7) - 95(\lambda - 0.7)^2 - \frac{250(1/\lambda - 1/0.805)}{1 + 50(1/\lambda - 1/0.805)^2}. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Тоді дійсну частину діелектричної проникності алюмінію можна записати так:

$$\Re(\varepsilon) = r_1(\lambda)[H(\lambda - 0.09537) - H(\lambda - 0.7)] + r_2(\lambda)[H(\lambda - 0.7) - H(\lambda - 2)]. \quad (5.14)$$

Уявну частину спектральної залежності діелектричної проникності алюмінію в діапазоні 0,1..2 мкм можна описати такими двома функціями:

$$\begin{aligned} g_1(\lambda) &= 0.0771 + 3(\lambda - 0.09537) + 12(\lambda - 0.09537)^2 + \\ &\quad + 140(\lambda - 0.09537)^4 + 10(\lambda - 0.09537)^6, \\ g_2(\lambda) &= 12.122 + 8.1(\lambda - 0.7869) + 28(\lambda - 0.7869)^2 + \\ &\quad + \frac{31}{1 + 90(1/\lambda - 1/0.805)^2}. \end{aligned} \quad (5.15)$$

Отже, уявну частину діелектричної проникності алюмінію в залежності від довжини хвилі можна записати так:

$$\Im(\varepsilon) = g_1(\lambda)[H(\lambda - 0.09537) - H(\lambda - 0.7869)] + g_2(\lambda)[H(\lambda - 0.7869) - H(\lambda - 2.0)]. \quad (5.16)$$

На рис. 5.4 наведені спектральні залежності діелектричної проникності алюмінію в діапазоні  $0,1 \dots 2$  мкм. У вставці рис. 5.4а наведено спектральну залежність дійсної частини діелектричної проникності алюмінію в діапазоні довжин хвиль  $0,3 \dots 0,9$  мкм у відповідності до даних праць [424, 427] та формули (5.14).

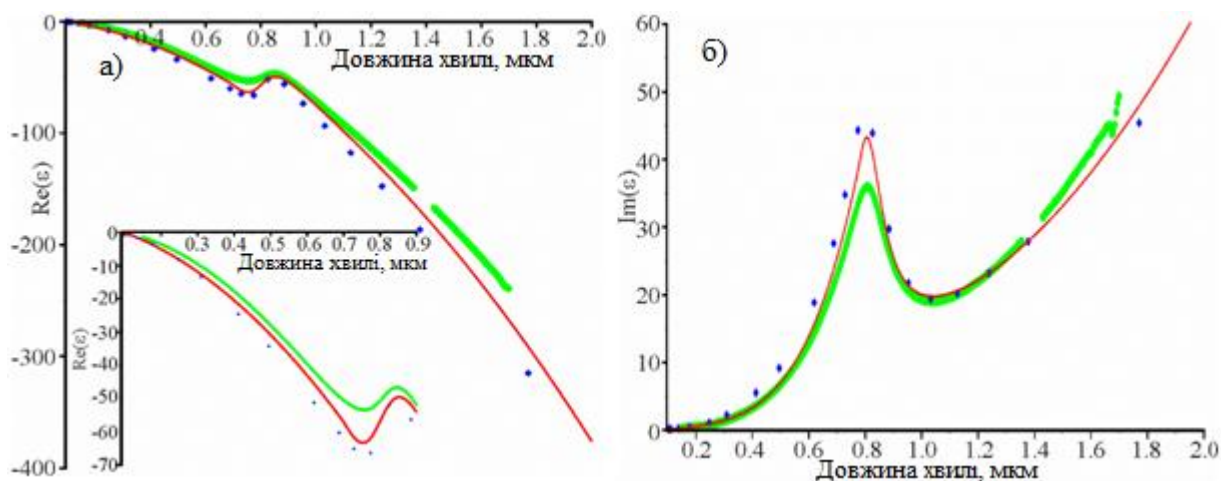


Рис. 5.4. Спектральні залежності дійсної (а) та уявної частин (б) діелектричної проникності алюмінію: зелені кружки – дані роботи [424], сині ромби – дані роботи [427], червоні криві відповідають отриманим аналітичним виразам (5.14) і (5.16).

На основі експериментальних вимірювань діелектричної проникності в діапазоні  $0,3 \dots 2$  мкм для срібла та золота,  $0,3 \dots 4,2$  мкм для міді і  $0,1 \dots 2$  мкм для алюмінію знайдені відповідні аналітичні вирази. Причому весь спектральний діапазон (за виключенням уявної частини діелектричної проникності срібла) необхідно розбити на декілька інтервалів. Для кожного інтервалу довжин хвиль підбирались відповідна функція, переважно у вигляді поліномів. Відбір функції на кожному інтервалі здійснювався функцією Хевісайда. Слід також зауважити, що аналітична функція в усьому спектральному діапазоні є неперервною. Таке аналітичне представлення дуже зручно використовувати при різноманітних розрахунках у широкому спектральному діапазоні взаємодії електромагнітного випромінювання з наночастинками відповідних металів, чи з періодичними структурами, у складі яких є ці метали. Проте потрібно зробити застереження

щодо використання цих аналітичних виразів. Оскільки функція Хевісайда не визначена при нулі згідно означення, то на межі двох інтервалів діелектрична проникність також буде не визначена. Тут можна довизначити функцію Хевісайда таким чином, що  $H(0)=1/2$ , або уникати при розрахунках значення довжини хвилі, яка відповідає межі між двома сусідніми інтервалами.

### 5.1.2. Діелектрична проникність металевих наночастинок

Для більшості практичних важливих випадків при розгляді ефектів, які обумовлені збудженням ППР, адекватною є плазмонна модель або модель вільних електронів. Відповідно цій моделі, метал є газом вільних невзаємодіючих електронів, які рухаються відносно позитивно зарядженої кристалічної ґратки. Електрони знаходяться у термодинамічній рівновазі з навколишнім середовищем. Для випадку суцільних середовищ, який нас цікавить, просторовою дисперсією нехтують, що означає, що відгук речовини на зовнішні поля є просторово локальним і не залежить від полів у сусідніх точках. Таким чином, для аналізу досліджуваних нами процесів є достатнім використання класичної теорії дисперсії, яка ґрунтується на вимушених гармонічних коливаннях, в якій діелектрична проникність не залежить від хвильового вектора. Порушення припущення про локальність електромагнітних ефектів у металах для розглянутих випадків проявляється тільки у випадку поздовжніх об'ємних плазмонів, які представляють для нас тільки оглядовий інтерес.

Описання властивостей наночастинок металів зручно проводити з використанням динамічної діелектричної проникності, оскільки вона визначає особливості поглинання світла в ділянці частот, близьких до плазмової частоти. Фізичною причиною сильної залежності діелектричної проникності від частоти  $\omega$  є зміни в фазі індукованих струмів в металі відносно фази падаючого світла в ділянці частот, які близькі до  $\omega_{pl}$ . У випадку монохроматичного зовнішнього поля, зміщення електронів призводить до виникнення дипольного моменту

макроскопічної поляризації, що може бути охарактеризована в рамках теорії Друде-Зоммерфельда, яка відповідає діелектричній проникності:

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2 + i\omega\gamma}, \quad (5.17)$$

де  $\gamma = 1/\tau$  - частота зіткнення електронів, яка по порядку величини складає біля 100 ТГц при кімнатній температурі ( $\tau$ - час релаксації вільного електронного газу порядку  $10^{-14}$ с, довжина пробігу порядку 10 нм).

В цілому для благородних металів (Au, Ag) відповідні плазмові частоти (параметри в моделі Друде) лежать в області 8-10 еВ, і процеси взаємодії з електромагнітним полем адекватно описуються розглянутою вище моделлю.

Діелектричні константи благородних металів можуть бути описані виразами, представленими в попередньому пункті, якщо ми працюємо з плівковими чи ґратковими структурами. В разі використання наночастинок срібла діелектрична постійна металу повинна бути змінена, щоб врахувати зменшення довжини вільного пробігу електронів в наночастинках, що в свою чергу створить розширення спектрів поглинання за рахунок поверхневого плазмонного резонансу [282]. Комплексна діелектрична проникність металеві наночастинок визначається наступним співвідношенням:

$$\varepsilon_m = \varepsilon_{1particle}(\lambda, R) + i\varepsilon_{2particle}(\lambda, R), \quad (5.18)$$

Кореляцію комплексної діелектричної постійної в залежності від частоти і радіусу наночастинок можна записати згідно роботи [435] наступним чином:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1particle}(\lambda, R) &= \varepsilon_{1bulk}(\lambda), \\ \varepsilon_{2particle}(\lambda, R) &= \varepsilon_{2bulk}(\lambda) + \eta \frac{\omega_p \lambda^3 V_f}{(2\pi c)^3 R}, \end{aligned} \quad (5.19)$$

де  $\omega_p$  - плазмова частота,  $V_f$  - швидкість Фермі провідності електронів,  $c$  - швидкість світла,  $\eta$  - коефіцієнт (між 0.6 і 1), який пов'язаний зі швидкістю

розсіювання вільних електронів іншими електронами, поверхнею частинки, фононами, дефектами і т.д.

## **5.2. Спектральні характеристики окремих металевих наночастинок в умовах плазмонного резонансу**

Спектральне налаштування ППР наночастинок і співвідношення між їх ефективностями поглинання і розсіювання виконується за рахунок зміни розміру, форми, матеріалу і структури частинок. До недавнього часу в основному використовувалися колоїдні золоті наночастинок сферичної форми. Бурхливий розвиток технологій синтезу наночастинок за останні 10-15 років надав дослідникам широкий арсенал можливостей, починаючи від добре відомих тепер золотих нанодротів та нанооболонки і закінчуючи екзотичними структурами типу «нанорису», «нанозірок», «наноаміст» або «нанокліток». Малий розмір наночастинок по відношенню до довжини хвилі видимого світла дозволяє в багатьох випадках обмежитися дипольним наближенням, розробленим в класичних роботах Релея і узагальнене потім Мі для випадку колоїдних сферичних частинок золота і Гансом для металевих паличок [272].

### **5.2.1. Локалізований поверхневий плазмонний резонанс сферичних металевих наночастинок**

Оптичний відгук наночастинок залежить від декількох факторів, таких як показник заломлення, діелектрична проникність середовища (приймаючої матриці, покриття), розмірів та геометрії включень, і агрегатного стану металевих наночастинок. Будь-які зміни цих фізичних властивостей змінять положення максимуму поглинання чи розсіювання наночастинок, інтенсивність, або форму оптичного відгуку.

На рис. 5.5 наведено спектри перерізів поглинання та розсіювання наночастинок срібла з радіусом 25 нм, що знаходяться в середовищі з показником заломлення 1,45. Наночастинок з меншим радіусом поглинають світло більше ніж розсіюють, а більшого розміру – навпаки.

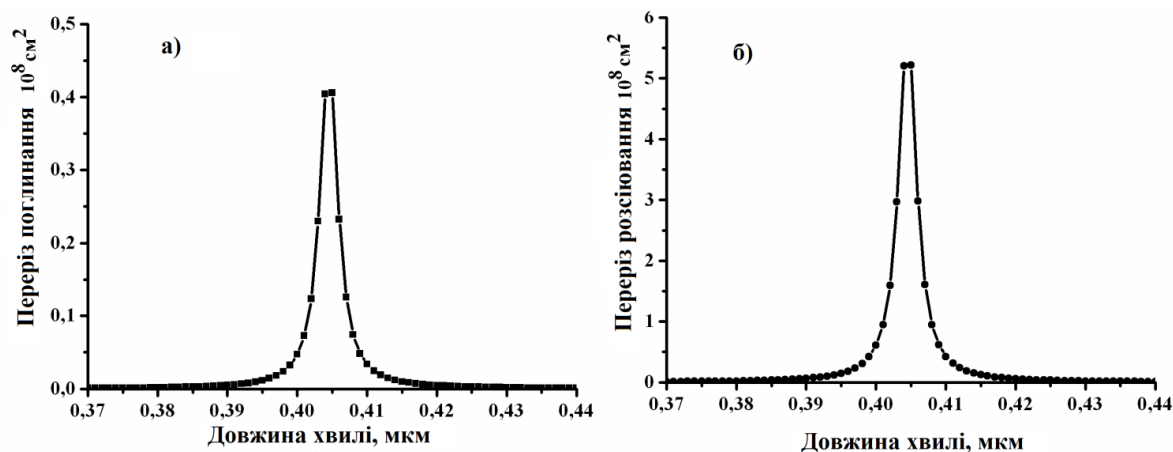


Рис. 5.5. Спектри перерізів поглинання (а) та розсіяння (б) срібної наночастинки з радіусом 25 нм, що знаходиться в середовищі з показником заломлення 1,45

Для вивчення чутливості піку плазмонного резонансу срібних наночастинок до зміни показника заломлення навколишнього середовища для розрахунків в роботі використано п'ять типів наночастинок, а саме у формі сфери, деформованих сфероїдів у горизонтальному та вертикальному напрямках, голки та диску [436]. Комплексний показник заломлення срібних наночастинок з врахуванням радіусу розраховано згідно формули (5.18). Значення показників заломлення навколишнього середовища використано в діапазоні від 1,00 до 1,42.

На рис. 5.6 наведені залежності резонансних значень поглинання та розсіяння для срібних наночастинок від їх радіусу.

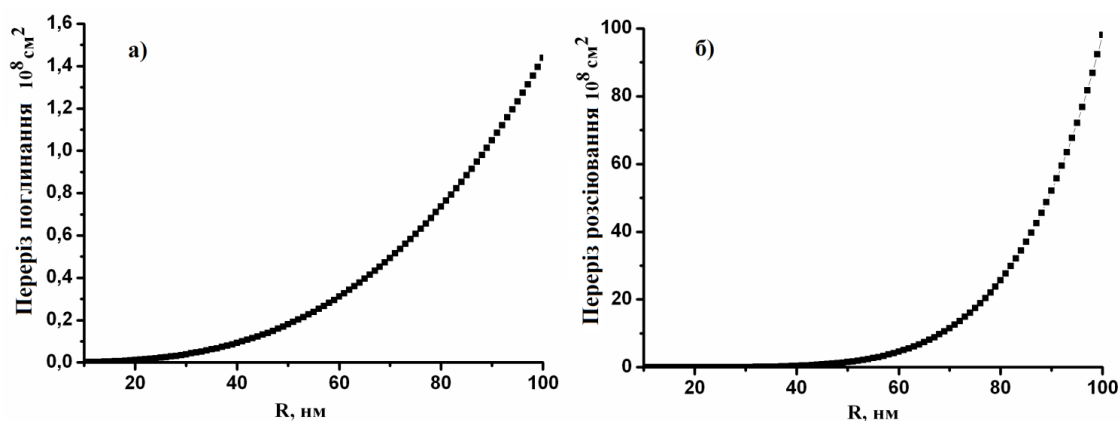


Рис. 5.6. Залежність резонансних значень перерізу поглинання (а) та розсіяння (б) для срібних наночастинок від їх радіусу

Наступним кроком дослідження був розрахунок перерізу поглинання сферичних наночастинок з радіусом 15 нм при різних значеннях показника заломлення оточуючого середовища, як показано на рис. 5.7.

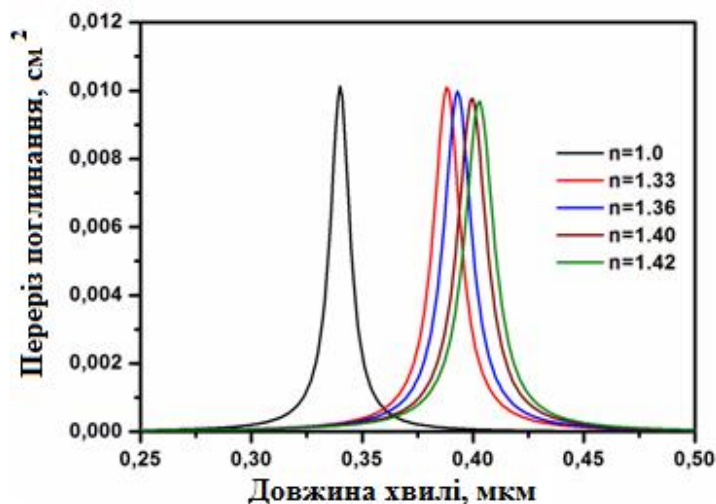


Рис. 5.7. Залежність перерізу поглинання від довжини хвилі для сферичної наночастинки при різних показниках заломлення оточуючого середовища

Пік плазмонного резонансу зсувається в інфрачервону область спектра з 0,341 мкм до 0,385 мкм зі зростанням показника заломлення навколишнього середовища з 1,00 до 1,42.

### 5.2.2. Локалізований поверхневий плазмонний резонанс металевих наночастинок різної симетрії

Реальні наночастинок є часто несферичної форми, в результаті чого отримується розширений спектр поглинання і зсув піку плазмонного резонансу. У зв'язку з цим досліджено оптичний відгук наночастинок різної морфології в залежності від довжини хвилі.

Змодельовано залежність перерізу поглинання та розсіювання від довжини хвилі та розмірів півосей для сфероїдів, деформованих в горизонтальному та вертикальному напрямках. Визначено довжину хвилі випромінювання, що відповідає довжині ЛППР. Досліджено залежність перерізів поглинання та розсіювання сфероїдних НЧ від зміни наступних параметрів: розміру півосей,

діелектричної проникності оточуючого середовища [436]. На рис. 5.8 та 5.9 представлено результати моделювання для деформованого по горизонталі та вертикалі сфероїдів відповідно.

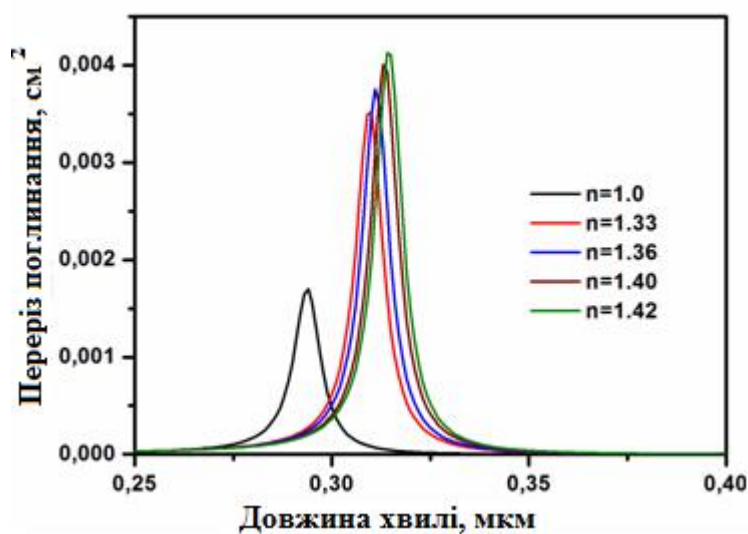


Рис. 5.8. Залежність перерізу поглинання від довжини хвилі деформованої по горизонталі сфероїдної наночастинки при різних показниках заломлення оточуючого середовища

Обчислення проведено для деформованих по горизонталі та вертикалі сфероїдів з різним співвідношенням осей, як приклад на рис. 5.8 показано залежність піку поглинання для сфероїда з осями 10 і 20 нм відповідно; на рис. 5.9 представлено результати моделювання сфероїда з осями 20 та 10 нм відповідно.

Деформована по горизонталі наночастинка має додатковий пік (див. рис. 5.8). Цей другий пік відповідає квадрупольному резонансу, який має інші осциляції електрона ніж первинний дипольний резонанс. Довжина хвилі, ширина піку і ефект додаткових (вторинних) резонансів впливають на спектральні властивості плазмонних наночастинок із заданими розміром та формою.

Пік ЛППР зсувається в інфрачервону область спектра на 46 нм при зміні показника заломлення навколишнього середовища від 1,00 до 1,42. Цей



результат показує вищу чутливість деформованих наночастинок у порівнянні зі сферичними (44 нм).

Пік ЛППР наночастинок, деформованих по вертикалі, зсувається в інфрачервону область на 20 нм для такого ж діапазону показників заломлення оточуючого середовища.

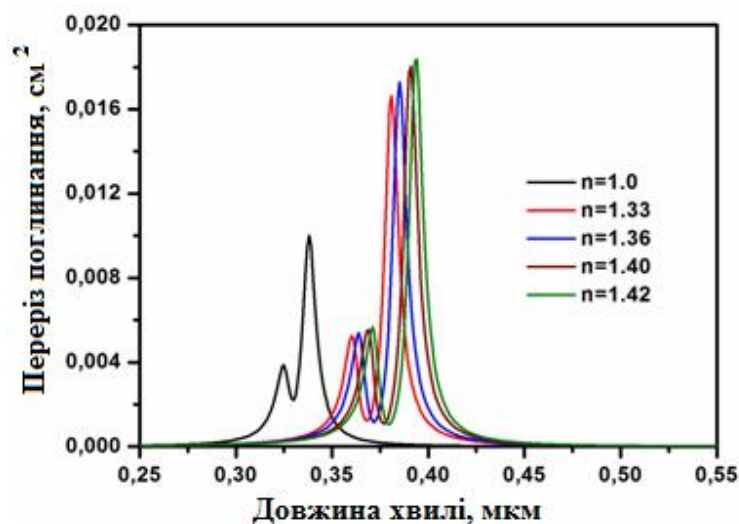


Рис. 5.9. Залежність перерізу поглинання від довжини хвилі сферічної наночастинок, деформованої по вертикалі при різних показниках заломлення оточуючого середовища

Наступним кроком досліджень є моделювання перерізу поглинання наночастинок у формі голки (див. рис. 5.10) і диску (див. рис. 5.11).

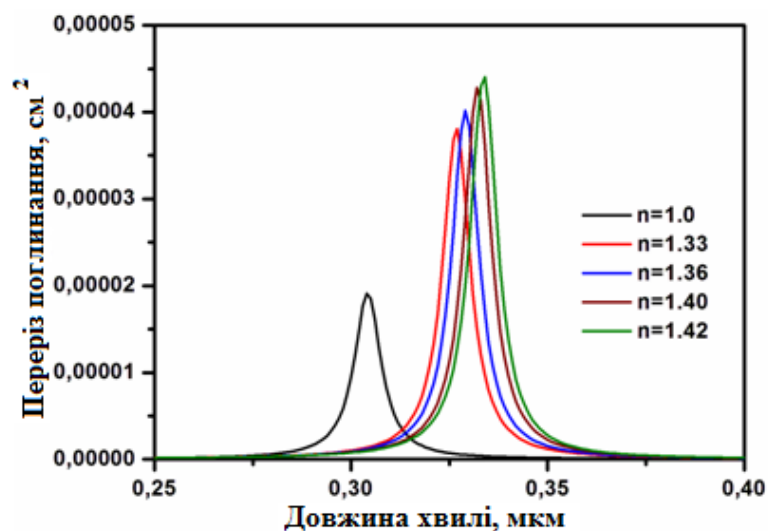


Рис. 5.10. Залежність перерізу поглинання від довжини хвилі наночастинок у формі голки при різних показниках заломлення оточуючого середовища

Для розрахунків спектральних характеристик голки використано наступні параметри: радіус 1 нм, висота 15 нм; для диску – радіус 15 нм і висота 2 нм.

Пік ЛППР голки зсувається в інфрачервоний діапазон довжин хвиль на 33 нм. Положення піку ЛППР диску зсувається також в інфрачервоний діапазон, однак лише на 8 нм при зміні показника заломлення оточуючого середовища від 1,00 до 1,42

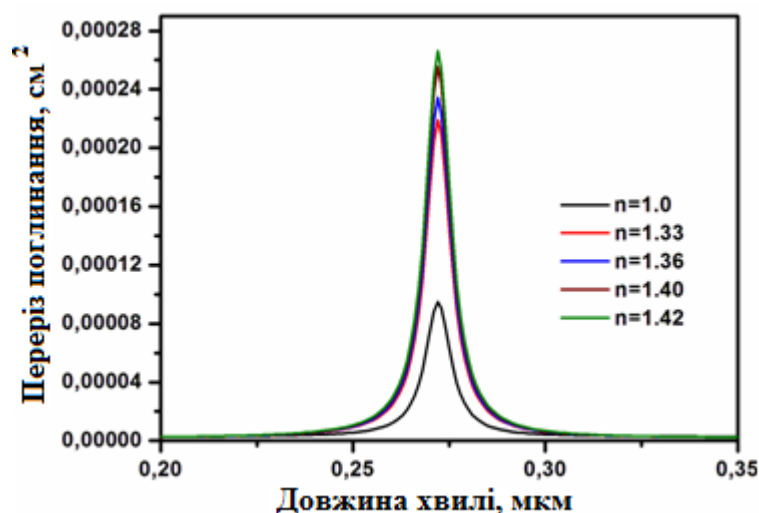


Рис. 5.11. Залежність перерізу поглинання від довжини хвилі наночастинки у формі диска при різних показниках заломлення оточуючого середовища

Вплив зміни діелектричної проникності на значення перерізу поглинання та перерізу розсіяння є суттєвим. Зі збільшення показника заломлення оточуючого середовища перерізи поглинання і розсіяння збільшуються.

Встановлено, що для наночастинки сферичної форми зі збільшенням радіусу спектр випромінювання переміщується в область більших довжин хвиль. При різних значеннях довжини хвилі, які відповідають довжинам ЛППР для сферичних наночастинок радіусом 5 нм, 15 нм, 30 нм, значення перерізу поглинання зменшується зі збільшенням радіусу наночастинки, натомість значення перерізу розсіяння стає більшим і для великих радіусів перевищує поглинання.

Для наночастинок сфероїдної форми спостерігалася подібна залежність, однак спектр поглинання (розсіяння) містить додатковий пік. Крім того,

співвідношення осей впливає на положення піку ЛППР, а також на величини перерізів поглинання та розсіяння. Зі збільшенням розміру повздожньої осі пік плазмонного резонансу зміщується в довгохвильову область для сферіодної наночастинки, деформованої по вертикалі, та при збільшенні поперечної осі для наночастинки, деформованої по горизонталі. Варто зазначити, що сферіодні наночастинки, деформовані по вертикалі є більш чутливими до зміни показника заломлення оточуючого середовища.

Отже, результати моделювання показують, що сферіодні наночастинки забезпечують кращу чутливість в порівнянні з іншими наночастинками. Електричне поле є підсиленням на вершинах наночастинки і в результаті збільшення співвідношення осей частинки призводить до збільшення чутливості ЛППР сферіодних наночастинок до показника заломлення оточуючого середовища.

### **5.3. Резонансне поглинання та розсіювання електромагнітного випромінювання багат шаровими наночастинками**

Як зазначалося вище, збудження ЛППР наночастинок благородних металів може створити сильне локальне оптичне поле, що призводить до різних ефектів оптичного підсилення, таких як комбінаційне розсіяння, підсилення оптичної нелінійності та підсилення люмінесценції [165]. Завдяки цьому, такі наноструктури можуть представляти інтерес у широкому спектрі застосування як техніці, так і в біомедицині. Резонансна частота локалізованих поверхневих плазмонів конкретного металевого колоїдного зразка залежить від розмірів частинок, форми та діелектричних властивостей, агрегованої морфології, модифікації поверхні та показника заломлення навколишнього середовища. Наприклад, резонансний плазмонний пік сферичних колоїдів золота розміром 13 нм знаходиться на довжині хвилі близько 520 нм, а сферичних наночастинок срібла розміром 5-6 нм близько 400 нм. Піки поверхневого плазмонного резонансу зсуваються в довгохвильову область спектру залежно від форми частинок, морфології та показника заломлення навколишнього середовища [46].

Пік ЛППР благородних металів знаходиться в межах видимого діапазону електромагнітного спектра, а якщо застосовувати для прикладу їх в медицині, то пропускання електромагнітного випромінювання через біологічну тканину в цій області є дуже низьким. Тому необхідно створювати матеріали, які б мали пік плазмонного резонансу в ближній інфрачервоній області довжин хвиль 700-1100 нм. Оскільки, в цьому діапазоні пропускання електромагнітних хвиль через живі тканини є найбільш оптимальним за рахунок низького поглинання випромінювання у ближній інфрачервоній області біологічними пігментами та водою. Ця проблема вирішується шляхом створення наноструктур типу нанооболонки. Це композитні наночастинки, які складаються з діелектричного чи напівпровідникового ядра, покритого металом товщиною від кількох до декількох десятків нанометрів, як правило, золото або срібло. Металеві нанооболонки показали колосальні можливості для керування положення піку резонансу поверхневих плазмонів. Положення піку ЛППР цих наночастинок може змінюватися від видимої до інфрачервоної областей спектру за рахунок зміни розмірів ядра та оболонки.

### **5.3.1. Залежність спектральних характеристик наночастинок типу діелектричне ядро-металева оболонка від розмірів ядра та оболонки**

На даному етапі роботи досліджено вплив розмірів НЧ та відношення розмірів ядро-оболонки на положення піку ЛППР на прикладі наночастинок, яка складається з ядра з діоксиду титану та оболонки зі срібла [437–439].

Розрахунки оптичного поглинання та розсіювання наночастинок срібла та нанооболонок «діоксид титану-срібло» (див. рис. 5.12) були виконані за допомогою теорії розсіювання Мі [282].

Припустимо, що наночастинки знаходяться в непоглинаючому середовищі з діелектричною проникністю  $\epsilon_m$ , що відповідає біологічній тканині. Діелектрична проникність діоксиду титану  $\epsilon_1$  була використана  $2,59+i0,005$  для всього досліджуваного діапазону [440].

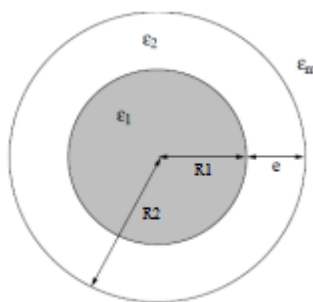


Рис. 5.12. Структурна схема нанооболонки

Для досліджень в якості матеріалу ядра наночастинки вибрано діоксид титану, так як композитні матеріали на його основі демонструють екстраординарні властивості [441]. Завдяки особливим фотокаталітичним, оптичним та фізико-хімічним властивостям діоксид титану інтенсивно використовується в різних галузях науки та виробництва. Це напівпровідниковий матеріал, що характеризується нерозчинністю у кислотах та високою хімічною стійкістю, біологічною інертністю, низькою токсичністю і відносно низькою вартістю.  $\text{TiO}_2$  широко використовується для фотокаталітичних, екологічних та енергетичних застосувань у вигляді нанопорошків, суспензій чи нанорідин [441]. В якості матеріалу оболонки вибрано срібло, оскільки поверхневий плазмовий резонанс колоїду срібла відбувається при енергії відмінній від будь-яких об'ємних міжзонних переходів. Крім того срібло характеризується сильнішим і гострішим плазмонним резонансом, ніж для прикладу, золото. Також плазмонний резонанс наночастинки срібла з'являється на коротшій довжині хвилі, ніж золотої наночастинки. Ця функція потенційно може забезпечити більш широкий діапазон зсуву частоти плазмонного резонансу для срібла, ніж для золота. Значення діелектричної функції срібла використано з роботи [333]. Показник заломлення  $\text{TiO}_2$  рівний 2.611. Показник заломлення оточуючого середовища нанооболонки прийнято 1,50. Структура ядра оболонки  $\text{Ag-TiO}_2$  привернула увагу не тільки тому, що  $\text{TiO}_2$  є перспективним матеріалом для різних застосувань, включаючи фотоелектрохімічну активність, конверсію сонячної енергії та фотокаталіз, а також тому, що наночастинки на основі цих матеріалів

демонструють унікальні властивості у галузі хімічної та біологічної чутливості [439].

Наші чисельні експерименти показують, що для наночастинки срібла пік ЛППР знаходиться на довжині хвилі 400 нм, але за допомогою використання нанооболонок можна отримати зміщення спектру поглинання в інфрачервону область спектра [443]. На рис. 5.13 показано серію кривих, що зображують переміщення довжини хвилі максимуму плазмонного резонансу для нанооболонок з різним співвідношенням розмірів ядра-оболонки ( $R_2/R_1$ ).

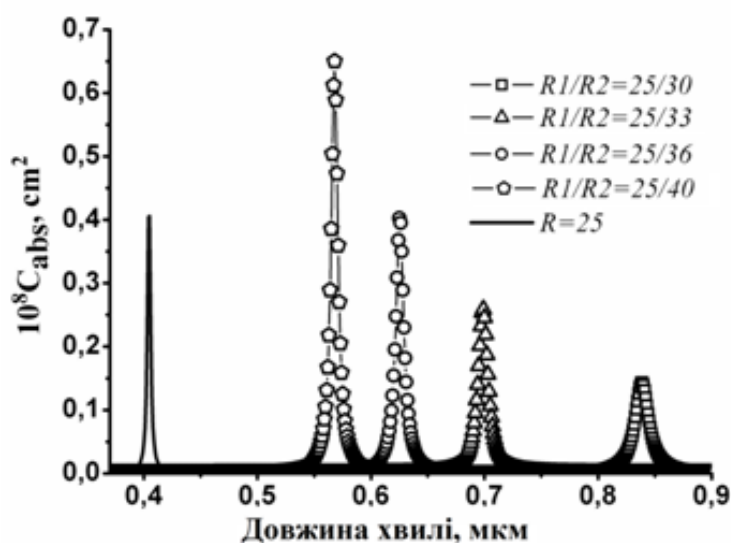


Рис. 5.13. Залежності перерізу поглинання від довжини хвилі для наночастинки і нанооболонок при сталому розмірі ядра та різних розмірах оболонки.

На рис. 5.14 та 5.15 ілюструються серії піків ЛППР, які зміщуються в область більших довжин хвиль, оскільки загальний радіус  $R_2$  наночастинки збільшується.

Рисунки 5.14 та 5.15 вказують на те, що поглинання та розсіювання зростають зі зростанням товщини ядра (діоксиду титану) та товщини зовнішньої оболонки срібла.

На рис. 5.16 показано зміщення резонансних плазмонних кривих зі збільшенням співвідношення радіусів ядра-оболонки при постійному загальному радіусі наночастинки. Варто зазначити, що висота піків визначається величиною використаного кроку при моделюванні.

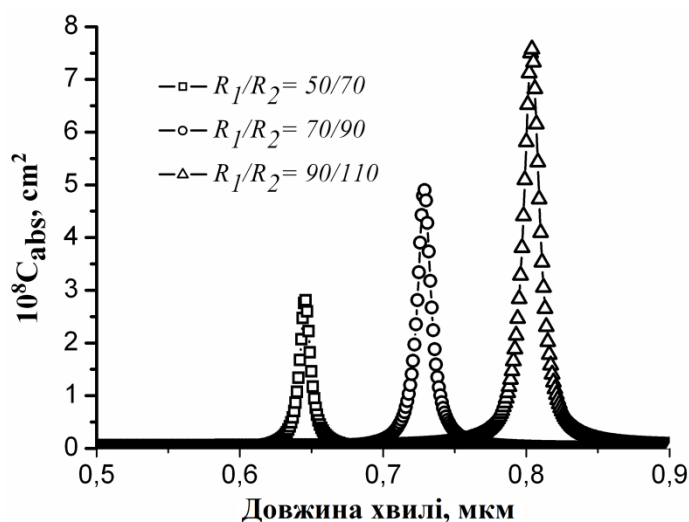


Рис. 5.14. Залежності перерізу поглинання від довжини хвилі для нанооболонки при різних співвідношеннях розмірів ядра до оболонки

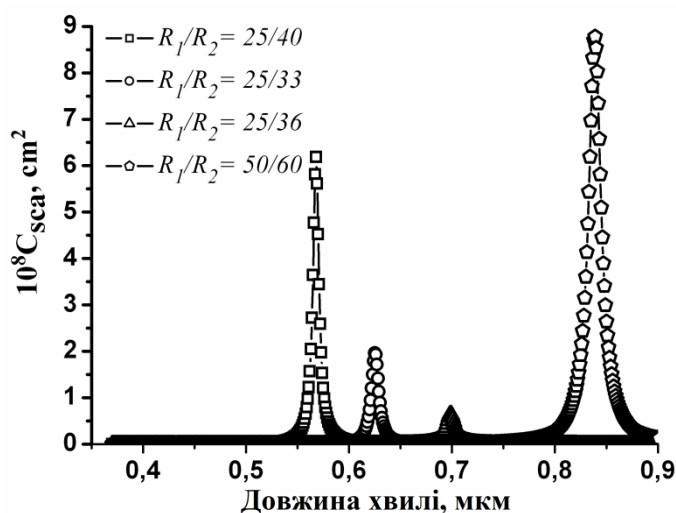


Рис. 5.15. Залежності перерізу розсіювання від довжини хвилі для нанооболонки при різному співвідношенні розмірів ядра до оболонки

Кілька досліджень *in vivo* продемонстрували ефективність нанооболонки для детектування та терапії в біомедицині [443]. Тут загальна концепція проста: нанооболонки з піками поглинання в близькій інфрачервоній області спектру (800 нм) накопичуються на ділянці хворої тканини через пасивні та/або активні механізми. Пік поглинання на довжині 800 нм знаходиться в області оптичного вікна в близькій інфрачервоній області спектру, де поглинання тканин мінімальне, що дозволяє оптимально проникнути електромагнітному

випромінюванню. Коли ділянка хворої тканини піддається електромагнітному опроміненню (яке нанооболонки сильно поглинають внаслідок ЛППР), поглинута енергія ефективно перетворюється на тепло, що приводить до термічного руйнування хворої тканини.

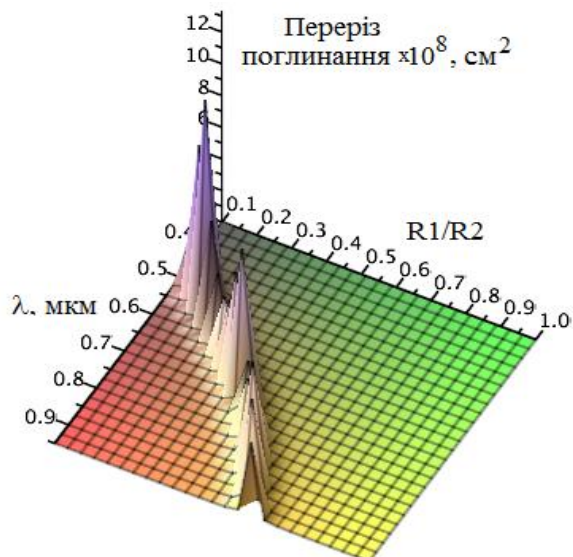


Рис. 5.16. Залежність перерізу поглинання від співвідношення ядро-оболонка та довжини хвилі за постійного радіусу  $R2 = 110$  нм

Резонансна характеристика досліджуваних нами нанооболонки на довжині хвилі 800 нм представлена на рис. 5.17.

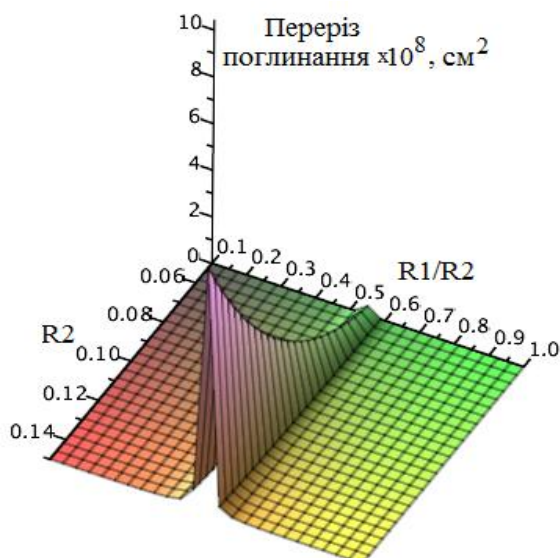


Рис. 5.17. Залежність перерізу поглинання нанооболонки від загального радіусу  $R2$  та співвідношення радіусів ядро-оболонки  $R1/R2$  за постійної довжини хвилі



З рис. 5.17 бачимо, що для наноболонок, де змінюється загальний радіус наночастинки, отримано максимальний переріз поглинання при певному співвідношенні розмірів ядра та оболонки і це співвідношення розмірів ядра-оболонки дозволяє вибрати оптимальне значення радіуса ядра.

Коли радіус оболонки збільшується, також збільшується величина поглинання при ЛППР. Це інтуїтивно є незрозумілим, оскільки ми очікуємо, що великі срібні наноболонки будуть більше розсіювати ніж поглинати. Це пояснюється постійним співвідношенням розмірів ядра-оболонки, що означає, що радіус ядра зменшується при збільшенні товщини оболонки. Аналогічні результати отримано для наноболонок де в якості ядра використано кремній [442].

Отже, встановлено, що використання наноболонок дозволяє зміщувати пік поглинання та розсіювання в інфрачервону спектральну область; крім того, розсіювання наноболонки на порядок вище, ніж наночастинки.

### **5.3.2. Чутливість двохшарових наночастинок до зміни показника заломлення навколишнього середовища**

Частота плазмонного резонансу дуже чутлива до зміни діелектричних властивостей середовища, що оточує наночастинку, а саме до будь-якої зміни показника заломлення локального середовища навколо наночастинок, включаючи розчинник або наявність адсорбентів. Коли збільшується показник заломлення (діелектрична проникність) середовища, відбувається лінійне червоне зміщення довжини хвилі в положенні максимуму поверхневого плазмона. Фіксуючи такий зсув, можна детектувати зміни в навколишньому середовищі наночастинки. Наприклад, адсорбція або зв'язування молекул з поверхнею наночастинок може спричинити зміну показника заломлення та зміну довжини хвилі піку плазмонного резонансу.

Зміни довжини хвилі піку поверхневого плазмонного резонансу наночастинки та наноболонки до змін у показнику заломлення навколишнього середовища представлені в таблиці 5.1.

Ця таблиця ясно показує монотонне збільшення зсуву довжини хвилі ЛППР з підвищенням показника заломлення оточуючого середовища.

Таблиця 5.1. Зсув піку ЛППР наночастинок ( $R=25$  нм) та наноболонки (співвідношення радіусів ядра-оболонки 90 нм/110 нм)

Показник заломлення оточуючого середовища	Зсув піку ЛППР для наночастинок (нм)	Зсув піку ЛППР для наноболонки (нм)
1.0	0	0
1.33	38	65
1.35	41	69
1.40	47	80
1.48	58	98
1.50	61	103
1.55	67	114
1.57	70	119

Наноболонки є більш чутливими до зміни показника заломлення оточуючого середовища, а отже така їх властивість може бути корисною не лише в біомедицині, а й у різноманітних сенсорних застосуваннях.

Отже, можна узагальнити, що збільшення товщини срібної оболонки призводить до зсуву піку поглинання в інфрачервону область спектра і забезпечує підвищення поглинання при ЛППР.

Ми встановили, що, змінюючи абсолютну товщину оболонки срібла на діелектричному чи напівпровідниковому ядрі, можна налаштувати пік поверхневого плазмового поглинання в інтервалі довжин хвиль від видимого до ближнього інфрачервоного спектрів. Положення довжини хвилі ЛППР

зсувається в довгохвильову область спектра в міру збільшення показника заломлення оточуючого середовища.

### **5.3.3. Моделювання оптичних характеристик багат шарових наночастинок типу $\text{SiO}_2$ - Au.**

Через низьку окислювальну здатність широкий інтерес викликали до себе наночастинок таких благородних металів як Au, Ag та Cu, що застосовуються у медицині як бактерицидні та протипухлинні препарати. Унікальні фізико-хімічні, біологічні, біохімічні, фармакологічні властивості, такі як інертність, стабільність, біосумісність, вплив на органи та низький рівень цитотоксичності обумовлюють значний інтерес до наночастинок Au [444]. Відомо, що золото нанорівня має високу спорідненість до (-SH) груп, що відкриває широкі можливості для поєднання наночастинок золота із різноманітними молекулами (в тому числі й макромолекулами) шляхом хімічної взаємодії з поверхнями наночастинок та можуть використовуватись для цільової доставки протипухлинних, протизапальних та протимікробних засобів, а також у якості контрастних агентів, ефективніших за стандартні препарати на основі йодпохідних сполук.

В даній частині роботи ми розглянемо двошарові наночастинок на основі золота та діоксиду кремнію. Наноструктуроване золото має властивості, які проявляються лише на рівні наночастинок. Такі властивості в основному пов'язані з великою кількістю поверхнево розташованих атомів. Це зумовлено великим співвідношенням площі поверхні до об'єму наночастинок. До цих властивостей відносять і поверхневий плазмонний резонанс, гігантське раманівське розсіювання, високу каталітичну та хімічну активність. Наночастинок золота здатні інтенсивно поглинати світло у видимій області спектру з максимумом поглинання 520–550 нм та відбивати світло з інтенсивністю, що на порядки перевищує інтенсивність випромінювання багатьох відомих барвників, які використовуються у діагностичних цілях, при цьому, на відміну від останніх, не спостерігається ефект знебарвлення. Водночас

наночастинки золота сильно поглинають хвилі з певною довжиною з подальшим перетворенням енергії світла у теплову. Довжина хвилі, при якій спостерігають поверхневий плазмонний резонанс, значно залежить від форми, розмірів та хімічної природи наночастинок [46, 47]. Показник заломлення використано з роботи [333]. Діоксид кремнію активно досліджують як носій для білкових молекул. Наночастинки  $\text{SiO}_2$  мають велику активну поверхню, хімічно і термічно стабільні, добре суспендуються у водних розчинах та відносно інертні в навколишньому середовищі. Також  $\text{SiO}_2$  наночастинки проявляють лікувальні властивості завдяки здатності зв'язувати патогенні речовини білкової природи та не сприяють розвитку мікроорганізмів, оптично прозорі, можуть виступати як ізолятор, захищаючи вміст капсули від навколишніх впливів. Наночастинки  $\text{SiO}_2$  активно застосовують у дослідженнях для доставки ліків, з метою візуалізації та діагностики. Наночастинки  $\text{SiO}_2$  впливають на життєздатність клітин, викликають окисний стрес, порушення клітинного циклу і апоптоз. Разом з тим, проявляють негативний вплив на дофамінергічні нейрони та мають певну нейротоксичність [445].

Для оцінки ефективності плазмонного резонансу та дослідження ефективності використання багат шарових металевих наночастинок в біомедицині розрахунок оптичних параметрів двошарових нанооболонки проведено за принципом дипольної еквівалентності [446–448]. Спершу розраховано перерізи поглинання (див. рис. 5.18а) та розсіяння (рис. 5.18б) випромінювання сферичної наночастинок Au з радіусом 20 нм.

Як видно з рис. 5.18 максимуми поглинання та розсіяння такою наночастиною знаходиться на довжині хвилі випромінювання  $\lambda = 0,44$  мкм. Це робить неможливим використання наночастинок Au в медицині, оскільки вікно прозорості біологічної тканини знаходиться в діапазоні 850 – 1100 нм.

Для зміщення робочого діапазону довжин хвиль у потрібну область розглянуто нанооболонку, де в якості ядра використано золото, а в якості нанооболонки - діоксид кремнію (див. рис. 5.19).

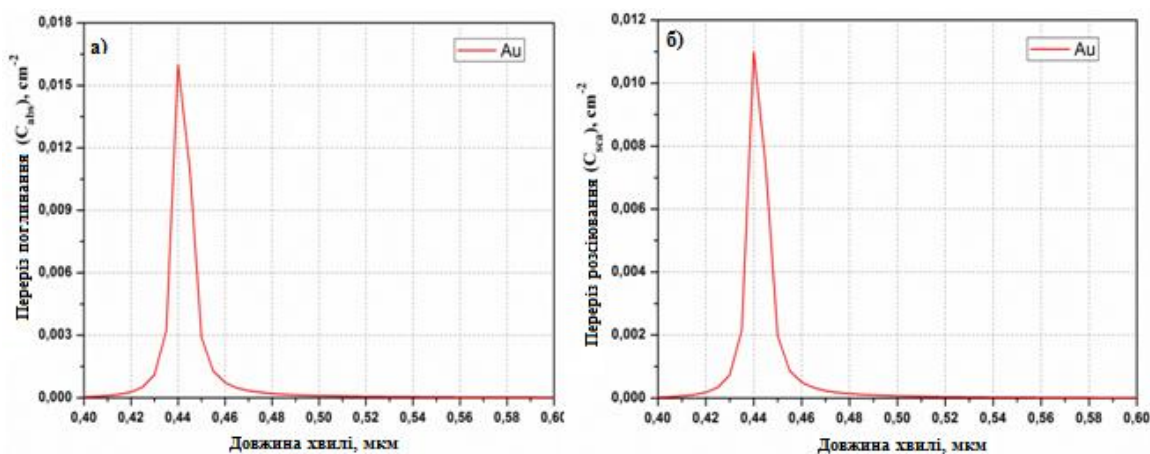


Рис. 5.18 Перерізи поглинання та розсіяння випромінювання сферичної наночастинки Au з радіусом 20 нм

З представлених на рис. 5.19 результатів видно, що у порівнянні з наночастинкою Au піки поглинання (рис. 5.19а) та розсіяння (рис. 5.19б) випромінювання наноболонкою Au-SiO<sub>2</sub> не тільки змістилися у більш довгохвильову область спектру, а й зросло їх максимальне значення.

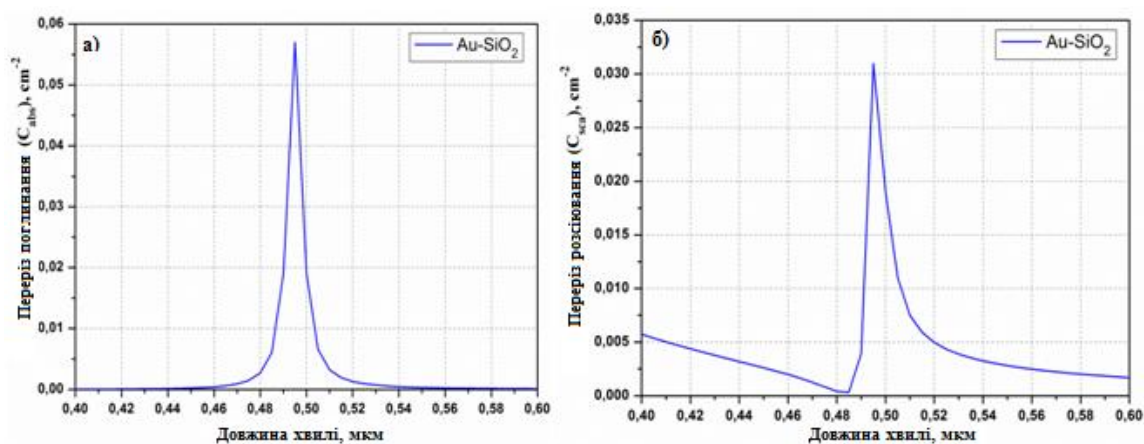


Рис. 5.19. Перерізи поглинання (а) та розсіяння (б) випромінювання наноболонки Au-SiO<sub>2</sub> з радіусами R1=20 нм; R2=70 нм

Отже, наші дослідження показали, що багатошарові наноболонки надзвичайно чутливі до зміни їх геометричних параметрів, а піки поглинання наночастинок з ядром TiO<sub>2</sub> є зміщеними в область більших довжин хвиль на відміну від наночастинок з ядром SiO<sub>2</sub> [437, 446]. Це викликає інтерес та

відкриває нові можливості для використання багатошарових нанооболонки в якості чутливих сенсорів як у медицині, так і в інших галузях науки та техніки.

#### 5.4. Висновки до п'ятого розділу

На основі експериментальних вимірювань діелектричної проникності в діапазоні 0.3...2 мкм для срібла та золота, 0.3...4.2 мкм для міді і 0.1...2 мкм для алюмінію знайдені відповідні аналітичні вирази. Причому, весь спектральний діапазон (за виключенням уявної частини діелектричної проникності срібла) необхідно розбити на декілька інтервалів. Для кожного інтервалу довжин хвиль підбирались відповідні функції, переважно у вигляді поліномів. Відбір функції на кожному інтервалі здійснювався функцією Хевісайда. Слід також зауважити, що аналітична функція на усьому спектральному діапазоні є неперервною. Таке аналітичне представлення дуже зручно використовувати при різноманітних розрахунках у широкому спектральному діапазоні взаємодії електромагнітного випромінювання з наночастинками відповідних металів, чи з періодичними структурами, у складі яких є ці метали.

Проведено дослідження спектральних характеристик окремих металевих наночастинок в умовах локалізованого поверхневого плазмонного резонансу. Встановлено, що сферічні наночастинки з повздожньою деформацією забезпечують кращу чутливість в порівнянні з іншими наночастинками. Електричне поле є підсиленням на вершинах наночастинки і в результаті збільшення співвідношення осей наночастинки призводить до збільшення чутливості локалізованого поверхневого плазмонного резонансу сферичних наночастинок з повздожньою деформацією до показника заломлення оточуючого середовища.

Встановлено, що збільшення товщини срібної оболонки призводить до зсуву піку поглинання в інфрачервону область спектра і забезпечує підвищення поглинання при плазмонному резонансі. Показано, що, змінюючи абсолютну

товщину оболонки срібла на діелектричному чи напівпровідниковому ядрі, можна налаштувати пік поверхневого плазмонного поглинання в інтервалі довжин хвиль від видимого до ближнього інфрачервоного спектрів. Положення довжини хвилі поверхневого плазмонного резонансу зсувається в довгохвильову область спектра в міру збільшення показника заломлення навколишнього середовища.

## РОЗДІЛ 6. ОСОБЛИВОСТІ ВЗАЄМОДІЇ ЕЛЕКТРОМАГНІТНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ З НАНОКОМПОЗИТНИМИ МАТЕРІАЛАМИ

### 6.1. Оптичні характеристики нанокompозитного матеріалу

Нанокompозит визначається як багатокompонентний твердий матеріал, в якому один з compoнентів в одному, двох або трьох вимірах має розміри, що не перевищують 100 нанометрів; також під нанокompозитами розуміють структури, що складаються з безлічі повторюваних compoнентів-шарів (фаз), відстань між якими вимірюється в десятках нанометрів [215]. Нанокompозити характеризуються гетерогенною структурою, утвореною практично невзаємодіючими фазами з середніми лінійними розмірами структурних елементів менше 100 нм. Такими елементами є матриця і нановключення (наночастинки).

Особливості поведінки металевих наночастинок в матриці та можливість контрольовано змінювати параметри нанокompозиту (матеріалів матриці та наночастинок) надають можливість створення композитних матеріалів з наперед заданими діелектричними та оптичними властивостями. Основними параметрами включень, що впливають на оптичні характеристики нанокompозитних плівок, є їх форма та розміри, розподіл у товщині плівки, взаємодія із матрицею, оточуючим середовищем та підкладкою, наявність та властивості оболонки.

Базовою ідеєю при побудові фізичних моделей оптичних властивостей нанокompозитів є метод ефективного середовища, що з успіхом застосовується при вивченні оптичних ефектів у нанокompозитах. Останнім часом методи ефективного середовища суттєво модернізуються. При цьому береться до уваги розподіл частинок за формою та розміром, вплив ефектів нелокальності та ін. З іншого боку, розробка технологій отримання нових нанокompозитів, таких як метал-напівпровідникова матриця та напівпровідник-полімерна матриця з неоднорідним контрольованим розподілом частинок, потребує розробки простих методів контролю параметрів таких нанокompозитних матеріалів.



### **6.1.1. Вплив параметрів матриці на оптичні характеристики нанокompозитного матеріалу.**

Як вже зазначалося вище, алмазоподібні вуглецеві плівки (АВП) є предметом пильної уваги через їх незвичайні властивості, такі як: низький коефіцієнт тертя і висока зносостійкість, висока корозійна стійкість і хімічна інертність, високий електричний опір, інфрачервона прозорість і високий показник заломлення [236]. Останні дослідження показують, що АВП які містять металеві нановключення, показують високий потенціал в різних практичних застосуваннях [449]. Такі типи матеріалів володіють підсиленими оптичними характеристиками в умовах поверхневого плазмонного резонансу, і є перспективними матеріали для розробки елементної бази лазерної фізики, пристроїв опто- і мікроелектроніки. Їх унікальні оптичні властивості базуються на тому, що у видимій області спектра присутні резонансні смуги плазмонного поглинання і їх характеристики залежать від фактора заповнення матриці металевими нановключеннями, від параметрів матриці, від розміру і форми нановключень та їх концентрації, а також від морфології композитного матеріалу [450].

Виконання періодичних структур на основі метало-діелектричних нанокompозитів дозволяє поєднання поверхневого плазмонного резонансу та резонансних явищ, що в них відбуваються; виготовлення пристроїв з бажаними оптичними та електричними характеристиками, які базуються на плазмонних властивостях, і виготовлення нанокompозитних матеріалів з добре визначеними параметрами. Тим не менше, алмазоподібні вуглецеві плівки з диспергованими в них наночастинками срібла різної форми та розміру досі не є систематично вивчені.

Тому завдання полягає у проведенні чисельних експериментів, які стосуються дослідження оптичних констант АВП з диспергованими в них НЧ срібла (нанокompозит) за допомогою ефективною теорії Максвелла-Гарнетта для застосування їх в якості сенсорних елементів.

Для вивчення впливу матриці, в розрахунках ми використовували показник заломлення алмазоподібної вуглецевої плівки, який представлений в роботі [451]. Експериментальні значення показника заломлення (див. рис. 6.1) були екстрапольовані поліномами п'ятого порядку [452].

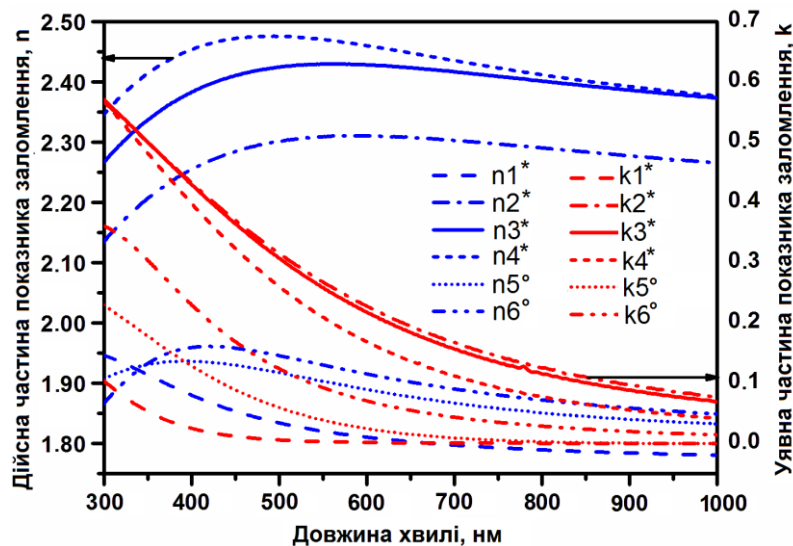


Рис. 6.1. Оптичні сталі алмазоподібної вуглецевої плівки в залежності від довжини хвилі

Показник заломлення срібла був розрахований за допомогою поліноміального наближення, використовуючи експериментальні дані з роботи [333]. Діелектричні сталі наночастинок для моделювання були отримані з рівнянь (5.18) та (5.19). Крім того, ми припустили, що всі наночастинки мають сферичну форму.

Відомо, що спектральні характеристики нанокompatитів залежать як від параметрів матриці, так і від властивостей наночастинок. Таким чином, буде розумно спершу досліджувати характеристики поверхневого плазмонного резонансу однієї ізольованої металеві наночастинки, диспергованої в діелектричну матрицю.

Моделювання проводили для срібної НЧ з радіусом 10 нм сферичної форми, яка розміщена в АВП. В результаті зменшення величини показника заломлення матриці (алмазоподібної вуглецевої плівки) отримано зсув піку перерізу

поглинання в область коротких довжин хвиль та збільшення інтенсивності піку поглинання, як показано на рис. 6.2.

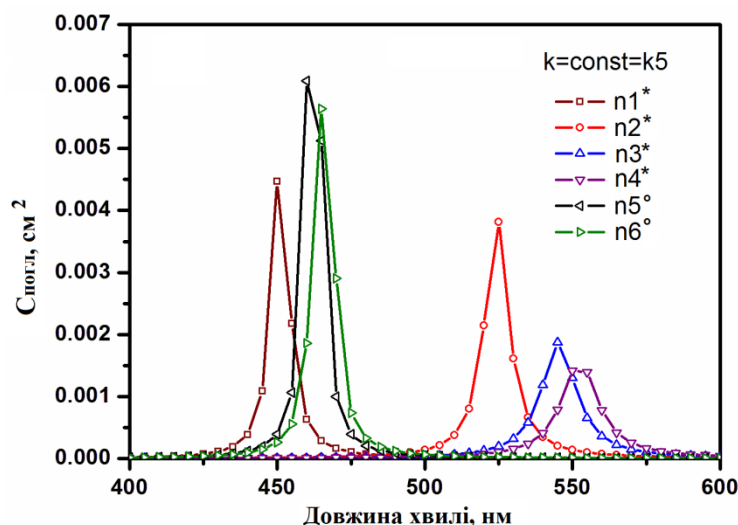


Рис. 6.2. Залежність перерізу поглинання срібної наночастинки від довжини хвилі при зміні дійсної частини показника заломлення алмазоподібної вуглецевої плівки

Цей результат відповідає квазістатичній моделі розсіювання частинок, яка діє, коли  $R \ll \lambda$ , де відбувається зменшення довжини хвилі локалізованого плазмонного резонансу, якщо показник заломлення навколишнього середовища зменшується.

Амплітуда піку поглинання зменшується у міру збільшення уявної частини показника заломлення матриці (див. рис. 6.3) у зв'язку зі зменшенням поляризованості наночастинок і зменшення взаємодії між ними.

Матеріали з меншим коефіцієнтом екстинкції будуть мати більш високе поглинання, проте, якщо поглинання матеріалу є занадто низьким, втрати в наночастинках будуть домінувати.

Ці результати показують, що поглинання є чутливим до дійсної  $n$  і уявної  $k$  частин показника заломлення матриці композитного матеріалу, тому при оцінюванні поглинання нанокompозиту необхідно враховувати спектральну залежність комплексного показника заломлення матриці.

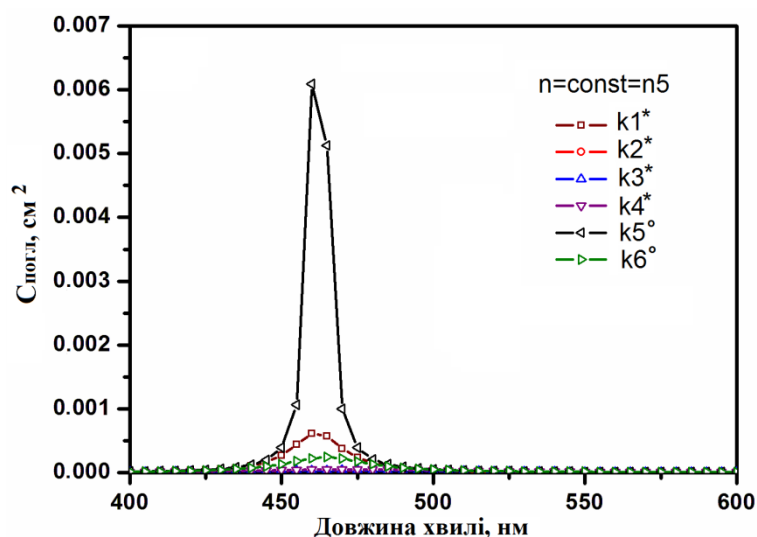


Рис. 6.3. Залежність перерізу поглинання срібної наночастинки від довжини хвилі при зміні уявної частини показника заломлення алмазоподібної вуглецевої плівки

Слід зазначити, що в початковій стадії росту алмазоподібної вуглецевої плівки значне ущільнення структури і зміна вмісту водню призводить до збільшення показника заломлення плівки з часом осадження. Таким чином, оптичні властивості алмазоподібної вуглецевої плівки можна змінювати шляхом модифікації їх структури.

### 6.1.2. Залежність діелектричних констант нанокompозиту від розміру та концентрації наночастинок

Щодо розміру наночастинок металу, то його збільшення призводить до зсуву в довгохвильову область спектру ефективного показника заломлення (див. рис. 6.4 та 6.5) за різних концентрацій нановключень. В результаті цього буде зсуватися пік плазмонного резонансу нанокompозитної плівки в довгохвильову область спектру.

Залежність перерізу поглинання наночастинок срібла, диспергованих в АВП, від радіусу наночастинок та довжини хвилі представлено на рис. 6.6. Як і очікувалося, пік плазмонного резонансу збільшується зі збільшенням розміру НЧ. Крім того, ширина спектру перерізу поглинання зростає.

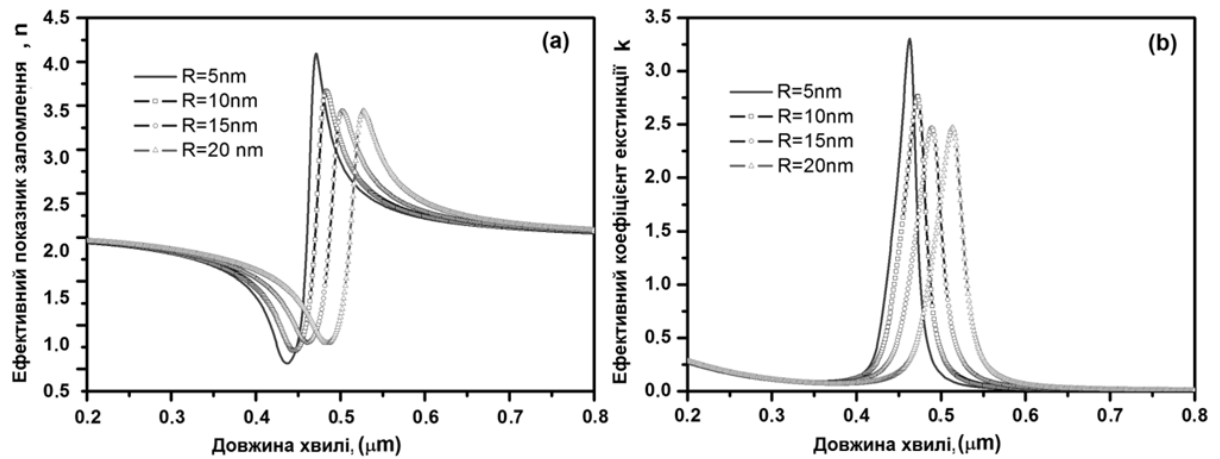


Рис. 6.4 Дійсна (а) та уявна (б) частини ефективного показника заломлення алмазоподібної вуглецевої плівки з диспергованими в неї наночастинками срібла різного радіусу при сталому факторі заповнення (6,7%) без врахування взаємодії між частинками.

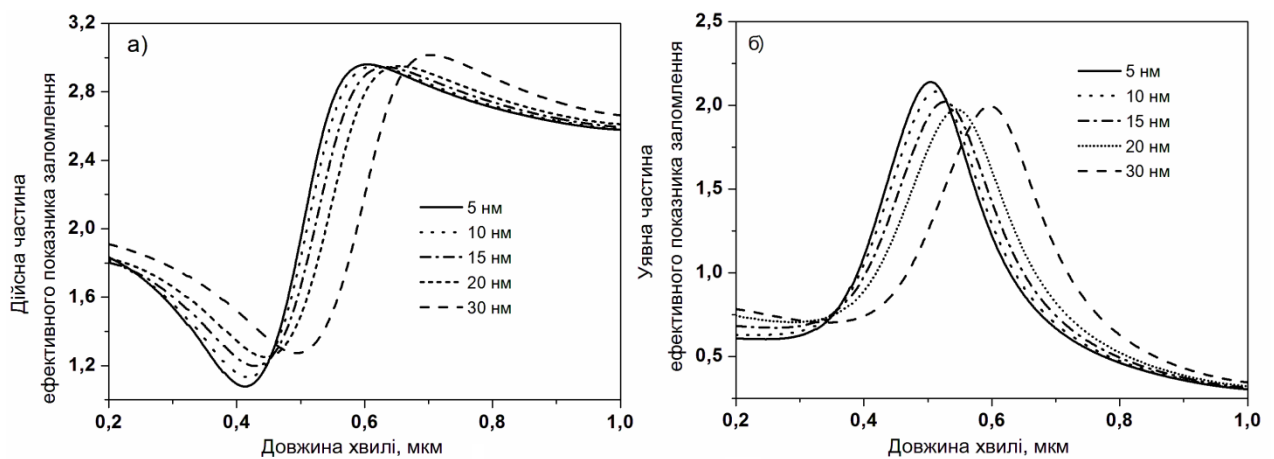


Рис. 6.5. Дійсна (а) та уявна (б) частини ефективного показника заломлення алмазоподібної вуглецевої плівки з диспергованими в неї наночастинками срібла різного радіусу при сталому факторі заповнення (22%) без врахування взаємодії між частинками

Наші результати [452–457] показують, що спектральне положення піку поглинання є більш чутливим до діелектричної проникності АВП, ніж до радіусу наночастинок, для досліджуваного діапазону радіусів. Цей аналіз був здійснений для НЧ з радіусом менше ніж 25 нм. Для більших наночастинок резонансні зміщення в довгохвильову область є набагато більшими.

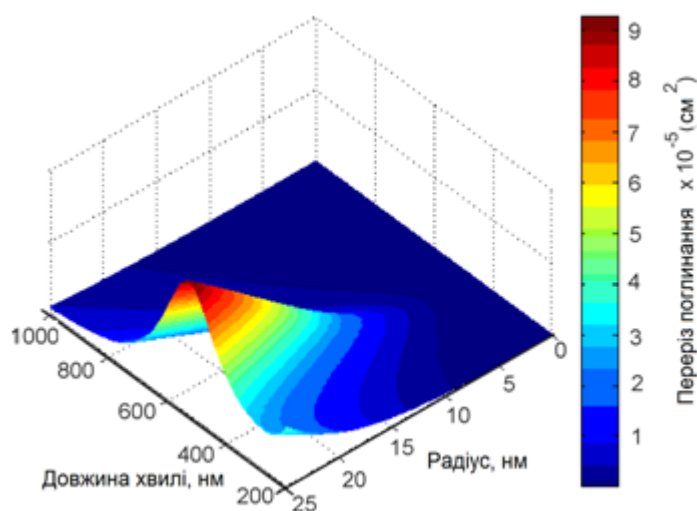


Рис. 6.6. Переріз поглинання срібної наночастинки, диспергованої в алмазоподібну плівку, в залежності від радіусу та довжини хвилі

В наступних наших дослідженнях впливу концентрації НЧ срібла на оптичні властивості нанокомпозитів ми використовували ефективну теорію Максвелла-Гарнетта [301]. Результати розрахунків залежності ефективної комплексної діелектричної проникності від фактора заповнення (концентрації) і довжини хвилі показано на рис. 6.7. [345].

Щоб перевірити модель, ці розрахунки були порівняні з експериментальними результатами (див. рис. 6.8). Експериментальні ефективні діелектричні константи були отримані з регресійного аналізу спектроскопічних даних еліпсометрії.

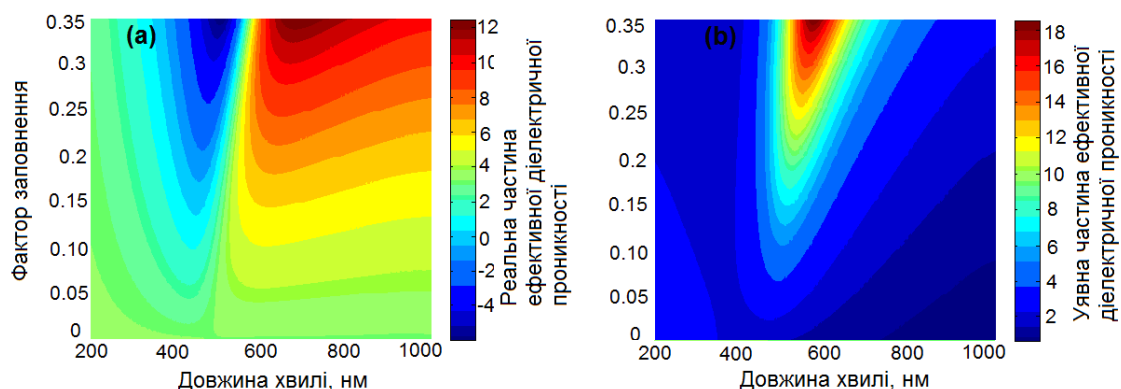


Рис. 6.7. Залежність ефективної комплексної діелектричної проникності (а – дійсна частина діелектричної проникності, б – уявна частина діелектричної проникності) від фактора заповнення і довжини хвилі

Експериментально були отримані оптичні константи АВП-Ag нанокompозиту з об'ємною концентрацією 20% в наночастинок срібла (що відповідає коефіцієнту заповнення  $F = 0,20$ ). Ефективну діелектричну сталу нанокompозитної плівки АВП-Ag розраховували з використанням рівняння (2.68). Ці залежності використовувались при наступному аналізі поглинання плівок АВП-Ag.

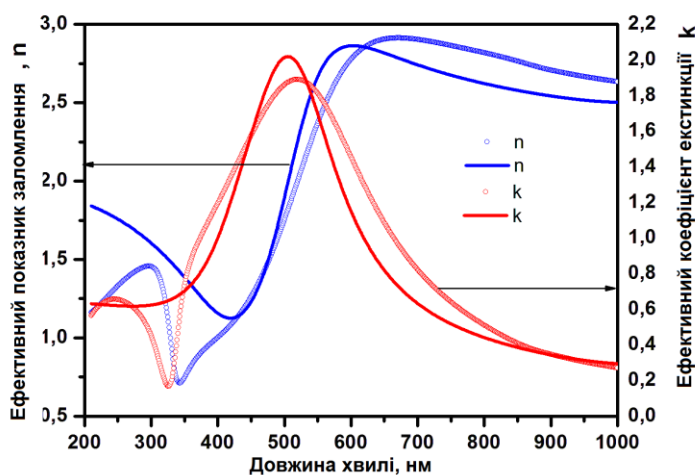


Рис. 6.8. Залежність ефективного показника заломлення нанокompозитного матеріалу від довжини хвилі (кільця- експериментальні результати, суцільна лінія – розраховані результати)

На рис.6.9а та 6.9б показані зображення СЕМ та відповідний розподіл розмірів НЧ срібла в аналізованій нанокompозитній плівці з концентрацією срібла 20 %.

Можна бачити (рис. 6.9а), що частинки металу добре дисперговані в матрицю АВП без накопичення на поверхні плівки. Форми наночастинок майже сферичні. Середній розмір (радіус) частинок, отриманий з рис. 6.9б, становив 8,5 і 30 нм, відповідно.

Використовуючи ефективні діелектричні константи нанокompозитного матеріалу (АВП з диспергованими в неї НЧ срібла) було розраховано спектри поглинання такого матеріалу в залежності від довжини хвилі для декількох

різних факторів заповнення матеріалу металевими нановключеннями. Результати розрахунку представлено на рис. 6.10.

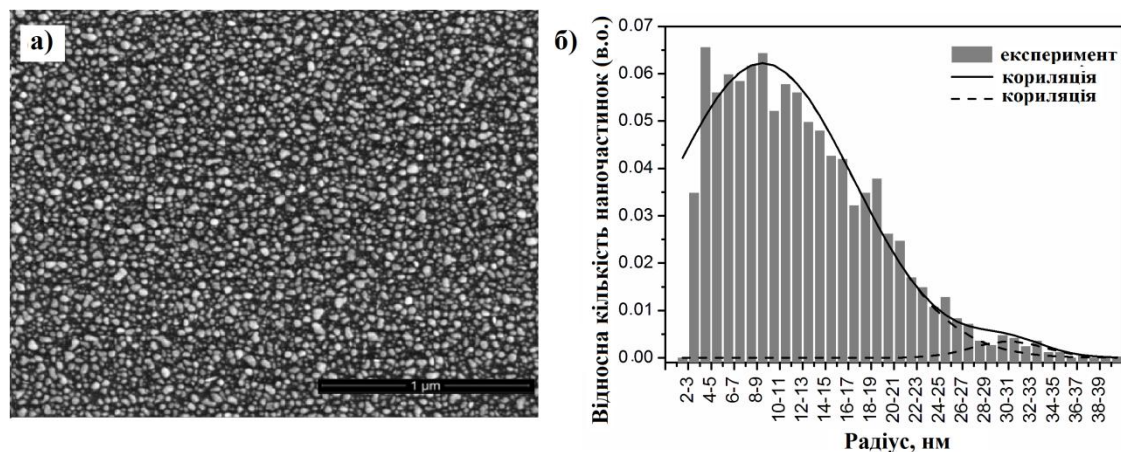


Рис. 6.9. СЕМ-мікрофотографія нанокompозиту АВП-Ag (а) та розподіл розмірів наночастинок Ag (б)

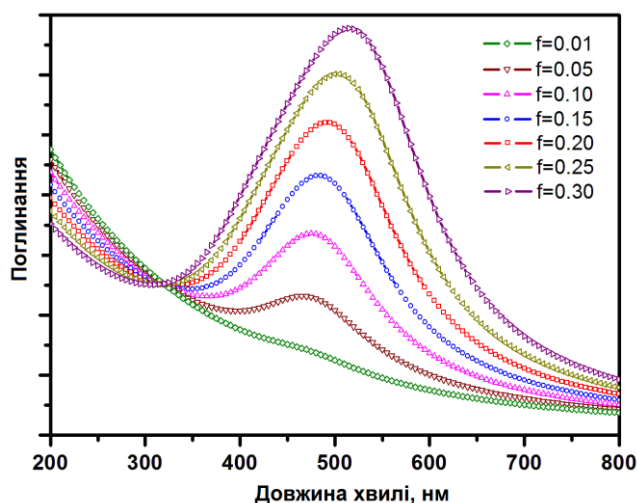


Рис. 6.10. Спектри поглинання алмазоподібної плівки з диспергованими в неї наночастинками срібла при різних їх факторах заповнення.

Піки поглинання, які відносяться до плазмонного резонансу зсуваються в область більших довжин хвиль зі збільшенням фактору заповнення срібла. Це може бути пояснене тим, що зростає електромагнітна взаємодія між частинками за рахунок зміни ефективної діелектричної проникності алмазоподібної вуглецевої плівки зі сріблом. Крім того, експериментально отриманий коефіцієнт поглинання таким нанокompозитом був порівняний з теоретично розрахованим і наведений на рис. 6.11.



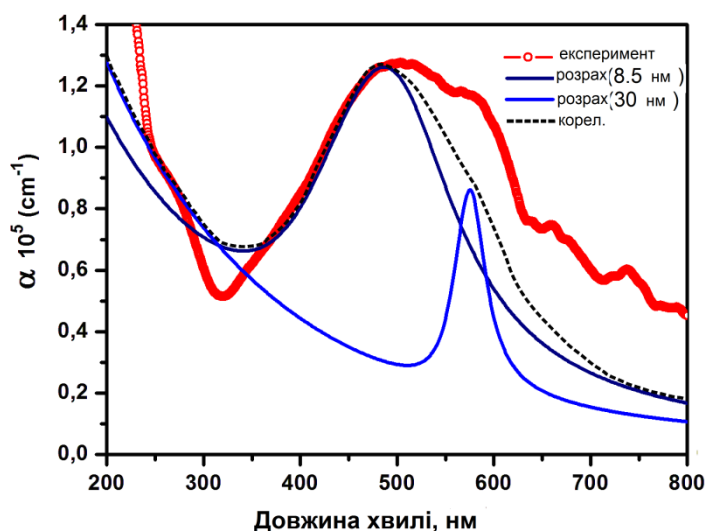


Рис. 6.11. Порівняння експериментального та розрахованого спектру поглинання алмазоподібної плівки, допованої наночастинками срібла.

Пік оптичного поглинання, обумовлений поверхневим плазмонним резонансом срібної наночастинки в алмазоподібній вуглецевій плівці, знаходиться приблизно на довжині хвилі 530 нм. Він розширений через широкий розподіл розмірів (радіус) частинок від 5 до 50 нм. Пік поглинання, який знаходиться приблизно на довжині хвилі 480 нм, відповідає наночастинкам з радіусом 8,5 нм, а пік на довжині хвилі 580 нм відповідає наночастинкам з радіусом 30 нм (див. рис. 6.9б). Апроксимаційна крива, що складається з цих двох піків, забезпечує відповідність експериментальним даним.

Різниця між розрахунком та експериментальними результатами полягає в тому, що ширина експериментальної спектральної кривої є ширшою ніж теоретична. Наші СЕМ-дослідження (рис.6.9а) фактичної нанокompatитної плівки вказують на те, що є широкий розкид розміру частинок, що, як наслідок, призводить до розширення експериментального піку плазмонного резонансу

## 6.2. Особливості поглинання плазмонним нанокompatитним матеріалом

Розроблення методів управління електромагнітним випромінюванням в наномасштабі, в тому числі поглинання і генерація випромінювання є актуальним завданням, яке сьогодні потребує вирішення. Поглинання

електромагнітного випромінювання є однією з ключових проблем в цілому ряді прикладних задач, до яких відноситься: фотовольтаїка і термофотовольтаїка, фотодетектування, генерація гарячих електронів і термоплазмоніка [45]. У світлі згаданих практичних застосувань, розуміння особливостей поглинання електромагнітного випромінювання є надзвичайно важливим для оптимізації поглинання в існуючих системах та розроблення абсолютно нових підходів до поглинання електромагнітної енергії, в тому числі з використанням наноматеріалів та нанокомпозитних середовищ.

Таким чином, метою цієї частини роботи є теоретичне вивчення та модельний аналіз спектральних, ближньопольових характеристик оптичного відгуку наночастинок різної структури та форми як окремих елементів, а також елементів композитних середовищ. Особливості поведінки металевих нановключень, диспергованих в матрицю, дадуть можливість контролювано змінювати параметри композиту (матеріалів матриці та наночастинок, їх розміри та форму, об'ємну частку) та створювати композитні матеріали з наперед заданими діелектричними та оптичними властивостями.

### **6.2.1. Дослідження впливу форми наночастинок та їх взаємної орієнтації у ансамблі наночастинок на оптичний відгук**

Для дослідження впливу форми наночастинок та їх взаємної орієнтації у ансамблі наночастинок на оптичний відгук вибрано нанокомпозитний матеріал на основі АВП та срібних НЧ, де фактор заповнення срібних наночастинок рівний 0,22. Комплексну діелектричну проникність срібла використано з [333] з врахуванням кореляції комплексної діелектричної постійної в залежності від радіусу наночастинок (5.19).

Значення комплексного показника заломлення АВП визначено з двох експериментальних дисперсійних кривих, представлених в роботі [458], за допомогою поліному п'ятого порядку наступним чином:

$$\begin{aligned} n1 &= 1.71008 + 3.83101\lambda - 17.69471\lambda^2 + 32.32631\lambda^3 - 26,6745\lambda^4 + 8.28604\lambda^5 \\ k1 &= 0.48969 + 4.38252\lambda - 21.24796\lambda^2 + 36,21797\lambda^3 - 27.71919\lambda^4 + 8.05628\lambda^5 \end{aligned} \quad (6.1)$$

$$\begin{aligned} n2 &= 1.00162 + 5.91464\lambda - 13.5173\lambda^2 + 14.07168\lambda^3 - 6,98211\lambda^4 + 1.35719\lambda^5 \\ k2 &= 0.24338 + 1.86238\lambda - 8.15507\lambda^2 + 10,66064\lambda^3 - 5.50305\lambda^4 + 0.90659\lambda^5 \end{aligned} \quad (6.2)$$

Як показано у наших роботах [459–462], амплітуда піку поглинання зменшується у міру збільшення уявної частини показника заломлення матриці за рахунок зменшення поляризованості наночастинок і взаємодії між ними.

Експериментальні результати [463] показують, що наночастинки в АВП не мають ідеальної сферичної форми. В результаті такої несферичності ефективні властивості нанокompозитної плівки будуть різними. Рис. 6.12 демонструє вплив форми наночастинок на ефективні оптичні властивості нанокompозитної плівки при різних значеннях відхилення від сферичності ( $e$ ). Значення відхилення від сферичності наночастинок вибрано в діапазоні від 0 до 1,5. Бачимо, що для деформованих наночастинок з відхиленням від сферичності  $e > 0,5$  наявні зміщення і деформація кривих. Таким чином, форма наночастинок впливатиме на оптичні характеристики реальних нанокompозитних матеріалів.

Як зазначено вище, значення показника заломлення матриці впливає на оптичні характеристики нанокompозиту, тому на рис. 6.12 наведено результати моделювання для двох різних значень діелектричної сталої матриці (алмазподібної вуглецевої плівки) розрахованих за формулами (6.1) (рис. 6.12а,б) та (6.2) (рис. 6.12в,г). Як бачимо, параметри матриці визначають величину комплексного ефективного показника заломлення, в той час як параметри включень (срібних наночастинок) визначають положення піку плазмонного резонансу. При збільшенні несиметричності наночастинок з'являються два піки, що відповідають пікам резонансного поглинання.

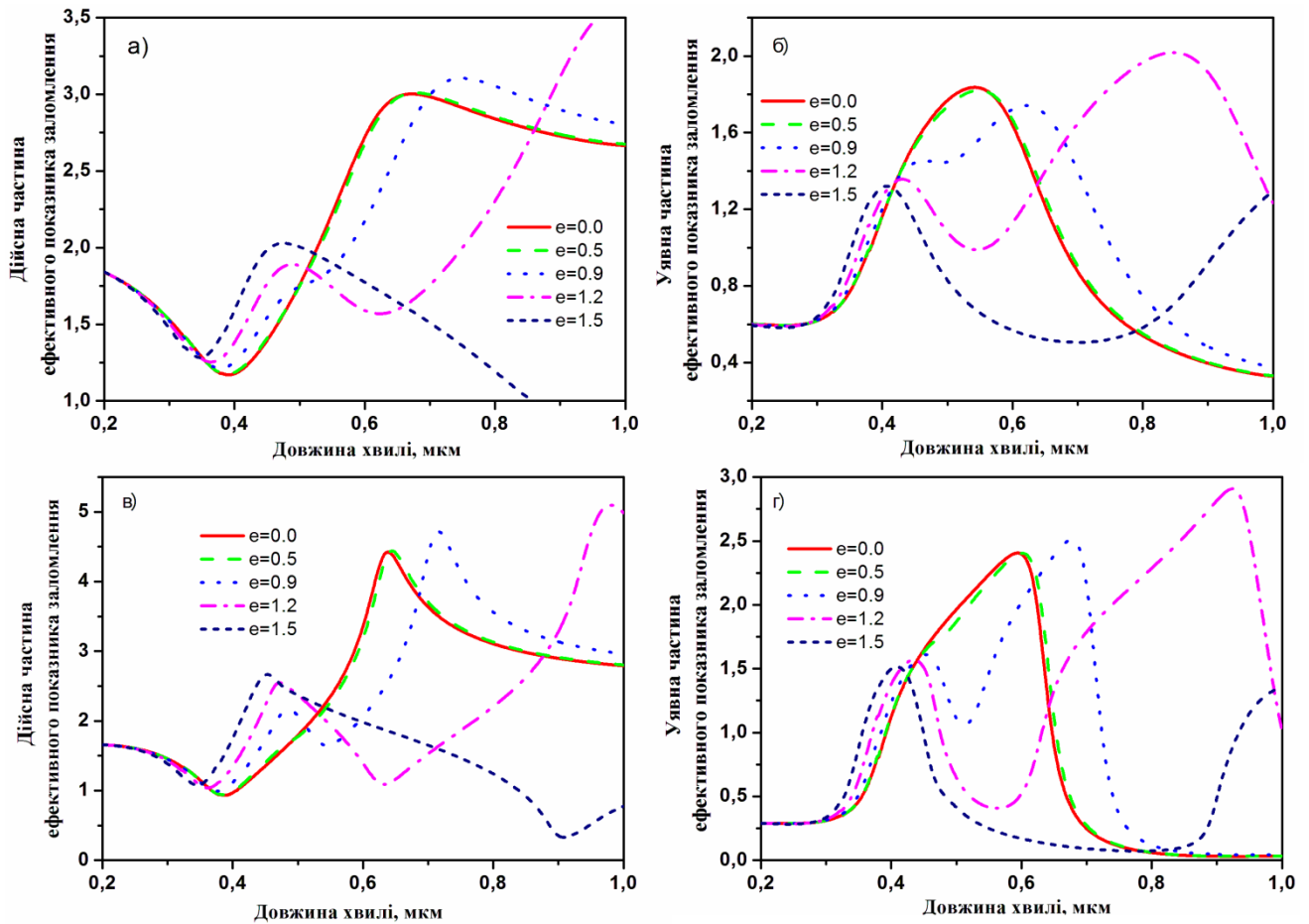


Рис. 6.12. Залежність комплексного ефективного показника заломлення нанокompозитного матеріалу від довжини хвилі для різних значень відхилення від співвісності ( $e$ ) та показника заломлення матриці (а, б – показник заломлення алмазоподібної вуглецевої плівки розраховано за формулою (6.1); в, г – за формулою (6.2))

Два резонансні піки поглинання пояснюються коливанням електронів поперек і вздовж осі симетрії частинок. Крім того, збільшення відхилення від співвісності призводить до збільшення інтенсивності піків поглинання і збільшення відстані між ними.

Використовуючи ефективні діелектричні константи нанокompозитного матеріалу, визначено перерізи поглинання сфероїдних наночастинок (деформованих вертикально та горизонтально) в АВП з показником заломлення, розрахованим за формулою 6.1. Результати розрахунку показано на рис. 6.13.

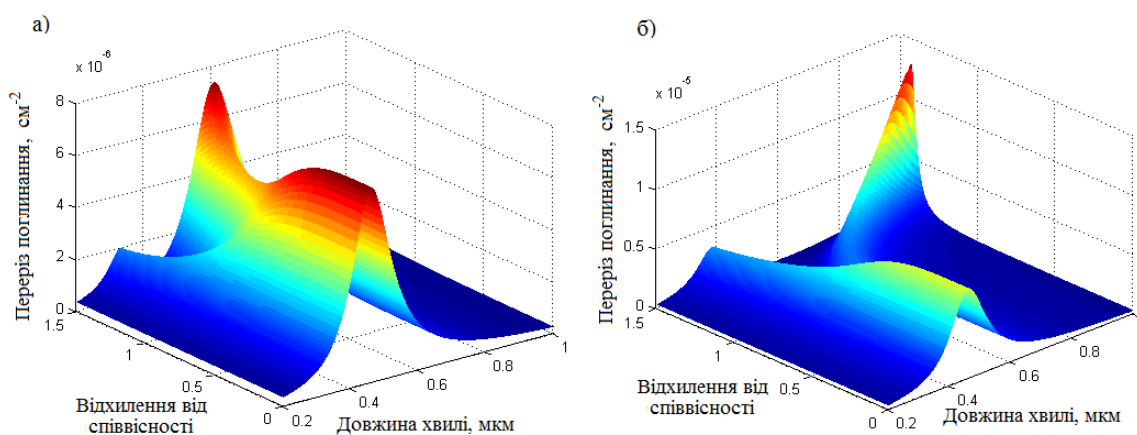


Рис. 6.13. Переріз поглинання наночастинок срібла, деформованих в горизонтальному (а) та вертикальному(б) напрямках, в залежності від довжини хвилі та відхилення від співвісності.

Відхилення від співвісності вибрано в діапазоні від 0 до 1,5. Один пік поглинання спостерігається в наночастинках з відхиленням від співвісності меншим за 0,9. Наночастинки зі  $e > 0,9$  мають два піки поглинання, які зі збільшенням несферичності розходяться та розширюються.

Варто зазначити, що величина поглинання, яка відповідає першому піку є вищою за величину поглинання другого піку у випадку наночастинок, деформованих в горизонтальному напрямку, і навпаки, для наночастинок деформованих у вертикальному напрямку.

## 6.2.2 Близькопольова взаємодія між наночастинками в нанокompозитних матеріалах

Особливості близькопольової взаємодії між наночастинками в нанокompозитних матеріалах досліджено за допомогою перенормованої ефективної теорії Максвелла-Гарнетта [458]. Ефективний показник заломлення нанокompозитної плівки (фактор заповнення становить 0,8 та 0,22; середній радіус наночастинок 10 нм) визначено з використанням класичної теорії і перенормованої теорії Максвелла-Гарнетта [301, 374] та порівняно з експериментальними результатами [463] (див. рис. 6.14)

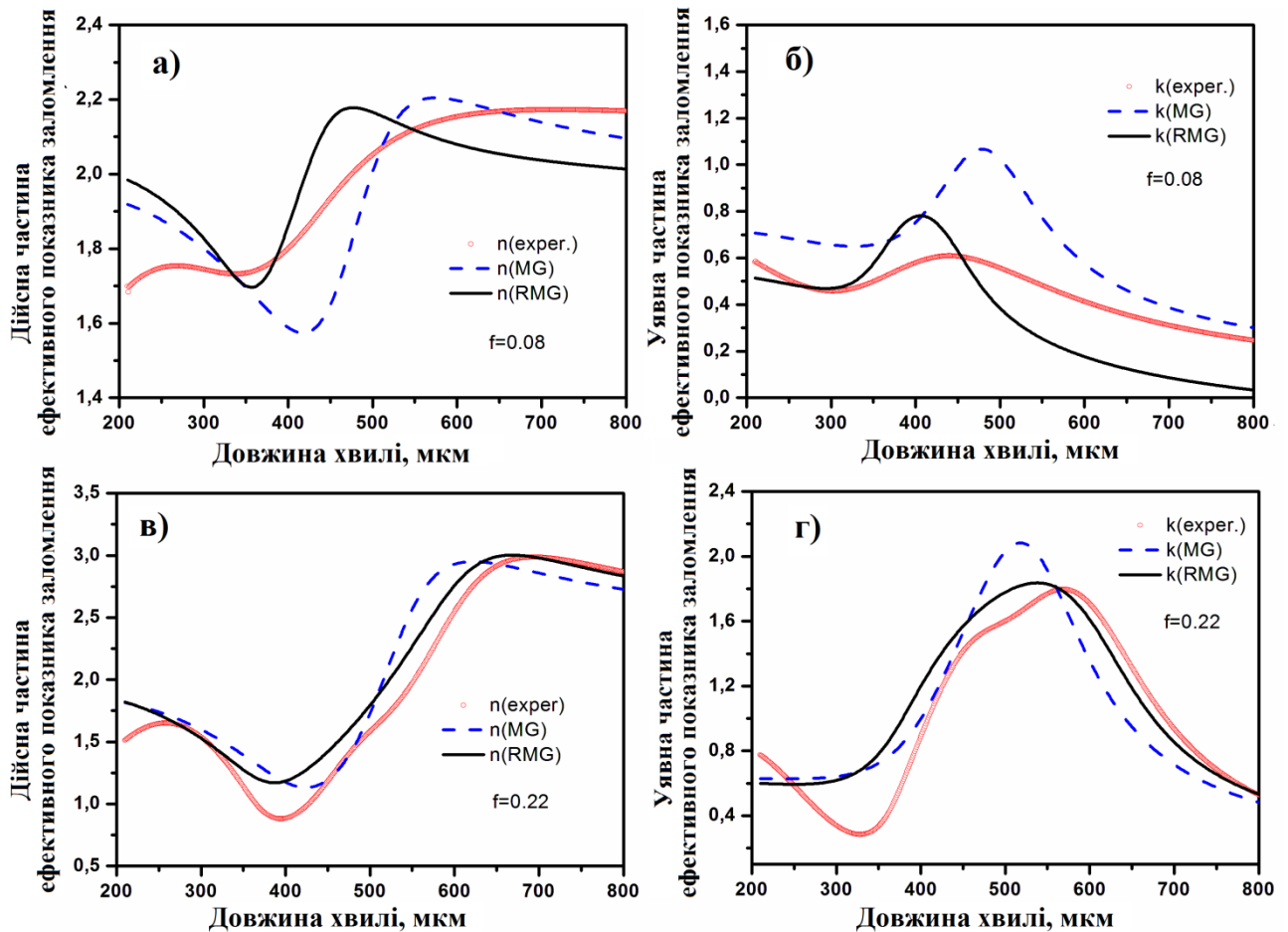


Рис. 6.14. Залежність ефективного показника заломлення нанокompозитного матеріалу від довжини хвилі (кільця- експериментальні результати, штрих пунктирна лінія – теорія Максвелла-Гарнетта, суцільна лінія – перенормована теорія Максвелла-Гарнетта)

Перенормована теорія Максвелла-Гарнетта має більшу кореляцію з експериментальними даними в порівнянні з класичною теорією за рахунок того, що була врахована дипольна взаємодія між НЧ. Таким чином, всі наші наступні дослідження будуть проводитися з використанням перенормованої теорії Максвелла-Гарнетта.

Як зазначалося вище, оскільки експериментально отримані наночастинки не мають ідеальної сферичної форми, то в результаті такої несферичності, ефективні властивості нанокompозитної плівки будуть різними. Рис. 6.15 і 6.16 демонструють вплив форми наночастинок на ефективні оптичні властивості

нанокompозитної плівки. Збільшення несиметричності  $e$  призводить до деформації кривих.

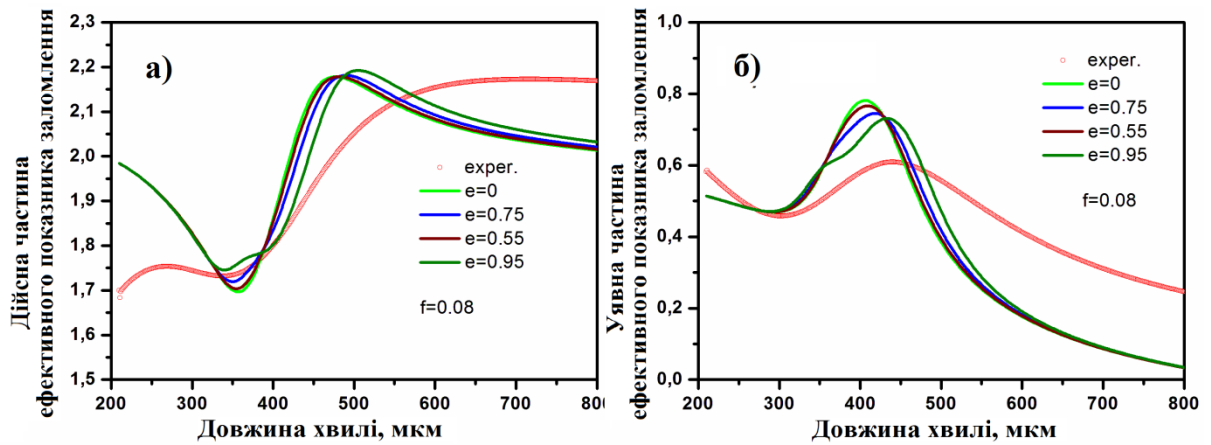


Рис. 6.15. Залежність ефективного показника заломлення нанокompозитного матеріалу, що містить 0,08% срібла, від довжини хвилі

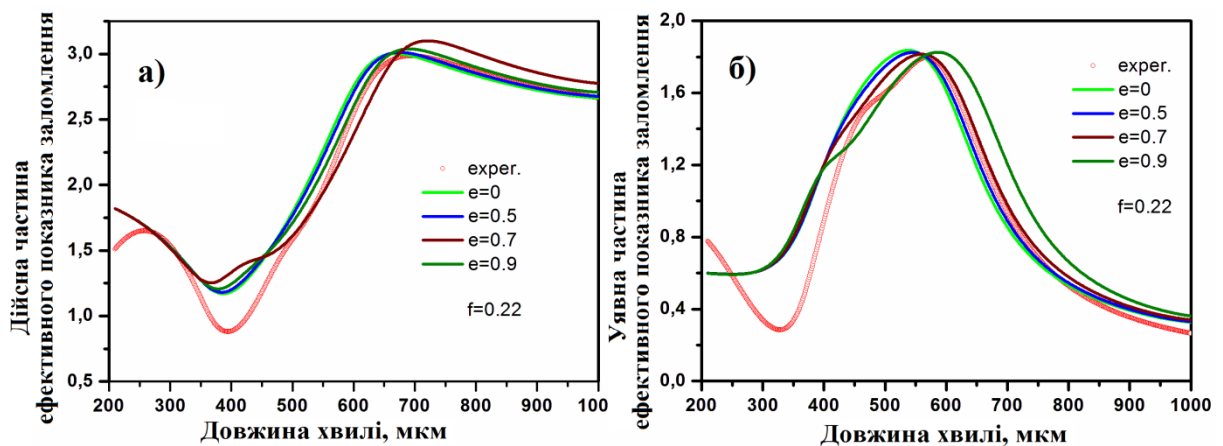


Рис. 6.16. Залежність ефективного показника заломлення нанокompозитного матеріалу, що містить 0,22% срібла від довжини хвилі

Тепер розглянемо поглинання композитних тонких плівок з фактором наповнення 0,08 та 0,22 (вони відповідають атомній концентрації срібла 22 та 8 на% відповідно).

Порівняння експериментальних результатів з результатами розрахунку для деяких величин несферичності наночастинок дозволяє вибрати теоретичну криву, яка буде добре узгоджуватися з експериментальними даними.

Для розрахунку спектрів поглинання представлених на рис. 6.17. використано значення відхилення від співвідношення 0,95 для плівки з концентрацією срібла 8% та 0,7 для плівки, що містить 22 ат.% Ag.

Неідеальна кореляція експериментальних кривих з теоретичними може бути пояснена декількома причинами: по-перше, ми припускаємо, що всі наші частинки мають сплюснуту форму; по-друге, ми використовували усереднені радіуси; і, нарешті, як було показано в нашій роботі [452], пік поверхневого плазмона дуже чутливий до матеріалу матриці.

У нашому випадку властивості алмазоподібної вуглецевої плівки є дуже чутливими до складу газу та інших технологічних умов під час осадження [463], при цьому мала зміна цих параметрів приводить до зміни показника заломлення АВП.

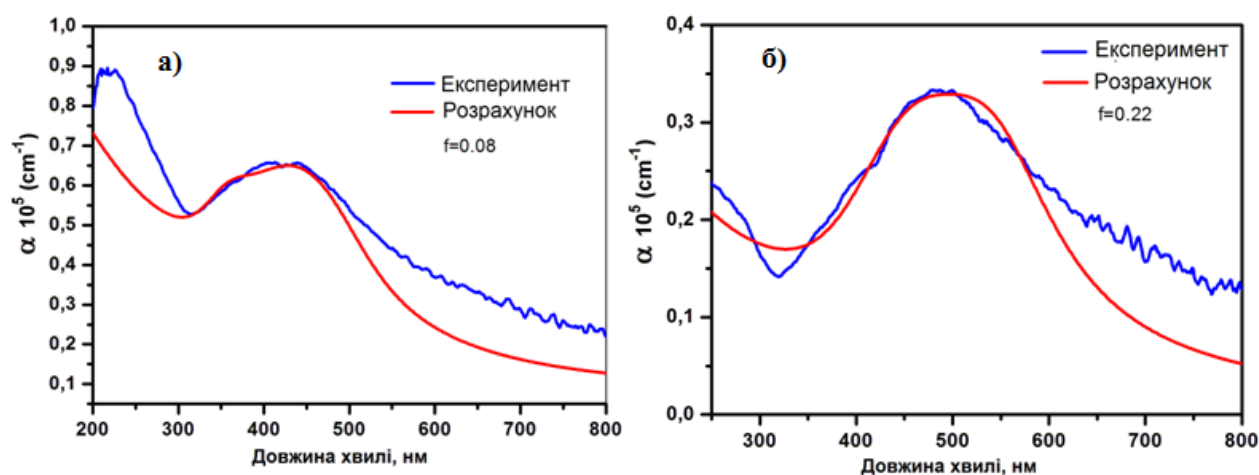


Рис. 6.17. Спектри поглинання нанокompatитних плівок з фактором заповнення нановключень 0,08 та 0.22

В цілому, наші результати показують, що форма наночастинок і взаємодія між ними мають суттєвий вплив на оптичні спектри поглинання алмазоподібних вуглецевих плівок з диспергованими у них НЧ срібла.



### 6.2.3. Порівняння теорій визначення ефективного показника заломлення.

Теорій, які дозволяють визначити ефективний показник заломлення, достатньо багато [301, 302, 376]. Кожна з них має свої переваги та недоліки, а в різних випадках застосування однієї з теорій не забезпечує кореляції з експериментальними даними. Таким чином, в цій частині роботи були досліджені чотири різні наближення для розрахунку ефективного показника заломлення нанокомпозитного матеріалу на основі плазмонних наночастинок з метою вивчення їх унікальних характеристик та можливостей практичного застосування.

Найбільш відомими наближеннями ефективної діелектричної проникності є теорії Максвелла-Гарнетта та Мі. Проста сферична наночастинка однорідного, ізотропного матеріалу, диспергована в однорідне, ізотропне нескінченне середовище і опромінена плоскими хвилями, що поширюються у певному напрямку, розглядається теорією Мі, що базується на розв'язку рівнянь Максвелла. Відповідно до теорії Мі, розсіювання та поглинання визначаються співвідношеннями [282]:

$$Q_S = \frac{2}{\chi^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (|a_n|^2 + |b_n|^2) \quad (6.3)$$

$$Q_E = \frac{2}{\chi^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \operatorname{Re}(a_n + b_n). \quad (6.4)$$

Слід зазначити, що  $Q_S = Q_E$  якщо частинка не поглинає падаюче випромінювання, коефіцієнт ефективності поглинання  $Q_A$  визначається як  $Q_A = Q_E - Q_S$ , якщо частинка поглинає падаюче випромінювання, коефіцієнти Мі  $a_n$  та  $b_n$ , виражаються в термінах функцій Ріккати-Бесселя  $\psi_n(x)$  і  $\xi_n(x)$  наступним чином:

$$a_n = \frac{\psi_n(x) [\psi_n'(x)/\psi_n(x)] - m \psi_n'(x)}{\xi_n(x) [\xi_n'(x)/\psi_n(x)] - m \xi_n'(x)}, \quad (6.5)$$

$$b_n = \frac{\psi_n(x) \left[ \frac{\psi_n'(x)}{\psi_n(x)} - \frac{\psi_n'(x)}{\psi_n(x)} \right] - \psi_n'(x)}{\xi_n(x) \left[ \frac{\xi_n'(x)}{\xi_n(x)} - \frac{\xi_n'(x)}{\xi_n(x)} \right] - \xi_n'(x)}, \quad (6.6)$$

де  $n = 0, 1, 2, 3$ ,  $m$  - відносний показник заломлення,  $x$  - параметр дифракції.

Механізм ефективного середовища Максвелла-Гарнетта описується формулами (2.68) – (2.81). У роботі [464] пропонується, щоб теорію Максвелла-Гарнетта в залежності від розміру наночастинок можна було отримати з використанням електричної дипольової поляризації з теорії Мі наступним чином:

$$\alpha_{MGM} = \frac{3i\lambda^3}{16\pi^3 \varepsilon_m^{3/2}} a_1, \quad (6.7)$$

де  $a_1$  перший електричний коефіцієнт Мі, отриманий з:

$$\alpha_1 = \frac{\left[ \begin{array}{l} \sqrt{\varepsilon_i} \psi_1(2\pi R \sqrt{\varepsilon_i} / \lambda) \psi_1'(2\pi R \sqrt{\varepsilon_m} / \lambda) - \\ - \sqrt{\varepsilon_m} \psi_1(2\pi R \sqrt{\varepsilon_m} / \lambda) \psi_1'(2\pi R \sqrt{\varepsilon_i} / \lambda) \end{array} \right]}{\left[ \begin{array}{l} \sqrt{\varepsilon_i} \psi_1(2\pi R \sqrt{\varepsilon_i} / \lambda) \psi_1'(2\pi R \sqrt{\varepsilon_m} / \lambda) - \\ - \sqrt{\varepsilon_m} \psi_1(2\pi R \sqrt{\varepsilon_m} / \lambda) \psi_1'(2\pi R \sqrt{\varepsilon_i} / \lambda) \end{array} \right]}, \quad (6.8)$$

де  $\psi_1$  і  $\xi_1$  функції Рікатті-Бесселя першого порядку.

Ефективна діелектрична проникність  $\varepsilon_{eff}$  композитного матеріалу, пов'язана з поляризованістю  $\alpha$  включень, використовуючи теорію Максвелла-Гарнетта Мі визначається наступним чином:

$$\frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_m}{\varepsilon_{eff} + 2\varepsilon_m} = \frac{f}{R^3} \alpha_{MGM}. \quad (6.9)$$

Кожна наночастинка в реальних композитних матеріалах має свою власну поляризацію. Тому рівняння (6.7) та (6.8) повинні бути переглянуті з урахуванням середньої поляризації наночастинок. Як наслідок, модифікована теорія Максвелла-Гарнетта-Мі може бути записана наступним чином:

$$\frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_m}{\varepsilon_{eff} + 2\varepsilon_m} = \frac{3i\lambda^3}{16\pi^3 \varepsilon_m^{3/2}} \frac{f}{R^3} \int_{R_{min}}^{R_{max}} P(R) \alpha_1 dR, \quad (6.10)$$

де  $P(R)$  – розподіл розмірів наночастинок,  $R_{\min}$  і  $R_{\max}$  – нижня і верхня межі розподілу розмірів.

Для порівняння різних ефективних теорій, як матриця нанокомпозиту, був обраний полімер з показником заломлення 1,516. В якості включень були використані сферичні наночастинки благородних металів, таких як золото, срібло та мідь. Показники заломлення металевих наночастинок використано з [434].

Моделювання оптичних характеристик нанокомпозиту на основі сферичних наночастинок Au, Ag та Cu була виконано за допомогою теорії Максвелла-Гарнетта (МГ), розширеної теорії Максвелла-Гарнетта (РМГ), теорії Максвелла-Гарнетта Мі (МГМ) та модифікованої теорії Максвелла-Гарнетта Мі (ММГМ). Радіус наночастинок становив 10 нм, фактор заповнення становив 0,01. Моделювання було виконано за допомогою модифікованої теорії Максвелла-Гарнетта Мі для коефіцієнту розподілу розмірів з  $\sigma=1,4$ , що відповідає типовому розподілу, на якому часто побудовані гістограми.

Для нанокомпозитів на основі золота результати моделювання представлені на рис. 6.18.

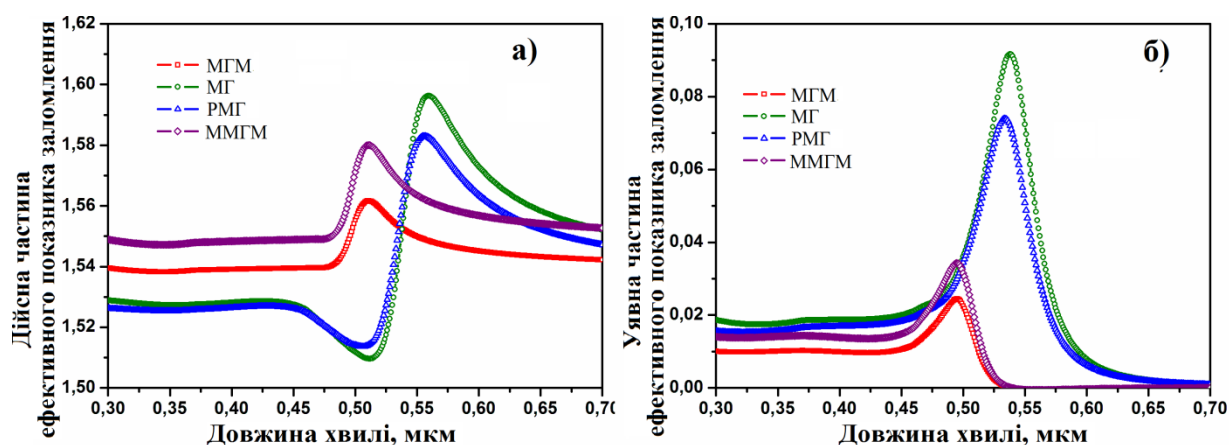


Рис. 6.18. Спектральні залежності дійсної (а) і уявної частин (б) показника заломлення нанокомпозиту на основі золота.

Криві, обчислені за допомогою Максвелла-Гарнетта Мі і модифікованої Максвелла-Гарнетта теорій, показують положення піку плазмонного резонансу

близько 495 нм. Криві, розраховані за допомогою Максвелла-Гарнетта і розширеної Максвелла-Гарнетта теорій, показують позицію піку плазмонного резонансу приблизно на довжинах хвиль 538 нм і 534 нм, відповідно. Більше того, спектри дійсної та уявної частин ефективного показника заломлення, розрахованого за Максвелла-Гарнетта та розширеною Максвелла-Гарнетта теоріями, показують вищу амплітуду значень (див. рис. 6.18). Аналогічна ситуація буде з спектрами коефіцієнта поглинання, оскільки крива уявної частини ефективного показника заломлення відповідає спектру поглинання. Слід зазначити, що напівширина спектру практично однакова для всіх теорій.

Спектри дійсної та уявної частин ефективного показника заломлення для нанокompatитів на основі срібла представлені на рис. 6.19. Криві, обчислені за Максвелла-Гарнетта-Мі і модифікованою Максвелла-Гарнетта теоріями, показують пік положення плазмонного резонансу близько довжини хвилі 353 нм. Криві, розраховані за Максвелла-Гарнетта і розширеною Максвелла-Гарнетта теоріями, показують позицію піку плазмонного резонансу поблизу довжин хвиль 402 нм і 393 нм, відповідно.

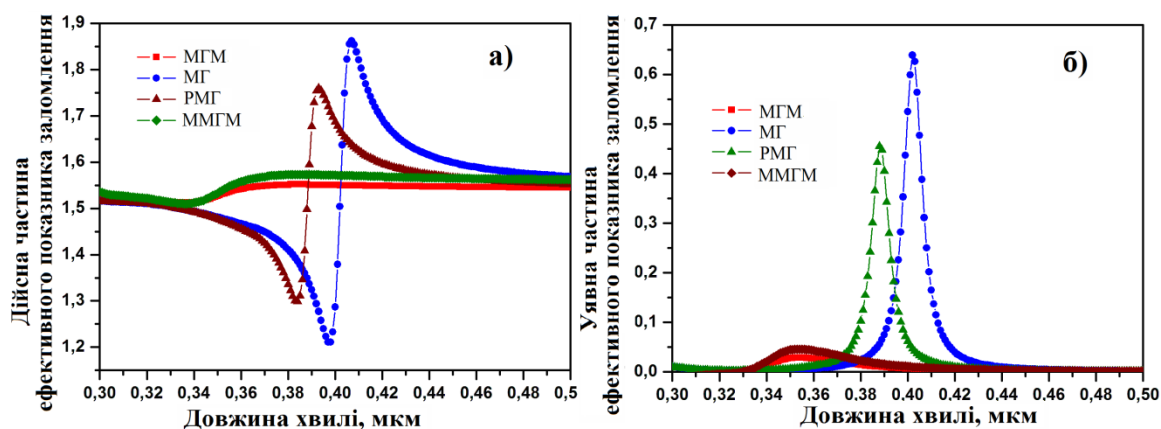


Рис. 6.19. Спектральні залежності дійсної (а) і уявної частин (б) показника заломлення нанокompatиту на основі срібла.

Теорії Максвелла-Гарнетта-Мі і модифікована Максвелла-Гарнетта-Мі у випадку композиту на основі срібла є дуже близькими між собою та демонструють дуже низькі значення ефективного комплексного показника

заломлення. Різниця між ефективним показником заломлення, розрахованим за теоріями Максвелла-Гарнетта та Максвелла-Гарнетта-Мі, більш помітна для наночастинок срібла у порівнянні з наночастинками золота. Це можна пояснити динамічними ефектами деполяризації, що є неефективними в золоті через присутність міжзонних переходів [282].

Пік поверхневого плазмонного поглинання ізольованих наночастинок  $\text{Cu}$  знаходиться на довжині хвилі близько 560 нм, проте в композитному матеріалі, через вплив матриці, пік поглинання буде зміщений вдовгохвильову область спектра. У випадку мідних нанокompозитів на основі полімеру наявний зсув спектра ефективного комплексного показника заломлення в інфрачервону область спектра, які розраховані за Максвелла-Гарнетта і модифікованою Максвелла-Гарнетта-Мі теоріями, є меншим ніж для композитів на основі золота та срібла (див. рис. 6.20). Така ж ситуація спостерігається і в спектрі коефіцієнта поглинання. Різниця в амплітуді однакова. Нанокompозити на основі міді демонструють менший коефіцієнт поглинання у порівнянні з золотом або сріблом.

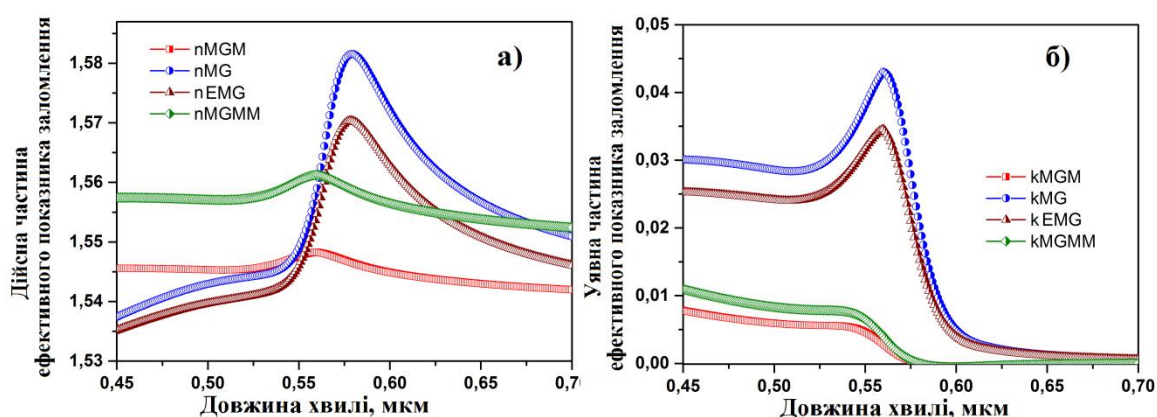


Рис. 6.20. Спектральні залежності дійсної (а) і уявної частин (б) показника заломлення нанокompозиту на основі міді від довжини хвилі.

Для того, щоб перевірити, як узгоджуються ефективні теорії діелектричної проникності нанокompозиту з експериментальними даними, проведено порівняння результатів моделювання з експериментальними даними, представленими у літературі. Опис композиту на основі срібла за допомогою

ефективної теорії неодноразово був нами наведений в ряді робіт [452–463], тому ми розглянемо лише композитні матеріали на основі золота та міді.

Порівняння експериментально отриманого спектру поглинання нанокompозитів золото-поліметилметакрилат (Au-PMMA) [465] з розрахованими спектрами показано на рис. 6.21.

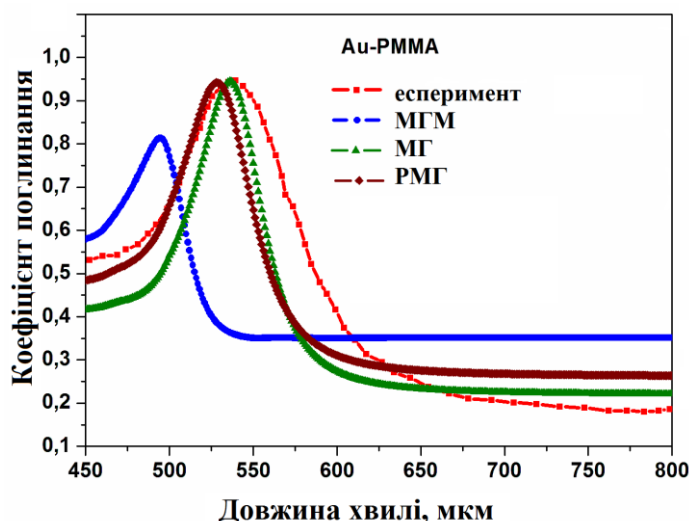


Рис. 6.21. Порівняння результатів моделювання з експериментальними даними, наведеними в роботі [465], для нанокompозиту Au-PMMA.

Положення піку спектру поглинання на довжині хвилі 540 нм показує відмінне узгодження з розрахованим спектром за допомогою ефективної теорії Максвелла-Гарнетта. Максимум спектра поглинання, розрахованого за теорією Максвелла-Гарнетта-Мі і розширеною теорією Максвелла-Гарнетта, зсунуто в область коротких довжини хвиль.

Зовсім інша ситуація з мідним нанокompозитом. Порівняння теоретичних результатів з експериментальними даними, представленими у [466] для композиту Cu-SiO<sub>2</sub>, наведено на рис. 6.22.

Положення піку експериментального спектру поглинання знаходиться на довжині хвилі близько 540 нм. Як видно з рис. 6.22, пік поглинання на довжині хвилі 540 нм був отриманий за допомогою ефективної теорії Максвелла-Граната-Мі. Однак максимум поглинання отриманий за цією теорією, є низьким.

Теорія Максвелла-Гарнетта та розширена теорія Максвелла-Гарнетта показують пік поглинання приблизно на довжині хвилі 580 нм.

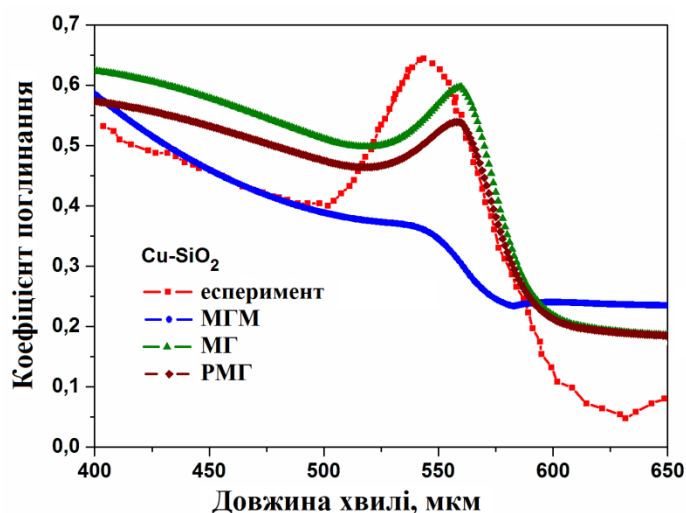


Рис. 6.22. Порівняння результатів моделювання з експериментальними даними представленими в роботі [466], для нанокompозиту Cu-SiO<sub>2</sub>

Слід зазначити, що у роботі [467] також досліджувався нанокompозитний матеріал Cu-SiO<sub>2</sub>, пік поглинання якого знаходиться на довжині хвилі 580 нм. Ці результати ще раз підтверджують, що один і той же нанокompозитний матеріал, але з іншими параметрами (розмір і концентрація нановключень) може бути описаний різними теоріями [468].

Найбільші розбіжності спектральних кривих, що моделюються представленими ефективними теоріями, спостерігаються для срібних нанокompозитів. Найменший зсув резонансних характеристик спостерігається для нанокompозиту на основі міді для всіх ефективних теорій. Слід зазначити, що нанокompозити з піком поглинання на менших довжинах хвиль найкраще описуються ефективними теоріями, які враховують коефіцієнти розсіювання Мі. Таким чином, якщо врахувати розмір нановключень та взаємодію між ними, пік поглинання в такому нанокompозиті буде зміщений в область коротших довжин хвиль

### **6.3. Моделювання оптичних властивостей нанокompозитного матеріалу в залежності від температури**

Оптичні властивості плазмонних нанокompозитів та інших плазмонних наноматеріалів можуть бути додатково змінені за допомогою відпалу [469]. Таким чином, можна досягти збільшеної інтенсивності піків поверхневого плазмонного резонансного поглинання і відбивання, а також контролю положення плазмонного піку. Використовуючи такий підхід, можна виготовити нові цікаві наноструктури, однак відпал може також призвести до шкідливого впливу на оптичні властивості плазмових нанокompозитів [469]. Отже, у кожному випадку процес відпалу повинен бути оптимізований з урахуванням властивостей діелектричної матриці. Проте, не існує досліджень про вплив відпалу на оптичні властивості плазмонних нанокompозитів АВП з диспергованими НЧ благородних металів. Тому ми вивчали вплив відпалу на структуру та оптичні властивості АВП з диспергованими в них НЧ Ag [470]. Моделювання та експериментальні дослідження були об'єднані для з'ясування процесів, що відбуваються під час відпалу.

#### **6.3.1 Залежність оптичних властивостей нанокompозитного матеріалу від параметрів матриці, розміру та форми нановключень**

Спектри оптичного поглинання АВП з диспергованими в неї НЧ срібла після відпалу при різних температурах [470] представлені на рис. 6.23. Можна побачити, що після відпалу плазмонні піки зміщені та чітко виділяються додаткові піки. Слід також зазначити, що відпал при температурі 140 і 200° С призвів до появи другого піку поглинання на довжині хвилі поблизу 350 нм. Збільшення температури відпалу до 300 та 400 °С призвело до червоного зміщення основного поверхневого плазмонного резонансного піку. Подібна поведінка плазмонного піку була знайдена і в спектрах відбивання [470]. Усі ці закономірності можна пояснити змінами середнього розміру НЧ Ag, які після відпалу перетворилися на нанокластери. У всіх випадках відпалювання привело до зменшення ширини основного плазмонного піку. Різні розміри нанокластерів



Ag з'являються в результаті відпалу. Форма цих нанокластерів відіграє вирішальну роль у спектрах поглинання.

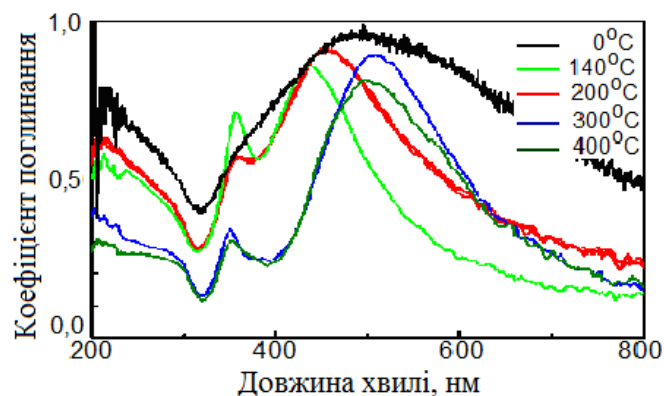


Рис. 6.23. Вплив температури відпалу на спектр поглинання АВП-Ag композитів

Відомо, що для сфероїдної металевої наночастинки плазмонна зона розщеплюється на дві смуги, що відповідають коливанню вільних електронів вздовж (дипольний плазмон) і перпендикулярно (квадрупольний плазмон) до довгої осі сфероїда [372]. Для малих наночастинок можуть бути збуджені лише моди дипольного резонансу, тоді як для більших наночастинок також можуть бути збуджені квадрупольні резонансні моди [471]. Більш того, аналогічні дипольні та квадрупольні резонансні плазмонні піки вже експериментально спостерігались для наноструктур Ag-SiO<sub>2</sub> у [472].

Щоб уточнити спостережувані зміни оптичних властивостей АВП-Ag плівок було проведено теоретичне моделювання. Припустимо, що невеликі сферичні наночастинки злипаються і утворюють великі нанокластери, що мають форму сфероїдів. Таким чином легко пояснити появу двох піків поглинання. Два резонанси, що відповідають коливанню електронів поперек і вздовж осі симетрії частинок з'являються для таких наночастинок [372]. Звичайно, форма цих частинок не є ідеально сфероїдна і їх розміри дещо відрізняються один від одного. Однак такий підхід видається цілком доречним, тому що це дозволяє більш-менш точно описати властивості цих НЧ. Поглинання нанокластерів може бути розраховане наступним чином:

$$C_{abs} = \frac{12\pi k \varepsilon_h \operatorname{Im}(\varepsilon_i)}{R^3 |\varepsilon_i - \varepsilon_h|^2} |\alpha_{\perp, \parallel}|^2, \quad (6.11)$$

де  $\varepsilon_i$  і  $\varepsilon_h$  це діелектричні проникності наночастинок та оточуючого середовища.

Тензор порязризованості несферичних наночастинок можна розрахувати за наступною формулою [471]:

$$\alpha_{\perp, \parallel} = \frac{2\alpha_{\perp} + \alpha_{\parallel}}{3}, \quad (6.12)$$

де  $\alpha_{\perp}$  і  $\alpha_{\parallel}$  визначаються:

$$\alpha_{\perp} = \frac{\varepsilon_i/\varepsilon_h - 1}{(\varepsilon_i/\varepsilon_h - 1) \left( \frac{1}{3} \mp \frac{1}{15} e^2 \right) + 1} \left( \frac{V}{4\pi} \right), \quad (6.13)$$

$$\alpha_{\parallel} = \frac{\varepsilon_i/\varepsilon_h - 1}{(\varepsilon_i/\varepsilon_h - 1) \left( \frac{1}{3} \pm \frac{2}{15} e^2 \right) + 1} \left( \frac{V}{4\pi} \right), \quad (6.14)$$

де  $e$  є несиметричність (відхилення від співвісності) наночастинок. Два знаки відповідають сфероїдам деформованим вздовж вертикальної та горизонтальної осі, відповідно.

Розраховані перерізи поглинання сфероїдних НЧ (деформованих вздовж вертикальної та горизонтальної осі) в повітрі і в АВП представлені на рис. 6.24а і 6.24б відповідно.

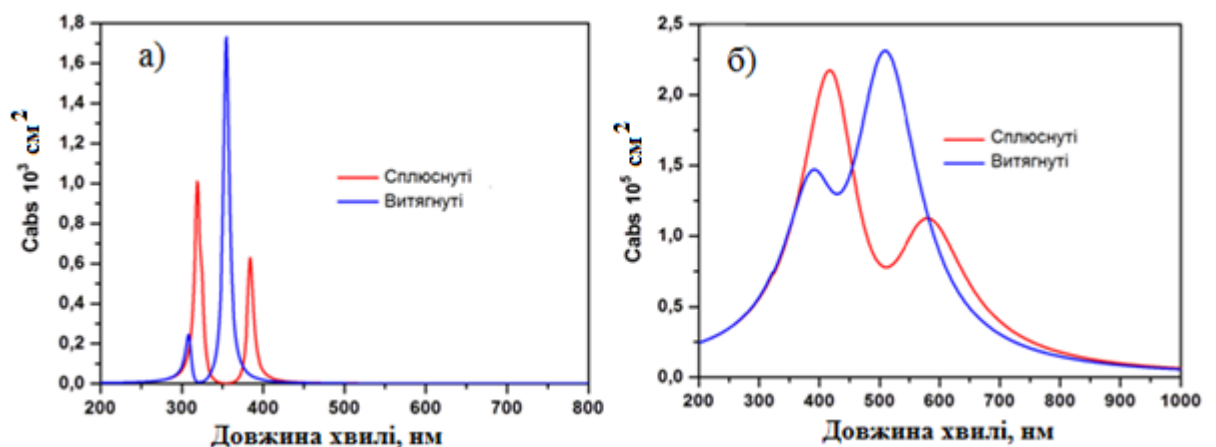


Рис. 6.24. Переріз поглинання наночастинок срібла сфероїдної форми (деформованих вздовж вертикальної та горизонтальної осі) в повітрі (а) і в алмазоподібній вуглецевій плівці (б)

Несиметричність в цих розрахунках було вибрано 0.9. Діелектрична проникність срібла використана з [333], оптичні константи АВП з [11].

За розрахунками, НЧ, поміщені в повітря, мають два вузькі піки поглинання близько 300 і 360 нм для деформованих горизонтально і близько 320 і 390 нм для деформованих вертикально форми. Два піки в спектрах поглинання нанокластерів, розміщених в АВП, зсуваються в довгохвильову область - 380 і 520 нм для витягнутого; 420 і 590 нм для сплюснутого. Крім того, піки є ширшими.

Порівняння експериментальних результатів з отриманими результатами дозволяє припустити, що деформовані вздовж горизонтальної осі нанокластери домінують в наших зразках. Таким чином, ми будемо використовувати цю форму в подальших розрахунках.

Оскільки нанокластери в АВП плівках після відпалу не мають ідеальної форми сфероїда, необхідно вивчити вплив несферичності на переріз поглинання спектра при постійному показнику заломлення АВП. Рис. 6.25 демонструє, що додатковий квадрупольний пік з'являється для нанокластерів з несферичністю 0,9 в АВП.

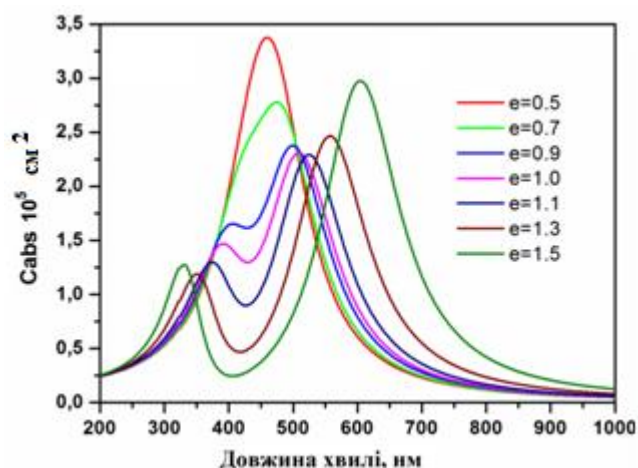


Рис. 6.25. Переріз поглинання нанокластерів срібла з різними несферичностями

Ми використовували значення показника заломлення і коефіцієнта екстинкції АВП, які були взяті з експериментальних дисперсійних кривих і

екстраполювалися поліномом п'ятого порядку, щоб вони відповідали вимірним даним наступним чином:

$$n = 1.30568 + 0.00426\lambda - 1.04027 \cdot 10^{-5} \lambda^2 + 1.12199 \cdot 10^{-8} \lambda^3 - 5.61906 \cdot 10^{-12} \lambda^4 + 1.06725 \cdot 10^{-15} \lambda^5 \quad (6.15)$$

$$k = 0.61709 - 0.00168\lambda + 8.79418 \cdot 10^{-7} \lambda^2 + 1.1057 \cdot 10^{-9} \lambda^3 - 1.2658 \cdot 10^{-12} \lambda^4 + 3.41168 \cdot 10^{-16} \lambda^5 \quad (6.16)$$

Збільшення несиметричності результується у збільшення інтенсивності піків і збільшення відстані між ними.

Для вивчення впливу оточуючого середовища в розрахунках ми використовували два різних показника заломлення АВП, розрахованим за формулами (6.15) і (6.16) та кривими, які були також екстрапольовані поліномом п'ятого порядку наступним чином:

$$n = 0.99176 + 0.00599\lambda - 1.36751 \cdot 10^{-5} \lambda^2 + 1.41206 \cdot 10^{-8} \lambda^3 - 6.85141 \cdot 10^{-12} \lambda^4 + 1.26971 \cdot 10^{-15} \lambda^5 \quad (6.17)$$

$$k = 0.21748 - 0.00219\lambda + 9.57262 \cdot 10^{-6} \lambda^2 + 1.33692 \cdot 10^{-8} \lambda^3 - 7.84873 \cdot 10^{-12} \lambda^4 + 1.66521 \cdot 10^{-15} \lambda^5 \quad (6.18)$$

На рис. 6.26 показано вплив показника заломлення оточуючого середовища на спектр поглинання нанокластерів.

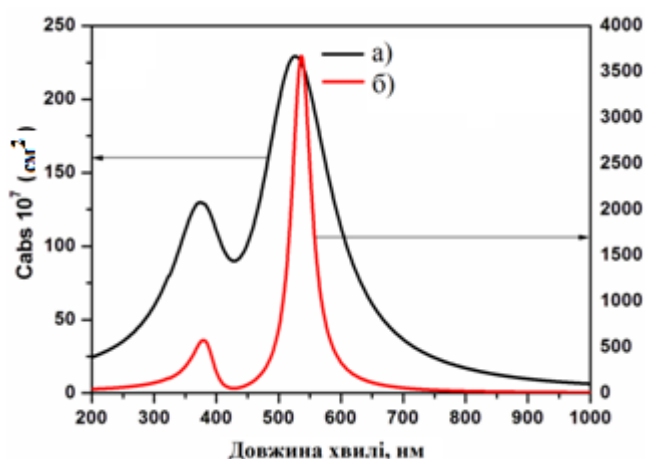


Рис. 6.26. Переріз поглинання нанокластерів срібла з різними показниками заломлення АВП: (а) показник заломлення АВП, розрахований за формулами (6.15) та (6.16), (б) показник заломлення АВП, розрахований за формулами (6.17) та (6.18)

Як бачимо, піки поглинання чутливі до діелектричної проникності АВП і відрізняються в величині поглинання, положенні піків і пропускній здатності.

### 6.3.2 Поглинання алмазоподібною вуглецевою плівкою з диспергованими в неї наночастинками срібла за різних температур відпалу

Щоб підтвердити припущення про те, що сформовані після відпалу нанокластери несферичної форми відіграють основну роль у поглинанні, ми розрахували спектри поглинання нанокompatитних плівок після відпалу при температурах 140, 200, 300 і 400°C. Результати розрахунків наведені на рис. 6.27.

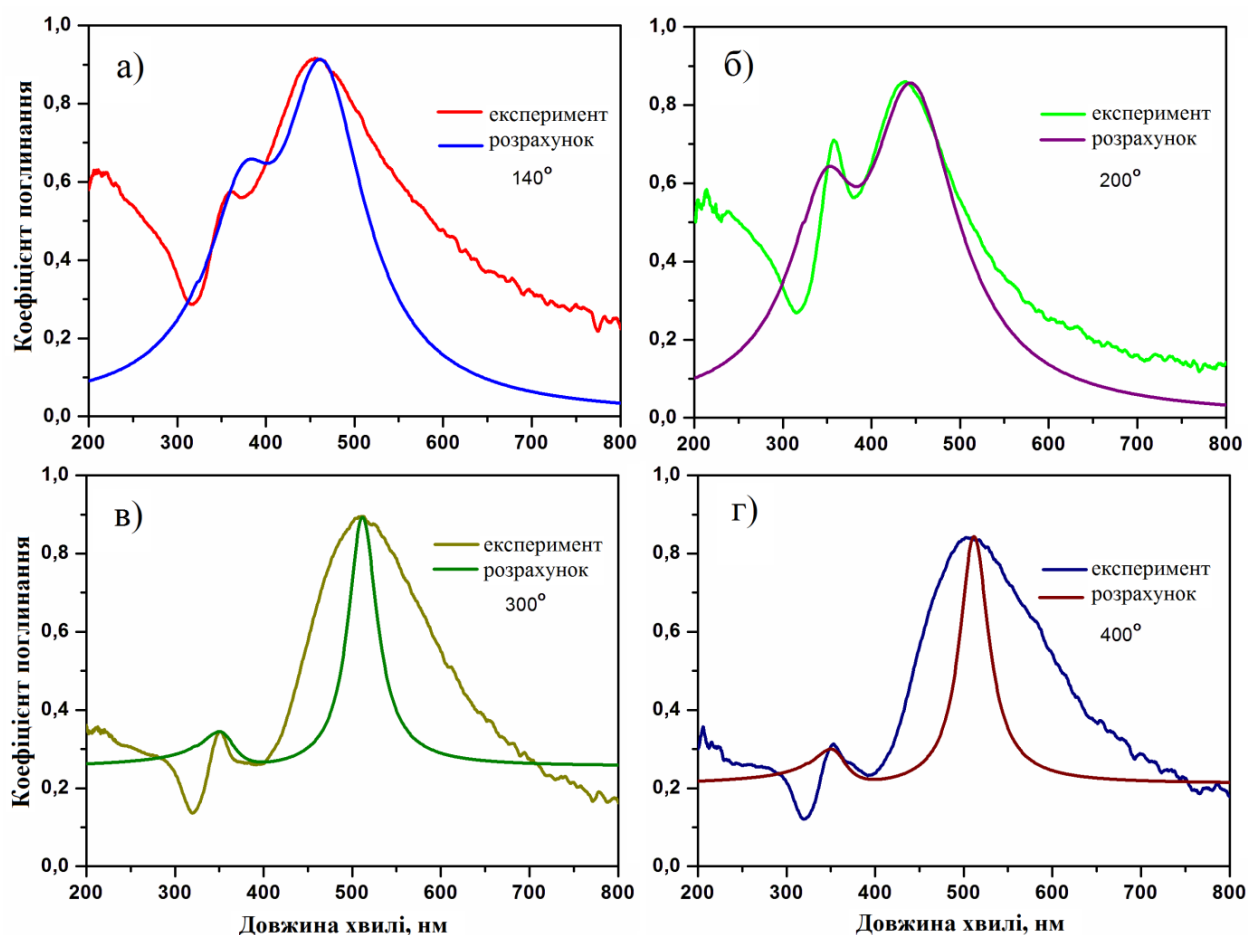


Рис. 6.27. Експериментальні і розрахункові спектри оптичного поглинання алмазоподібною вуглецевою плівкою з диспергованими в неї НЧ срібла після відпалу при температурах 140, 200, 300 і 400°C

Маючи розмір нанокластерів і експериментальні значення показника заломлення АВП, встановлено несферичність сформованих нанокластерів після відпалу при різних температурах. Таким чином, ми одержали оптимальне узгодження експериментальних і розрахункових даних для відпалу: при 140°C, (рис. 6.27а), на 200°C (рис. 6.27б), на 300 і 400°C (рис. 6.27в і рис. 6.27г відповідно).

Результати показують, що зі збільшенням температури відпалу нанокластери стають все більш і більш асиметричними. Велика розбіжність між пропускну здатністю розрахункових і експериментальних кривих, представлених на рис. 6.26в і рис. 6.26г може бути пояснена домінуючою роллю великих нанокластерів у спектрі поглинання.

За нашими розрахунками, нанокластери, отримані після відпалу на 300°C і 400°C мають однакову несиметричність, однак, показники заломлення АВП змінюються, і як результат є два добре виражені піки поглинання.

Таким чином, зміна спектрів поглинання АВП-Ag композиту в результаті відпалу зумовлена зміною розміру НЧ через їх злипання і зміною відносної діелектричної проникності оточуючого середовища.

Слід зазначити, що відпал спричиняє появу другого плазмонного піку і це явище може бути корисним у різних застосуваннях. Зокрема, в КРС застосуваннях це може призвести до підвищення збудження ліній комбінаційного розсіяння світла [473]. Подвійний плазмонний резонанс може бути використаний також для виготовлення хімічних сенсорів, оскільки звуження ширини плазмонних піків призводить до збільшення розділення сенсорного елементу [474].

#### **6.4. Моделювання сенсорних елементів на базі дифракційних нанокompatитних ґраток**

Модифікація електронних та оптичних властивостей нанокompatитних матеріалів на основі металевих НЧ відкриває нові перспективи для вивчення

нових можливостей використання їх для різних оптичних елементів. Метою цього дослідження є вивчення оптичних властивостей періодичних структур на основі нанокompозитного матеріалу АВП-Ag та сенсорних застосувань.

Реальні періодичні структури на основі чистої АВП-плівки показують екстраординарні характеристики завдяки хвилеводному резонансу [406]; одночасно плівки нанокompозиту АВП-Ag характеризуються плазмонним резонансом [452], отже, застосування метал-діелектричних композитів в якості матеріалу періодичної структури дозволяє об'єднати поверхневий плазмовий резонанс і явища резонансу, що відбуваються в ній. У результаті ми можемо отримати структуру ґратки, яка дуже чутлива до зміни показника заломлення оточуючого середовища [475, 476].

#### **6.4.1. Одновимірні періодичні структури на основі нанокompозитного матеріалу**

В досліджуваній моделі ґраткова структура була розділена на два шари: верхній шар, який представляє собою ґраткову структуру, і нижній шар, який представляє собою хвилеводний шар. Геометричні параметри ґратки були наступними: період 428 нм; товщина ґратки і хвилеводного шару рівні 75 нм і 155 нм, відповідно. Тонка АВП містить сферичні НЧ срібла з радіусом 5 нм. В якості підкладки використано плавлений кварц з показником заломлення, який розраховується з урахуванням дисперсійних співвідношень [477].

Періодичні структури на базі чистої АВП демонструють резонансні характеристики, як показано на рис. 4.9а і чутливі до зміни показника заломлення навколишнього середовищ (повітря, вода).

На рис. 6.28 показано, що подібна структура на основі АВП з диспергованими в неї сферичними НЧ срібла показує аналогічні характеристики: піки на більших довжинах хвилі більш чутливі до зміни показника заломлення навколишнього середовища. Розрахунки показали, що зсув положення піку набагато більш виражений у разі нанокompозитів, ніж у випадку чистої АВП.

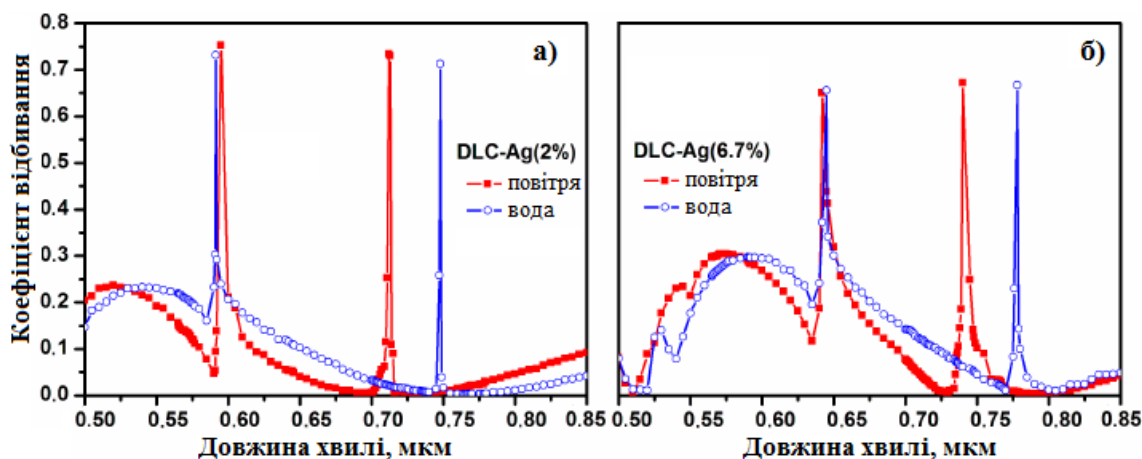


Рис. 6.28. Залежність відбивання від довжини хвилі в синусоїдальній ґратці, зробленій з алмазоподібної вуглецевої плівки з диспергованими в неї наночастинками срібла радіусом 10 нм: а) концентрація срібла 2%, б) концентрація срібла 6,7%.

Зсув піків в результаті зміни показників заломлення оточуючого середовища рівний 34 нм для чистої АВП (див. рис. 6.27), і 35 нм для АВП-Аг срібла з концентрацією срібла 2% (див. рис. 6.28а) та 37 нм для АВП-Аг з концентрацією срібла 6,7% (див. рис. 6.28б). Розширення спектрів відбивання відбувається за рахунок поверхневого плазмонного резонансу НЧ. За нашими розрахунками одновимірна ґраткова структура на базі АВП з диспергованими в неї сферичними НЧ срібла характеризується резонансними характеристиками і може бути використана як елемент сенсорних систем.

#### 6.4.2. Двовимірні періодичні структури на основі композитного матеріалу

Автори роботи [478] показали, що для перфорованої металеві плівки, можна ввести ефективну діелектричну проникність. Ефективна діелектрична проникність двовимірних масивів наноотворів в непрозорих металевих плівках має вигляд, ідентичний до плазмонних матеріалів. Таким чином, ми можемо розглянути нанокompозитні АВП-Аг з масивом отворів як плазмонний кристал,



коли період набагато менший за довжину хвилі [479]. Така структура поводить ся як ефективне середовище, а її оптичні параметри залежать від геометричних.

Класична теорія ефективного середовища Максвелла-Гарнетта була використана для розрахунку оптичних характеристик АВП-Ag плівки з масивом наноотворів.

Коефіцієнт заповнення з повітряних включень розраховувався за аналогією з одновимірною дифракційною ґраткою. Оптичні константи нанокомпозиту були змодельовані з використанням перенормованої теорії Максвелла-Гарнетта, беручи до уваги диполь-дипольні взаємодії між частинками. Середній розмір наночастинок срібла становив 10 нм. Застосування цієї теорії ефективного середовища забезпечує хороше узгодження експериментальних даних показника заломлення і спектрів поглинання плівок АВП-Ag з концентрацією наночастинок срібла до 22% [452].

Також ми змодельовали чотири типи АВП-Ag плівок з масивом наноотворів як показано на рис. 6.29. щоб вивчити вплив геометричних параметрів структури на поглинання.

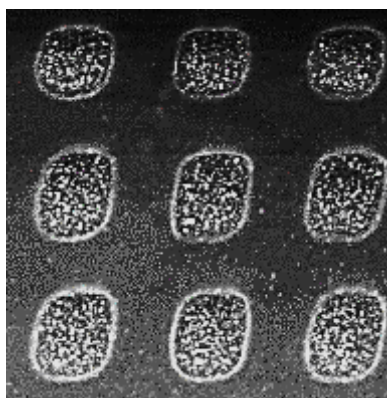


Рис. 6.29. Схема АВП-Ag з масивом наноотворів

Були вибрані наступні параметри: період 400 нм і діаметр наноотворів 120 нм; 600 нм і 350 нм; 600 нм і 450 нм; 1000 нм і 600 нм відповідно. Пік поглинання наноструктурованих плівок отримано поблизу довжини хвилі 500 нм (рис. 6.30).

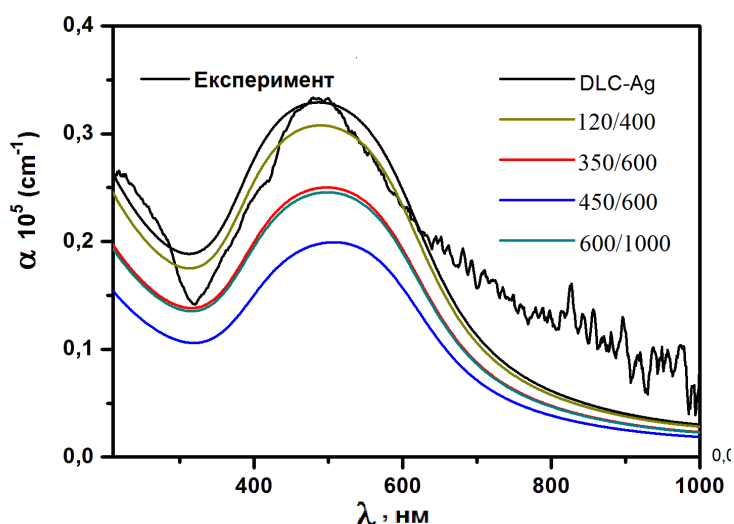


Рис. 6.30. Спектри поглинання АВП-Ag з масивом наноотворів різного діаметру з різним періодом

Положення піку поглинання практично не змінюється при зміні геометричних параметрів. Тим не менше, значення поглинання змінюється в залежності від фактора заповнення. Поглинання зменшується, коли коефіцієнт заповнення збільшується.

## 6.5 Висновки до шостого розділу

Досліджено оптичні властивості нанокompatитних матеріалів на основі плазмонних металевих сферичних наночастинок. Продемонстровано, що плазмонні властивості алмазоподібної вуглецевої плівки з диспергованими в неї наночастинами срібла можна теоретично моделювати за допомогою теорії Мі, якщо концентрація частинок є низькою, і теорією Максвелла-Гарнетта для більш високих концентрацій.

Показано, що поглинання нанокompatитних плівок чутливе до дійсної та уявної частин діелектричної проникності алмазоподібної вуглецевої плівки, і при оцінці поглинання нанокompatиту на її основі, необхідно враховувати спектральну залежність комплексного показника заломлення. Встановлено, що спектральне положення піку поглинання є більш чутливим до діелектричної

проникності алмазоподібної вуглецевої плівки ніж до радіусу наночастинок (радіус наночастинок менший за 25 нм).

Показано, що за допомогою перенормованої ефективної теорії Максвелла-Гарнетта може бути спрогнозований оптичний відгук нанокompозиту на основі алмазоподібної вуглецевої плівки з диспергованими в неї наночастинками срібла з різними радіусами і морфологією. Встановлено, що розширення спектрів поглинання обумовлені несферичністю наночастинок та взаємодією між ними.

Проведено порівняння чотирьох різних ефективних теорій, що враховують дисперсію розміру та взаємодію між наночастинками для розрахунку ефективного показника заломлення наночастинок золоті, срібла та міді в полімері. Найменший зсув резонансних характеристик отримано для нанокompозиту на основі міді для всіх ефективних теорій. Показано можливість моделювання одного і того ж нанокompозитного матеріалу різними ефективними теоріями в залежності від розміру і концентрації нановключень.

Проведено моделювання оптичних властивостей алмазоподібної вуглецевої плівки, з диспергованими в неї наночастинками срібла, в залежності від температури відпалу. Встановлено, що поряд з дрібними з'являються великі металеві нанокластери несиметричної форми в результаті відпалу. Показано, що після відпалу нанокompозиту плазмонні піки зміщуються в довгохвильову область і розширюються. Крім того, стають яскраво вираженими квадрупольні додаткові піки поглинання. Зміна спектральних параметрів відпалених нанокompозитних плівок пояснюється зміною розміру та форми наночастинок, зміною відносної діелектричної проникності середовища та збільшенням взаємодії між нанокластерами.

Проведено моделювання субхвильових одновимірних та двовимірних періодичних структур на основі нанокompозиту для застосування їх в якості сенсорних елементів. Підвищення чутливості в одновимірній періодичній структурі може бути досягнуте шляхом збільшення концентрації срібла в нанокompозиті.

Розраховано ефективну діелектричну проникність та спектри поглинання двовимірних періодичних структур на основі нанокompозитного матеріалу (масив nanoотворів в алмазоподібній вуглецевій плівці з диспергованими в неї наночастинками срібла). Показано, що розміщення піку поглинання практично не залежить від зміни геометричних параметрів (період, діаметр nanoотворів), проте, поглинання зменшується зі збільшенням концентрації nanoотворів в зразках. Збільшення концентрації nanoотворів приводить до зменшення періоду.

## РОЗДІЛ 7. МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОПТИМІЗАЦІЯ СУБМІКРОННИХ СТРУКТУР ЯК ОПТИЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ ДЛЯ ФОТОННИХ СИСТЕМ

### 7.1. Просвітлення ґраткою границі прозорий діелектрик–повітря

Покриття є стандартним способом зменшення відбивання на оптичних поверхнях, однак у деяких випадках потрібні альтернативні рішення. Наприклад, для застосувань в інфрачервоній області спектра товщина осаджених шарів становить близько декількох мікрометрів. Такі товсті покриття можуть містити внутрішні напруження, що в свою чергу може викликати слабку адгезію поверхні, а така властивість має вирішальне значення, особливо для аерокосмічних виробів, де оптичні компоненти повинні протистояти сильним змінам температури та сильним прискоренням швидкості. Крім того, продуктивність товстих покриттів може також впливати на поглинання. В цьому випадку ґраткові структури є високоефективним альтернативним способом зменшення відбивання [480]. Добре відоме просвітлення границі прозорий діелектрик–повітря додатковим шаром з показником заломлення  $n = \sqrt{n_d}$  та товщиною  $\lambda = \lambda_0 / 4n_d$ , де  $n_d$  – показник заломлення прозорого діелектрика,  $\lambda_0$  – базова довжина хвилі, на якій коефіцієнт відбивання від просвітленого діелектрика повинен бути рівним нулю. Цей метод одношарового просвітлення не завжди можна точно реалізувати практично, оскільки неможливо підібрати матеріал просвітлювального покриття з потрібним показником заломлення. Особливо це стосується прозорих діелектриків з показником заломлення меншим за 1,9. Тому для просвітлення використовують двошарові та багатошарові покриття, які описані в численних публікаціях та монографіях, і ці методи практично стали класичними [481].

В даній частині роботи розглянемо можливості просвітлення поверхонь прозорий діелектрик–повітря з використанням діелектричних ґраток, сформованих на поверхні прозорого діелектрика. Тут маємо дві можливості: просвітлення з допомогою діелектричної ґратки з прямокутним профілем, просвітлення ґраткою зі спеціальним рельєфом. Варто зазначити, що перший

метод еквівалентний одношаровому покриттю, а другий – багатшаровому покриттю, точніше сказати, просвітленню перехідним шаром з оптимальною зміною показника заломлення. Просвітлення ґраткою з прямокутним рельєфом реалізується найкраще при періоді  $\Lambda$ , який набагато менший базової довжини хвилі  $\lambda_0$ . В цьому випадку на основі виразів, наведених в роботі [482], можна розрахувати коефіцієнти заповнення ґратки для хвиль ТЕ і ТМ поляризацій:

$$F = \frac{\bar{\varepsilon} - \varepsilon_{21}}{\varepsilon_{22} - \varepsilon_{21}}, \quad (7.1)$$

$$F = \frac{\varepsilon_{22}(\varepsilon_{21} - \bar{\varepsilon})}{\bar{\varepsilon}(\varepsilon_{21} - \varepsilon_{22})}, \quad (7.2)$$

де  $\bar{\varepsilon}$  – еквівалентне значення діелектричної проникності, і вона чисельно повинна бути рівна:  $\bar{\varepsilon} = n^2 = n_d$ ,  $\varepsilon_{22}$  – більша діелектрична проникність матеріалу ґратки,  $\varepsilon_{21}$  – менша діелектрична проникність матеріалу ґратки, можна прийняти, що вона рівна 1. Отже, за останніми виразами можна розрахувати коефіцієнти заповнення ґратки. Маючи показник заломлення (діелектричну проникність  $\varepsilon_d$ ) прозорого діелектрика, який потрібно просвітлити на базовій довжині хвилі  $\lambda_0$ , можна знайти  $\bar{\varepsilon} = \sqrt{\varepsilon_d}$  та товщину еквівалентного діелектричного шару  $d$ , який рівний товщині діелектричної ґратки. По можливості ґратку можна робити на самій просвітлювальній поверхні. Нехай  $\varepsilon_d = 2,25$ ,  $\varepsilon_{22} = 2,25$ ,  $\varepsilon_{21} = 1$ ,  $\lambda_0 = 1,5$  мкм, тоді  $\bar{\varepsilon} = 1,5$ ,  $d = 0,3062$  мкм, коефіцієнти заповнення  $F$  для хвиль ТЕ і ТМ поляризацій відповідно рівні 0,4 і 0,6. Для цих даних на рис. 7.1а наведені спектральні залежності коефіцієнта відбивання від просвітленої поверхні діелектрика. Маленькі кільця відповідають хвилям ТЕ поляризації, маленькі квадратики – хвилям ТМ поляризації, а неперервна крива отримана на основі одношарового просвітлювального покриття з показником заломлення 1,225 при товщині  $d = 0,3062$  мкм. Очевидно, що такий показник заломлення неможливо реалізувати в однорідному шарі. Бачимо, що три криві накладаються одна на одну, що свідчить про правильність наведених розрахунків. Тим часом не можна

для обох поляризацій отримати якісне просвітлення одною ґраткою, оскільки вони вимагають різних коефіцієнтів заповнення. Таким чином, спектральні залежності, які наведені на рис. 7.1а, практично не можна реалізувати. Тому проведені розрахунки для  $F = 0,5$  для тих самих діелектричних сталей, а еквівалентна діелектрична стала ґратки  $\bar{\epsilon}$  розраховувалась за формулою для ТЕ поляризації [5]. Згідно цієї формули  $\bar{\epsilon} = 1,625$ . Відповідна товщина ґратки згідно виразу  $d = \lambda_0 / \bar{\epsilon}$  рівна 0,2942 мкм. Відповідні спектральні залежності наведені на рис. 7.1б. Неперервна крива відповідає хвилям ТМ поляризації, точки – хвилям ТЕ поляризації, а квадратики розраховані при просвітленні однорідним шаром товщиною 0,272 мкм з показником заломлення 1,38. Як випливає з рис. 7.1б, діелектричною ґраткою з прямокутним рельєфом практично можна забезпечити низький коефіцієнт відбивання одночасно для обох поляризацій, і він суттєво нижчий ніж при просвітленні однорідним шаром, коли повне просвітлення однорідним шаром реалізувати неможливо. Просвітлення діелектричною ґраткою можна отримати не обов'язково за умови, що  $\Lambda \ll \lambda_0$ , але і у випадку  $\Lambda < \lambda_0 / n_d$ , але в цьому випадку втрачається простота наведених співвідношень для розрахунків. Проте, ці співвідношення, які стосуються еквівалентного шару, можна використати для наближених обчислень, навіть коли  $\Lambda$  в 2 ÷ 3 рази менший за  $\lambda_0$ .

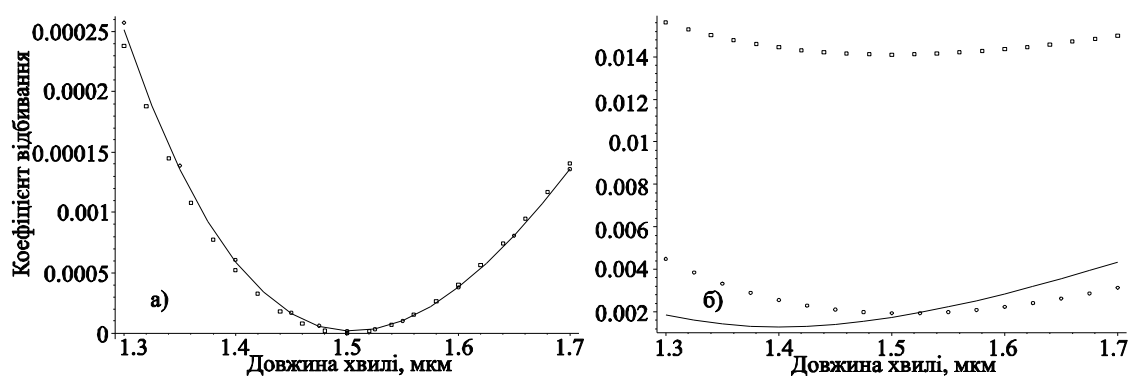


Рис. 7.1. Спектральна залежність коефіцієнта відбивання від просвітленої поверхні діелектрика  $\Lambda = 0,3$  мкм

Мабуть слід очікувати, що просвітлення ґраткою з прямокутним рельєфом технологічно важко реалізувати в оптичному діапазоні. Проте цим методом можна скористатись при виготовленні деталей з прозорого пластику методом штампування, якщо вони повинні функціонувати в далекому ІЧ чи НВЧ діапазонах. Тобто, виготовлення деталі та просвітлювального покриття можна реалізувати за один цикл.

Просвітлення границі прозорий діелектрик-повітря можливо реалізувати за допомогою рельєфної ґратки, наприклад, з трикутним профілем. В цьому випадку можна вважати, що діелектрична стала в межах товщини ґратки змінюється плавно від  $\varepsilon_1 = \varepsilon_{1d}$  до  $\varepsilon_3 = 1$ , і, отже, можна очікувати низького коефіцієнта відбивання від границі двох середовищ. Але просвітлення з допомогою ґратки можливе на таких довжинах хвиль, на яких відсутнє поширення  $\pm 1$ -их та вищих дифракційних порядків в однорідних середовищах у вигляді плоских хвиль. Іншими словами, повинна виконуватись умова  $\Lambda < \lambda / \max(\sqrt{\varepsilon_3}, \sqrt{\varepsilon_1})$ . Аналіз ґраткової структури проводився при таких даних:  $\Lambda = 1$  мкм,  $\lambda > 1,5$  мкм,  $\varepsilon_1 = 2,25$ ,  $\varepsilon_3 = 1$  для трьох товщин ґратки - 1, 2 та 3 мкм. Але спершу проведено дослідження коефіцієнта відбивання в залежності від кількості врахованих зв'язаних хвиль  $N$  та від числа шарів  $M$ , на які ділиться товщина ґратки  $d$ . Числовий аналіз показав, що при  $N = 21$  та  $M = 100$  маємо вже стабільні результати, які практично не залежать від  $N$  та  $M$  [483]. На рис. 7.2 наведені залежності коефіцієнта відбивання від довжини хвилі для ґратки (суцільні криві). Цифри біля кривих вказують товщину ґратки в мкм. Великі кола на кривій 1 відображають коефіцієнт відбивання при поширенні електромагнітних хвиль із середовища з  $\varepsilon_3$  в середовище з  $\varepsilon_1$ . Числовий розрахунок показав повне співпадіння коефіцієнтів відбивання та пропускання для обох випадків, тобто отримано повну взаємність. Криві, які відображені малими кільцями, показують спектральну залежність коефіцієнта пропускання, коли границя між діелектриками з  $\varepsilon_1 = 2,25$  та  $\varepsilon_3 = 1$  заповнена перехідним



шаром, діелектрична стала якого змінюється лінійно від координати  $z$  від  $\varepsilon_1 = 2,25$  до  $\varepsilon_3 = 1$ .

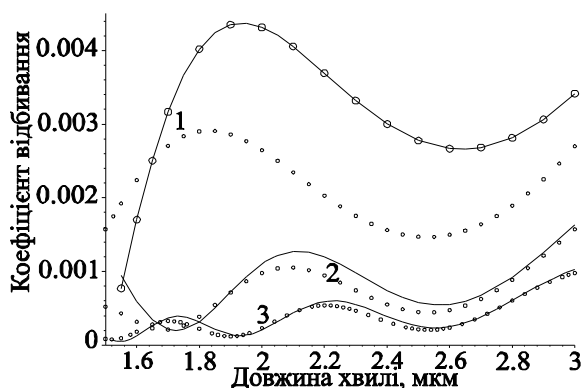


Рис. 7.2 Спектральна залежність коефіцієнта відбивання при просвітленні з допомогою ґратки з трикутним профілем, ТЕ поляризація

Бачимо, що при товщині перехідного шару 3 мкм обидві криві практично співпадають. Закон збереження енергії виконується краще ніж  $10^{-10}$ .

Отже, просвітлення ґраткою знімає обмеження на показник заломлення прозорого діелектрика. Однак, повне просвітлення за допомогою ґратки можна отримати лише для окремої поляризації світла. Параметри ґраток для різних поляризацій дещо відрізняються. Вони можуть бути компромісними для обох поляризацій, а просвітлення буде ефективнішим, ніж просвітлення однорідним шаром. Ґраткове просвітлення можна ефективно використати у далекій ІЧ- та НВЧ-ділянках спектру, оскільки деталь та просвітлювальну структуру можна виготовити за один технологічний цикл з прозорого пластичного матеріалу.

## 7.2. Періодичні мікроструктури для синтезу сенсорних оптичних елементів

Моделювання та дослідження взаємодії світла з металевими та діелектричними мікро- і наноструктурами відкриває можливості для розроблення нових функціональних пристроїв та компонентів для сенсорного застосування. Сенсори на основі ґраток, як правило, менш чутливі, ніж сенсори на основі металевих плівок. Їх резонансний кут і довжина хвилі сильно залежать від параметрів ґратки, зокрема, від періоду та фактору заповнення [484, 485]. У

спробах покращення роботи сенсорів, особливо в плані підвищення їх чутливості, теоретичні та експериментальні дослідження все ще ведуться.

### **7.2.1 Оптичні сенсорні на основі металізованих прямокутних ґраток**

В даній частині роботи здійснено теоретичне моделювання кутових характеристик металізованих прямокутних ґраток (полікарбонатні ґратки, покриті шаром золота) та оптимізація їх геометричних параметрів для застосування в області видимого спектра. Ми досліджували прямокутні полікарбонатні ґратки, виготовлені за стандартною технологією райдужних голограм на тонкій плівці полікарбонату (показник заломлення 1,59) методом тиснення [486] з фіксованою глибиною ґратки 0,3 мкм та різним періодом в межах від 0,4 мкм до 10 мкм. На поверхню ґраток методом термічного розпилення у вакуумі наносили тонкий шар золота. Золото використовувалося як металеве покриття, оскільки сенсорні на основі ґраток із золота, що працюють на основі явища поверхневого плазмонного резонансу, показують високу чутливість до зміни показника заломлення при кутовому детектуванні [487]. Для розрахунків використано показник заломлення золота  $0,18377 - i3,4313$  для довжини хвилі 0,6328 мкм з роботи [333].

Для точного розрахунку параметрів ґраток з покриттям необхідно задавати форму покриття, якнайточніше наближену до реальної. В ідеальному випадку нанесена металева плівка мала би повністю повторювати рельєф поверхні та мати всюди однакову товщину. Проте, інший крайній випадок передбачає, що плівка осідає лише на горизонтальних поверхнях, і товщина плівки не впливає на ступінь заповнення ґратки. В нашій роботі будемо розглядати ці два типи ґраток. Спершу дослідимо модель, що відповідає рівномірному осадженню плівки. На рис. 7.3 наведено розраховані залежності коефіцієнта відбивання нульового порядку дифракції від кута падіння променя за відсутності металевої плівки. Параметри падаючого випромінювання: довжина хвилі  $\lambda = 0,6328$  мкм; ТМ-поляризація. З рисунка добре видно, що без металевих покриттів на ґратці відсутні резонансні явища.

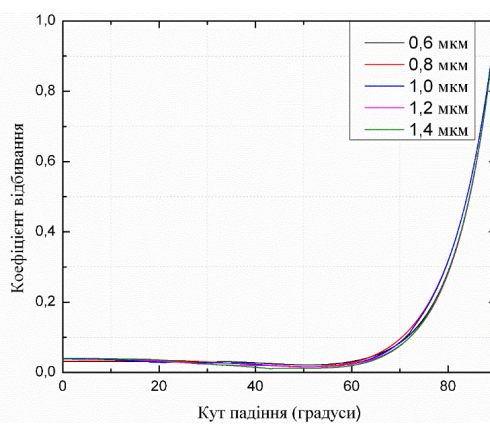


Рис. 7.3. Залежність коефіцієнта відбивання нульового порядку дифракції від кута падіння для прямокутних дифракційних ґраток з полікарбонату для різних періодів

На наступному етапі проведено дослідження залежності коефіцієнта відбивання від товщини шару золота. Розрахунки проведено для моделі рівномірного осадження плівки. Товщина шару золота, при якій значення коефіцієнта відбивання мінімальне, для ґратки з періодом 0,6 мкм складає 78 нм (рис. 7.4а). Для даної ґратки мінімальний коефіцієнт відбивання спостерігається при куті падіння  $1,725^\circ$  (рис. 7.4б).

Такого ж типу моделювання проведено для періодів ґратки 0,8 мкм (рис. 7.5а,б), 1,0 мкм (рис. 7.5в,г), 1,2 мкм (рис. 7.5д,е). У всіх випадках дослідження залежності коефіцієнта відбивання від кута падіння товщина золотої плівки використана 50 нм.

Аналогічні розрахунки було проведено для дифракційних ґраток з металевим покриттям, осадженим лише на горизонтальних поверхнях. Результати моделювання показали, що в такому випадку спектральна характеристика ґратки суттєво відрізняється.

На рис. 7.6 наведено кутові залежності коефіцієнта відбивання нульового порядку для прямокутних ґраток з рівномірно осадженим шаром золота (рис. 7.6а) та осадженим лише на горизонтальній поверхні (рис. 7.6б). Як видно з рисунка, спосіб задання покриття суттєво впливає на результати моделювання. Порівняння теоретичних розрахунків з експериментальними дослідженнями

дозволять визначити, яка із моделей задання покриття найбільше відповідає реальним результатам.

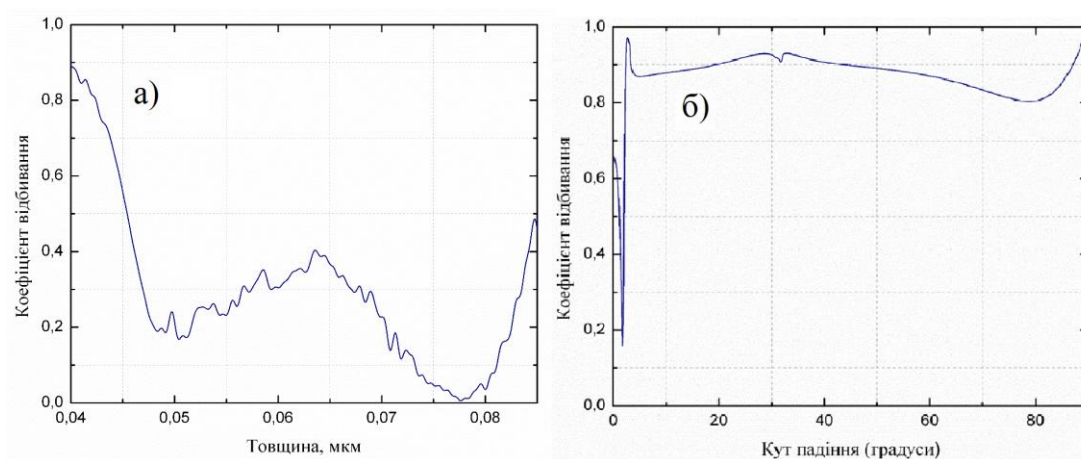


Рис. 7.4. Залежність коефіцієнта відбивання нульового порядку дифракції від товщини шару золота для полікарбонату,  $\Lambda=0,6$  мкм (а) та від кута падіння променя для полікарбонату (період  $\Lambda=0,6$  мкм, товщина плівки золота  $t=50$  нм)

Також варто окремо розглянути резонансний провал, що відповідає куту  $35,555^\circ$  для дифракційної ґратки з періодом  $0,8$  мкм. Він більш яскраво виражений, ніж той провал, який ми досліджуємо для різних періодів (див. рис. 7.5 і 7.6).

Ми отримали мінімальний коефіцієнт відбивання для товщини золота в діапазоні від  $0,050$  мкм до  $0,060$  мкм для ґратки з осадженням золота лише на горизонтальній поверхні [488]. Таким чином, товщина плівки золота в цьому діапазоні буде оптимальною.

Для перевірки отриманих результатів проведено розрахунок спектрів відбивання від кута падіння хвилі для прямокутної ґратки, покритої золотом товщиною  $55$  нм.

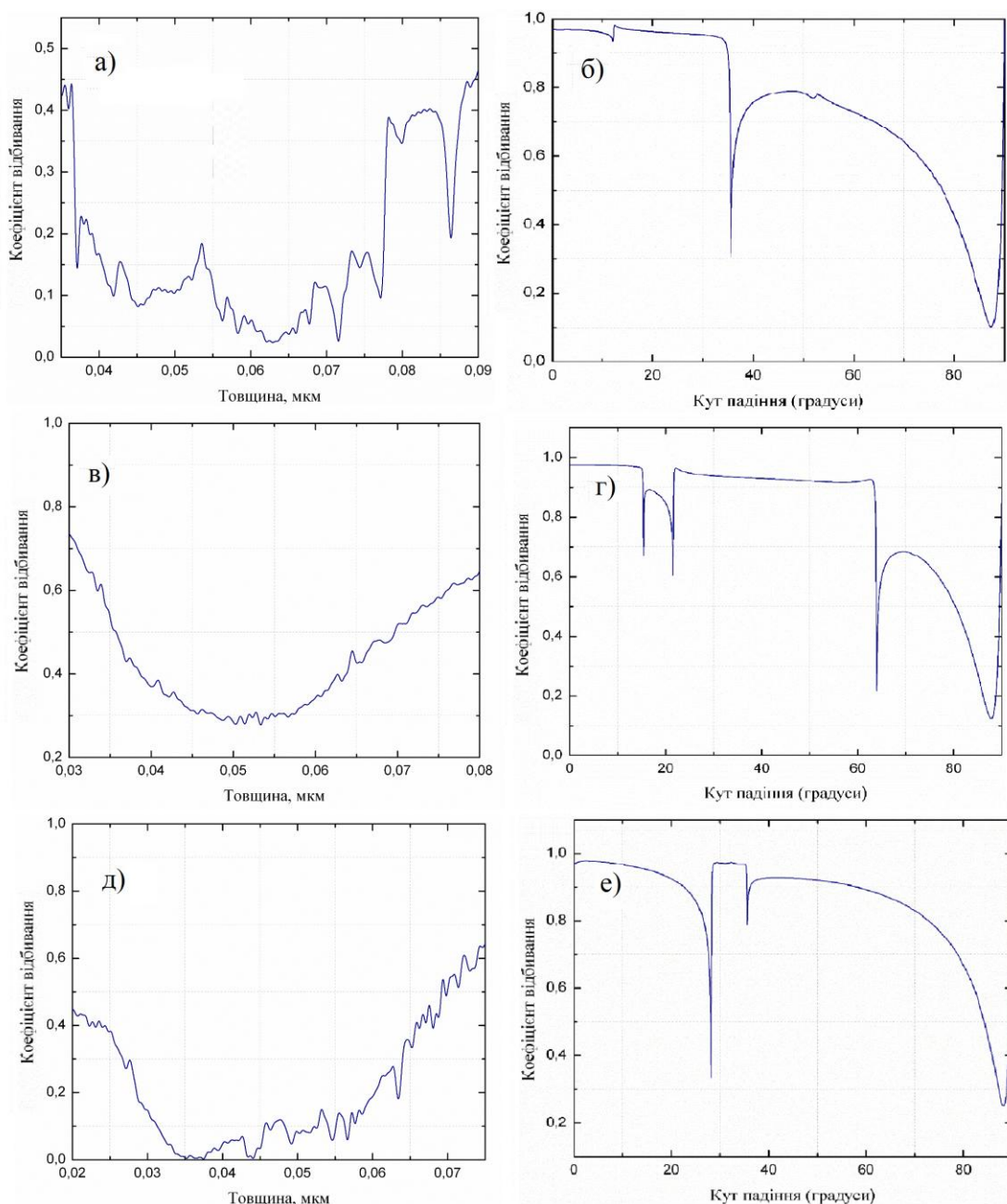


Рис. 7.5. Залежність коефіцієнта відбивання нульового порядку дифракції від товщини шару золота та від кута падіння для полікарбонатної металізованої ґратки.

Структурні параметри ми вибираємо, як у попередньому випадку. Результати розрахунків представлені на рис. 7.7. Ми отримали дуже вузьку глибину мінімального відбивання з амплітудою 0,02 для кута падіння 35,52, що чітко видно на рис. 7.7

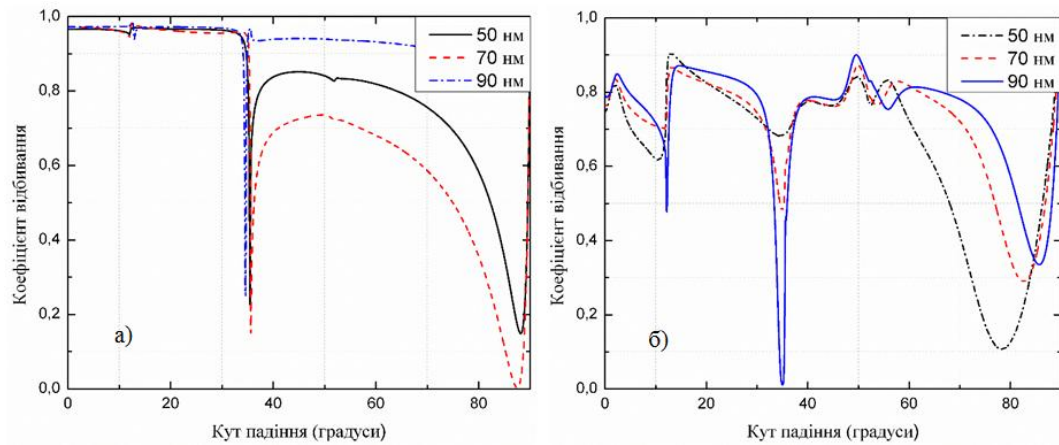


Рис. 7.6. Залежність коефіцієнта відбивання нульового порядку дифракції від кута падіння для прямокутних ґраток з рівномірним шаром золота (а) та нанесенням лише на горизонтальні поверхні (б)

Наступним кроком є дослідження спектральних характеристик запропонованих ґраткових структур як сенсорних елементів. Чутливість оптимізованої структури можна оцінити шляхом зміни кута резонансу, ширини кривої ПППР та різниці показників заломлення чутливого шару.

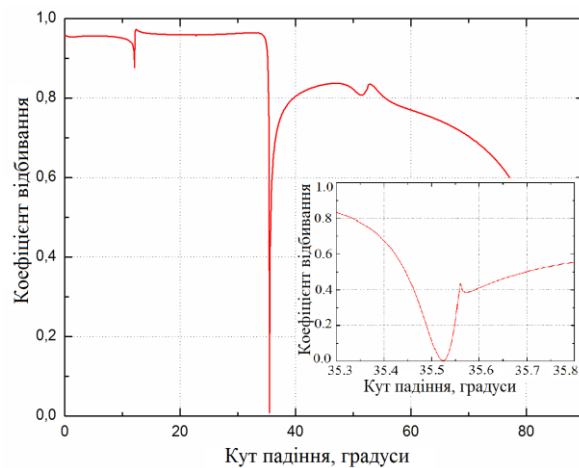


Рис. 7.7. Залежність коефіцієнта відбивання нульового порядку дифракції від кута падіння для металізованої ґратки ( $t = 55$  нм,  $\Lambda = 0,8$  мкм)

Для дослідження чутливості запропонованої металізованої ґратки визначено залежність значення кута поверхневого плазмонного резонансу від

показника заломлення навколишнього середовища, зокрема, для повітря, метану, парів ртуті, сірководню та хлору (рис. 7.8).

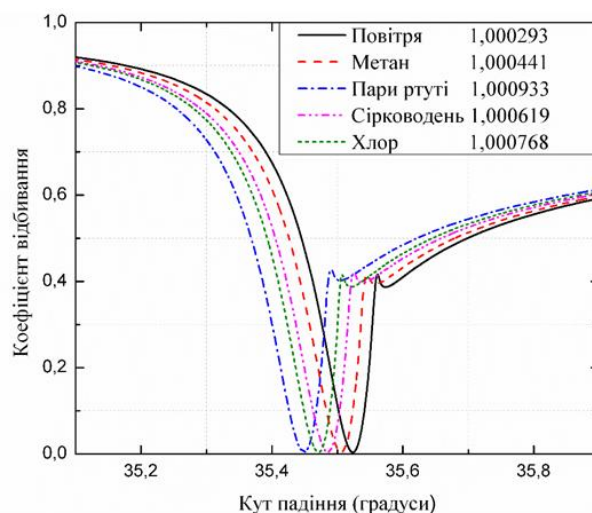


Рис. 7.8. Залежність коефіцієнта відбивання нульового порядку дифракції від кута падіння променя на ґратку  $\Lambda=0,8$  мкм,  $d=55$  нм для різних газових середовищ

Отже, результати дослідження показали, що прямокутна полікарбонатна ґратка, покрита золотом, з періодом  $0,8$  мкм має невисоку чутливість при вибраній товщині металевих покриттів і для підвищення чутливості такого сенсора на ґратці необхідно знайти оптимальну кореляцію між періодом, глибиною модуляції ґратки та оптимальним профілем поверхні ґратки.

### 7.2.2. Оптимізація та виготовлення сенсорного елемента на основі рельєфних ґраток

Як зазначалось вище, збільшити чутливість плазмонних сенсорів на основі ґраток можна, наприклад, за допомогою металевих або діелектричних ґраток на призмі; використовуючи двошарові металеві ґратки, діелектричні ґратки з металевими покриттями, ґратки на основі композитних матеріалів та інших. Крім того, чутливість сенсора на основі ґратки може бути підвищена шляхом оптимізації геометричних параметрів ґраток, таких як період, глибина, коефіцієнт заповнення та форми рельєфу. Наприклад, у роботі [489] було

показано, що оптимізація параметрів прямокутної металевої ґратки дозволила підвищити чутливість більше ніж у 3 рази у порівнянні зі звичайним сенсором. Мотивовані цими ідеями, ми розглядаємо комбінацію таких заходів: оптимізація геометричних параметрів та застосування спеціальної структури, а саме - двошарової ґратки для отримання високочутливого сенсорного елемента. Нами та іншими авторами було показано, що дифракційна ґратка на основі арсеніду галію (GaAs), покритого тонкою плівкою золота (Au), має поглинання у видимій ділянці спектру [490, 491]. Спостережуване підсилення поглинання, коли центральна довжина хвилі налаштовується зміною геометричних параметрів ґратки, може бути корисним для застосування в сенсорах.

У цій частині роботи для отримання максимальної дифракційної ефективності ґратки, покритої шаром золота, ми оптимізували її геометричні параметри за допомогою асимптотично точного методу зв'язаних хвиль. Слід зазначити, що всі дослідження проведені для ТМ-поляризації, оскільки для цієї поляризації чітко спостерігається поверхневий плазмон-поляритонний резонанс. Структура чутливого елемента сенсора на основі синусоїдальної дифракційної ґратки схематично показана на рис. 7.9.

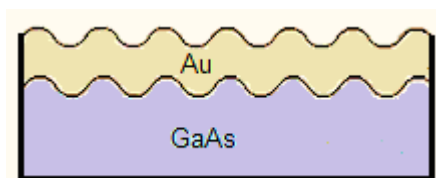


Рис. 7.9. Структура чутливого елемента сенсора на основі синусоїдальної дифракційної ґратки

Вибір Au і GaAs як матеріалів структури пояснюється тим, що золото є корозійно стійким і не чутливим до окислення матеріалом [333]. Більше того, золото є найбільш придатним для використання у видимому спектрі, що часто корисно, особливо для хімічних сенсорів. GaAs - це добре відомий та досліджений матеріал, який широко використовується для різних застосувань, таких як напівпровідникові прилади, багат шарові структури тощо [491]. Сенсорний елемент на основі ґратки був створений з використанням отриманих



оптимізованих параметрів. Дифракційні ґратки були створені методом інтерференційного фотостимульованого травлення GaAs, а потім на поверхню ґратки наносився шар золота методом термічного розпилення у вакуумі [492].

Чутливість сенсора залежить від ефективності збудження поверхних плазмон-поляритонів і може бути збільшена шляхом вибору оптимальних параметрів дифракційної ґратки та параметрів металевого покриття. Таким чином, першим кроком нашого дослідження є моделювання та оптимізація геометричних параметрів дифракційної ґратки із золотим покриттям для отримання максимальної дифракційної ефективності.

Результати моделювання залежностей коефіцієнта відбивання від кута падіння показали, що мінімум відбивання спостерігається для дифракції нульового порядку, якщо кут падіння променя на синусоїдальну ґратку з чистих GaAs і Au рівний  $35^\circ$  [492]. Таким чином, можна припустити, що спектральна характеристика структури ґратки, що складається з цих двох матеріалів, може мати низький коефіцієнт відбивання.

Перший параметр, який суттєво впливає на збудження ППП на поверхні активного елемента сенсора – це довжина хвилі збудження. Отже, першим кроком нашого дослідження було моделювання залежностей коефіцієнта відбивання від кута падіння пучка для різних довжин хвиль в діапазоні від 400 нм до 1064 нм (див. рис. 7.10а). Ці довжини хвиль відповідають реальним джерелам електромагнітного випромінювання. З рис. 7.10 видно, що кут плазмонного резонансу збільшується при зменшенні довжини хвилі збудження. Всі наші наступні дослідження були проведені для довжини хвилі 633 нм через доступність лазерів і зручність роботи з видимими пучками. Тому наступним кроком є знаходження оптимального періоду ґратки для цієї довжини хвилі. Моделювання проводились для таких періодів: 800 нм, 1000 нм, 1200 нм та 1400 нм, відповідно. Дифракційна ґратка з періодом  $\Lambda=1200$  нм відповідає найбільш оптимальним умовам збудження поверхневого плазмонного резонансу на довжині хвилі 633 нм (див. рис. 7.10б).

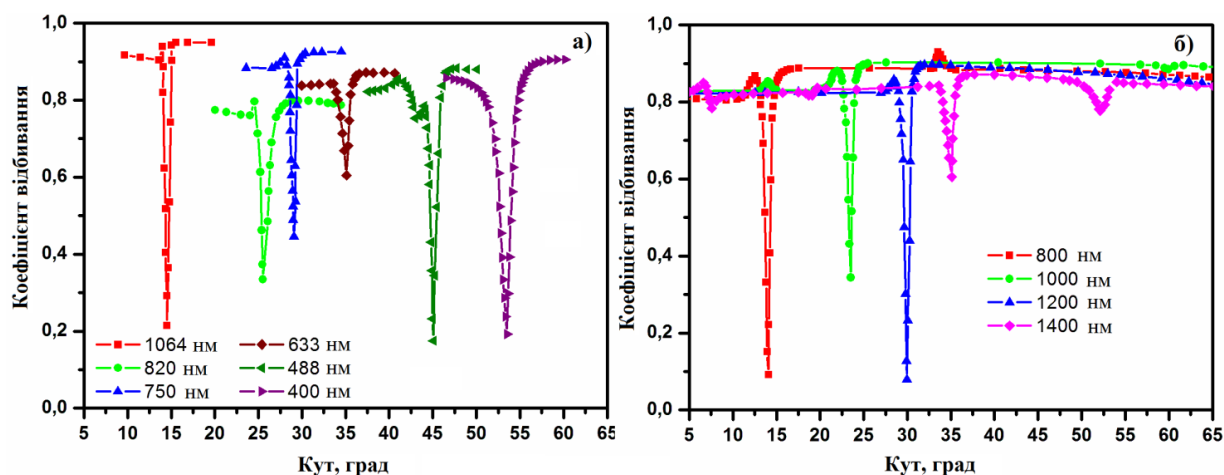


Рис. 7.10. Залежності коефіцієнта відбивання в нульовому порядку дифракції від кута падіння для синусоїдальних GaAs-Au ґраток для різних довжин хвиль джерела світла при постійному періоді ґратки 1400 нм (а) та для різних періодів ґратки при постійній довжині хвилі джерела світла  $\lambda = 633$  нм (б).

Залежність дифракційної ефективності від глибини модуляції з максимумом на рівні 120 нм була отримана в результаті моделювання синусоїдальної GaAs ґратки з Au-покриттям з періодом 1200 нм. Результати дослідження впливу товщини шару золота на оптичні характеристики сенсора показали, що для періоду ґратки 1200 нм при довжині хвилі збудження 633 нм оптимальною є товщина шару золота близько 45-50 нм. Отже, оптимальні параметри структури є такі: довжина хвилі збудження  $\lambda=633$  нм; період ґратки  $\Lambda=1200$  нм; товщина ґратки  $d=120$  нм, товщина шару золота 45-50 нм.

Наступним кроком нашого дослідження стало вивчення оптимізованої структури як сенсорного елемента давачів для виявлення невеликих змін показника заломлення досліджуваного середовища. Отримано кутову залежність коефіцієнта відбивання нульового порядку дифракції для різних показників заломлення досліджуваного середовища, таких як газові середовища (рис. 7.11а) та рідкі середовища (рис. 7.11б).

Показник заломлення змінювався від 1,000 до 1,030 з кроком 0,01 для газових середовищ та від 1,32 до 1,37 для рідких середовищ. Розрахована

чутливість представленого сенсорного елемента рівна  $\Delta\Theta/\Delta n = 55,56$  для газових середовищ і  $\Delta\Theta/\Delta n = 66,67$  для рідких середовищ.

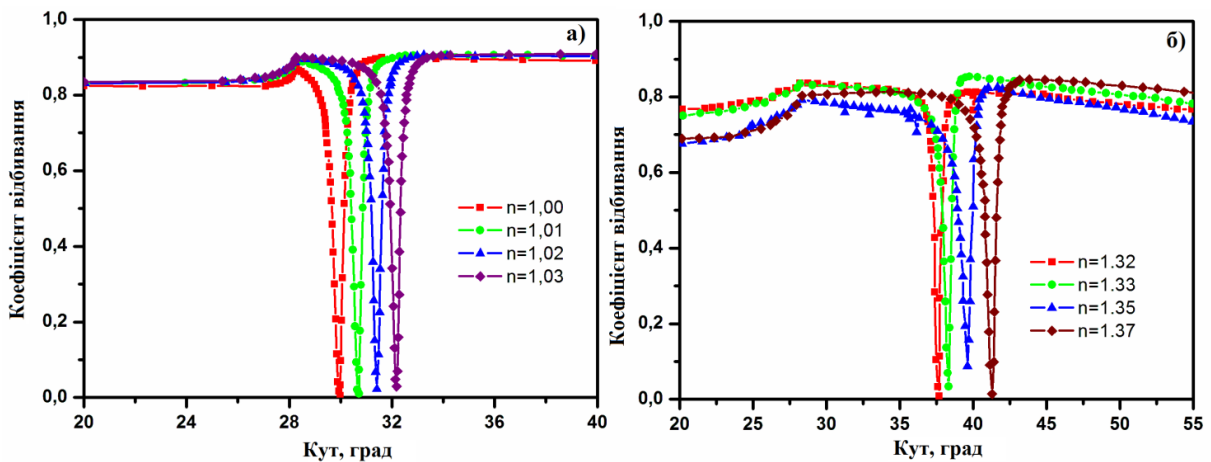


Рис. 7.11. Залежність коефіцієнта відбивання від кута падіння лазерного променя для ґратки з наступними параметрами:  $\lambda = 633$  нм,  $\Lambda = 1200$  нм,  $d = 120$  нм при різних показниках заломлення досліджуваного газового середовища (а) та рідких середовищ (б)

Зміна показника заломлення у четвертому знаку після коми може бути зареєстрована за допомогою кутомірного пристрою з чутливістю не гірше  $0.1^\circ$ . З рис. 7.11 видно, що запропонований сенсорний елемент чутливіший до зміни показника заломлення рідких середовищ, ніж до зміни показника заломлення газових середовищ.

У цій частині роботи ми порівнюємо результати числового моделювання та експериментальні спектри відбивання. Оптична схема для запису ґраток методом фотостимульованого травлення GaAs показана на рис. 7.12, де інтерференційна картина необхідного періоду проектується на поверхню пластини GaAs. Для запису ґраток використано Nd:YAG-лазер на другій гармоніці ( $\lambda = 532$  нм). Період інтерференційної картини залежить від кута між інтерференційними пучками, необхідний кут виставляється з допомогою дзеркалам 5 та 6. Контроль стабільності інтерференційних смуг у процесі експозиції здійснювали візуально за допомогою додаткової інтерференційної картини великого періоду, яка проектувалась на екран 12. Ця інтерференційна

картина формується за допомогою додаткового інтерферометра Майкельсона (елементи 8, 11, 9, 10). Оптимальний час фототравлення ґратки визначався експериментально в процесі травлення з допомогою пучка тестуючого лазера ( $\lambda=633$  нм), що падав на ґратку під кутом Брегга для цієї довжини хвилі. Експонування припинялось, коли інтенсивність дифрагованого пучка тестуючого лазера на створюваній ґратці досягала максимуму.

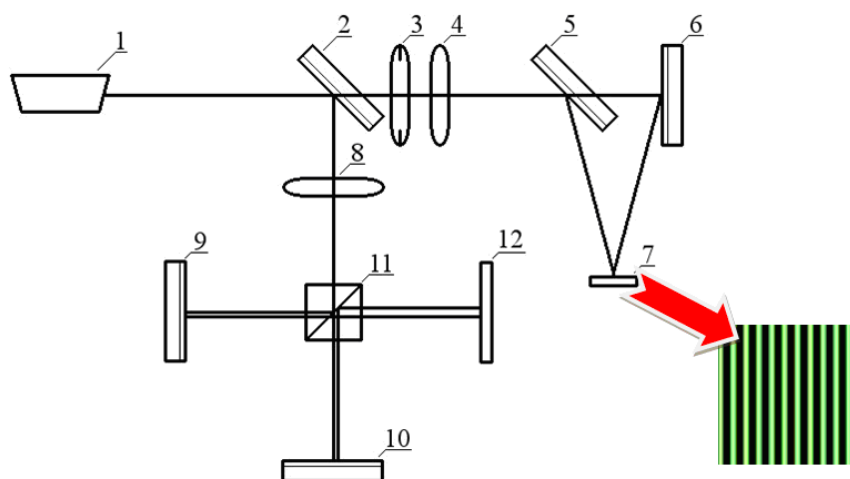


Рис. 7.12. – Схема для виготовлення дифракційних ґраток методом фотостимульованого травлення з контролем стабільності інтерференційної картини: 1 - Nd:YAG-лазер, 2 – світлоподільна пластина, 3 – поляризатор, 4 і 8 – лінзи; 5, 6, 9, 10 – дзеркала; 7 – пластинка GaAs, 11 – світлоподільний кубик, 12 – екран.

Для формування рельєфу на GaAs методом фотостимульованого травлення використано травник  $\text{H}_2\text{SO}_4:\text{H}_2\text{O}_2:\text{H}_2\text{O}$  у співвідношенні 1:1:40. Перед експонуванням пластини GaAs промивались у гарячому ацетоні, далі у дистильованій воді, розчині 12% HCl та знову у дистильованій воді. Після завершення фототравлення ґраток вони промивались у дистильованій воді та сушилися на повітрі. Глибина отриманого поверхневого рельєфу залежить від наступних факторів: контраст інтерференційної картини, час експонування, концентрація травника, орієнтація кристалографічних осей GaAs відносно інтерференційних смуг. Змінюючи параметри технологічного процесу

виготовлення ґраток, можна отримувати дифракційні ґратки з керованою глибиною модуляції поверхні від 50 нм до 160 нм. Поверхня ґратки досліджувалась з допомогою атомно-силового мікроскопу (рис. 7.13).

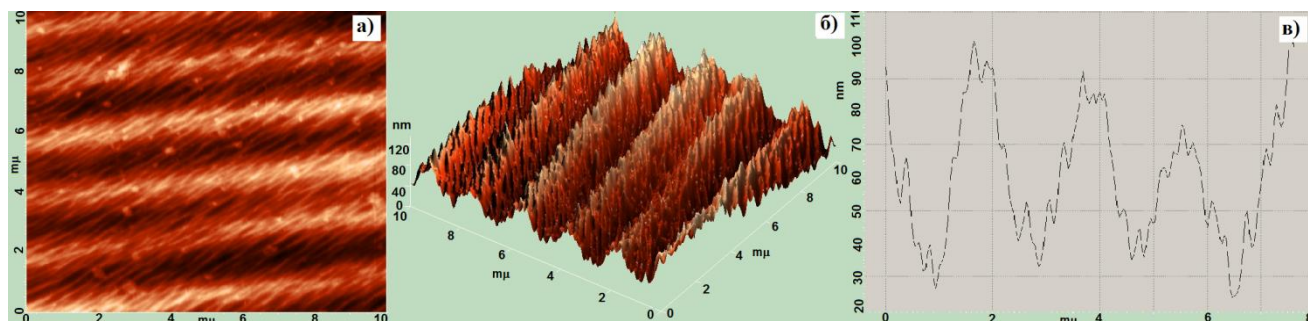


Рис. 7.13. Топографія ґратки GaAs (а), просторове зображення ґратки на GaAs (б) та її переріз (в).

На наступному етапі на поверхню ґратки методом термічного розпилення у вакуумі наносився шар золота. Товщина золотої плівки становила близько 50 нм. Топографію ґратки GaAs з Au та її просторове зображенням показано на рис. 7.14. Ця ґратка має період приблизно 1200 нм, загальна товщина всієї структури становить приблизно 120 нм.

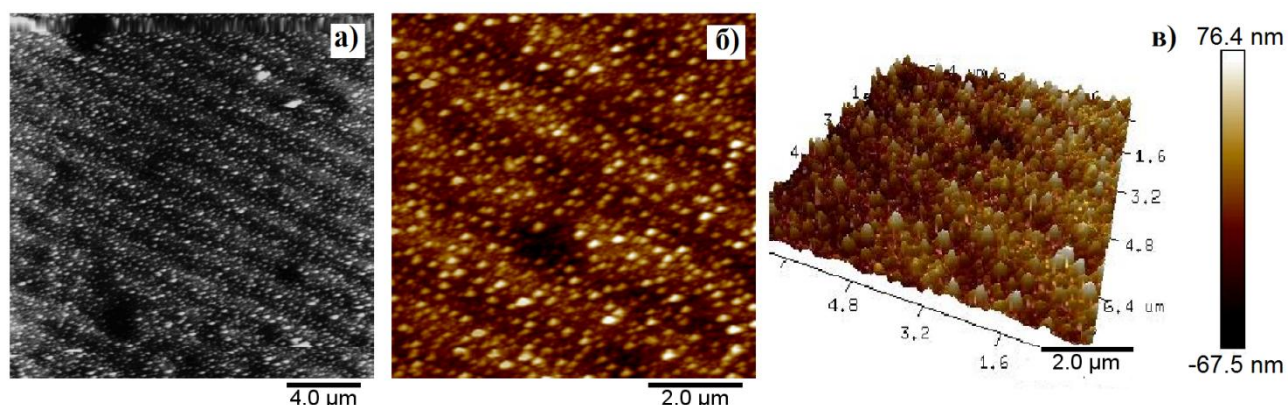


Рис. 7.14 Топографія GaAs-Au ґратки (а,б), просторове зображення GaAs-Au ґратки (в).

Теоретичні та експериментальні результати залежності коефіцієнта відбивання від кута падіння лазерного променя наведені на рис. 7.15. Результати

моделювання показали, що для довжини хвилі збудження 633 нм очікується пік ПППР для кута 29,9 градуса. Експериментальні результати показали, що пік ПППР спостерігається при 30,1 градуса. Таким чином, в експериментальних спектрах спостерігається незначне неспівпадіння положення піку ПППР у порівнянні з результатами моделювання. Така різниця між очікуваним оптичним відгуком та експериментально отриманим може бути викликана певними відхиленнями структурних параметрів ґратки при її виготовленні. Для аналізованої структури невідповідність між експериментальними та теоретичними положеннями піку ПППР в спектрах відбиття може бути пояснено неоднорідністю ґратки GaAs (див. рис. 7.13) і ґратки GaAs з шаром Au (див. рис. 4.15) або варіацією періоду та товщини ґраткової структури. Крім того, існує різниця в амплітуді коефіцієнта відбивання для теоретичної та експериментальної кривих.

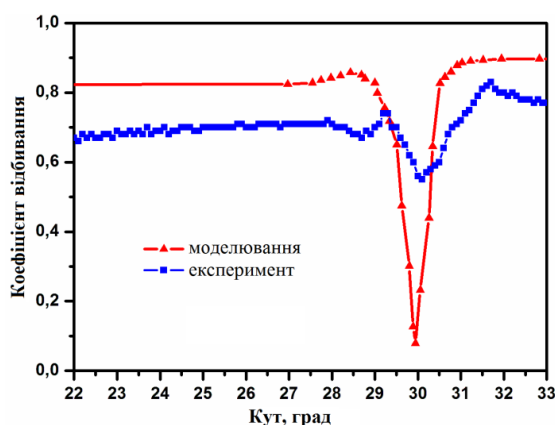


Рис. 7.14. Залежність коефіцієнта відбивання від кута падіння лазерного променя: порівняння теоретичних і експериментальних результатів

Експериментальні результати показують, що коефіцієнт відбивання структури при резонансі становить близько 55%. Ця відносно невисока ефективність GaAs-Au ґратки пов'язана з недосконалістю ґратки та втратами в ній. Хоча ефективність виготовленого пристрою відносно низька, він може використовуватись в резонансних сенсорних пристроях, оскільки висока ефективність не є неодмінною умовою застосування плазмонних резонансних

сенсорів, а ключовим є зміщення кута резонансу при зміні показника заломлення навколишнього середовища.

### **7.3. Моделювання та оптимізація субмікронних структур для застосування в раманівській спектроскопії**

Раманівська спектроскопія (поверхнево-підсилена КРС) є дуже чутливим і ефективним методом вивчення будови макромолекул і їх конформаційних змін, ідентифікації і визначення дуже малих кількостей речовини, що важливо для фармації, екології, аналітичної хімії, біосенсорики, біомедичної діагностики та наномедицини [493]. Одним із способів підсилення раманівського сигналу є використання спеціально спроектованих КРС-підкладок. КРС-підкладки дозволять значно збільшити чутливість при виявленні речовин в ультрамалих кількостях, що важливо як для матеріалів, які вже використовуються, так і для тих, які буде синтезовано для різних галузей науки, виробництва і життєдіяльності людей, зокрема хімії, матеріалознавства, медицини, біології, розробки та контролю якості ліків, в екології, криміналістиці та ін.

Найбільш часто в якості підкладок використовуються золоті, срібні (рідше платинові, паладієві, мідні) шорсткі поверхні або нанопористі плівки, ґратки, фотонні кристали та наночастинки благородних металів, що мають розміри набагато менші за довжину хвилі падаючого світла. Під дією лазерного променя на поверхні таких підкладок виникає сильно локалізоване світлове поле. Підсилення обумовлено двома механізмами - електромагнітним і хімічним.

Підсилення локалізованого електричного поля є найбільш ефективним способом підвищення чутливості КРС. Як відомо, збудження ППР чи ПППР визначається як геометричними, так і оптичними (діелектричними) властивостями металу. У металів в оптичному діапазоні довжин хвиль дійсна частина діелектричної проникності від'ємна і тому світло швидко згасає в об'ємі. Але на межі розділу діелектрик-метал при взаємодії електромагнітної хвилі світла з поверхнею металу може виникати ППП - колективне коливання електронів, яке, потрапляючи в резонанс з електромагнітною хвилею падаючого

світла, призводить до різкого підсилення локального (поблизу поверхні) поля. Коли молекула поглинає або знаходиться дуже близько до підсиленого поля, то на поверхні можна спостерігати підсилення раманівського сигналу.

Варто зазначити, що на відміну від релєївського при раманівському розсіюванні світла у спектрі розсіяного випромінювання з'являються нові спектральні лінії, відсутні у спектрі первинного (збуджуючого) випромінювання. Число і розташування нових ліній визначається хімічним складом і молекулярною будовою речовини. Отже кожна речовина має свій унікальний спектр КРС, який може використовуватись для її ідентифікації. Крім того, аналіз зразків методом раманівської спектроскопії є безконтактним і неруйнівним.

Найкращого підсилення показали структури які виготовляються лише випадковим чином. З інженерної точки зору, це не контрольована технологія. У зв'язку з цим з'явилося багато робіт присвячених покращенню виготовлення та синтезу таких наноструктур або були запропоновані нові прості у виготовленні, економічно ефективні та стабільні шаблони КРС [494].

Отже, щоб зробити дану методику загальнозживаною, необхідно щоб КРС–підкладки були відносно дешеві, ефективно підсилювали раманівське розсіяння для широкого класу молекулярних сполук, причому підсилення було приблизно однакове по всій поверхні підкладок і була можливість їх багаторазового застосування. Тому на даний час залишається актуальним завдання проектування та оптимізації періодичних структур для максимального підсилення раманівського сигналу.

Періодична структура для КРС може бути як металева ґратка на діелектричній підкладці, так і металева ґратка на металевій підкладці [495]. Для підсилення електромагнітного поля необхідно збудити ППП, які підсилюють не тільки падаюче випромінювання, а й випромінювання диполя на стоксовій довжині хвилі. В залежності від типу періодичної структури і довжини хвилі збудження необхідно підібрати період ґратки, щоб отримати більший коефіцієнт підсилення.



### 7.3.1. Оптимізація ґраткових структур для застосування в підкладках для спектроскопії комбінаційного розсіяння світла

В даній частині роботи теоретично досліджено та оптимізовано прямокутні періодичні структури на основі полікарбонату та благородного металу, які технологічно легко виготовити. Розраховано їх коефіцієнти підсилення на довжинах хвиль збудження та на стоксівських довжинах хвиль молекул.

Інтенсивність раманівського розсіяння незначна (становить близько  $10^{-7}$  частки від усього розсіяного світла). Для спостереження раманівських спектрів необхідні потужні джерела випромінювання і дуже чутлива апаратура. Головним джерелом перешкод у раманівській спектроскопії, яке обмежує можливості методу, є флуоресценція. Одним із прийомів подолання цієї перешкоди, крім ретельної підготовки проб з метою вилучення подібних домішок, є вибір лазера, який випромінює світло з довжиною хвилі, що перебуває за межами смуги збудження люмінесценції. За допомогою сучасного обладнання часто можна використовувати кілька довжин хвиль лазера, щоб ефективніше реєструвати раманівський сигнал: Наприклад, для багатьох зразків, особливо «органічного» або «біологічного» характеру, спостерігається досить висока флуоресценція. Таким чином, найчастіше зручніше використовувати різні довжини хвиль, які підходять для різних властивостей зразка, будь то резонансне підсилення, глибина проникнення або флуоресценція. При розрахунках в даній роботі використовувались для збудження лазери: 532нм (Nd:YAG на другій гармоніці), 633нм (He-Ne лазер) та 785нм (діодний лазер). Тому, що при використанні більш коротких довжин хвиль збільшується ймовірність виникнення флуоресценції, яка може придушити раманівський сигнал до такої міри, що він не буде помітний, а при збільшенні довжини хвилі ефективність розсіювання буде знижуватись.

Інтенсивність підсиленого сигналу залежить від підсилення на довжині хвилі збудження і стоксовій довжині хвилі відповідної молекули

$$I_{SERS} = |\alpha_R|^2 |g_1 g_2|^2 I_0 \quad (7.3)$$

де  $\alpha_R$  це коефіцієнт, який виражає ефективність раманівського процесу;  $g_1$  – коефіцієнт підсилення на довжини хвилі збудження;  $g_2$  – коефіцієнт підсилення на стоксівській довжині хвилі молекули;  $I_0$  – інтенсивність довжини хвилі збудження. В даній роботі розраховані стоксові довжини хвиль ( $\lambda_{3\sigma}$ ) молекул в залежності від довжини хвилі збудження 532нм (Nd:YAG на другій гармоніці), 633нм (He-Ne лазер) та 785нм (діодний лазер) для окремих молекул. Отже, ґратки оптимізуємо так, щоб отримати саме максимальний добуток  $g_1 g_2$ .

Якщо підкладкою є діелектрик, то максимально допустимий період ґратки залежить від довжини хвилі збудження та від діелектричної проникності діелектрика:

$$\Lambda \leq \frac{\lambda}{\sqrt{\epsilon_d}}, \quad (7.4)$$

де  $\lambda$  – довжина хвилі збудження,  $\sqrt{\epsilon_d}$  – діелектрична проникність діелектрика.

Якщо матеріалом підкладки є метал, то максимальний період ґратки залежить від довжини хвилі збудження:

$$\Lambda \leq \lambda. \quad (7.5)$$

Першим етапом цього дослідження є визначення оптимальних параметрів прямокутної металевої ґратки на діелектричній підкладці, щоб отримати максимальний коефіцієнт підсилення. В якості матеріалу ґратки вибрано срібло, діелектричні сталі якого використано з роботи [333], а в якості підкладки вибрано полікарбонат з діелектричною проникністю 2,9. Такі матеріали є широкодоступними і легко можуть застосовуватися для виготовлення КРС-підкладок [495].

Максимальні періоди для такої структури рівні: 0,3мкм при  $\lambda_{3\sigma}=0,532$ мкм, 0,37мкм при  $\lambda_{3\sigma}=0,633$ мкм та 0,46 при  $\lambda_{3\sigma}=0,785$ мкм. Відповідно, при довжині хвилі збудження для отримання максимального коефіцієнта підсилення

раманівського сигналу, оптимізовано товщину ґратки в межах від 0,001мкм до 0,1мкм та фактор заповнення від 0,1 до 0,5.

Найкращі коефіцієнти підсилення були отримані при довжині хвилі збудження 0,633мкм і періоді 0,37, при факторі заповнення  $F=0,2$  і товщині ґратки  $d=0,01$ мкм [496]. Максимальне підсилення на довжині хвилі збудження  $g_1 = 16,6445$ , а на стоксівській довжині хвилі молекули  $N_2$   $g_2=17,5098$ . На рис. 7.15. наведений розподіл коефіцієнта підсилення на довжині хвилі збудження та стоксівській, в межах одного періоду ґратки.

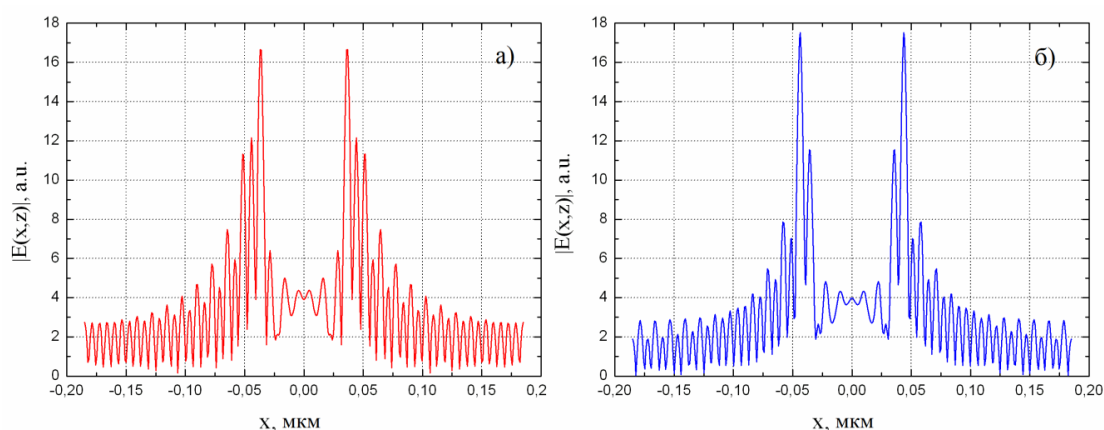


Рис. 7.15 Розподіл коефіцієнта підсилення в межах одного періоду на довжині хвилі збудження  $\lambda=0,633$  мкм для ґратки  $\Lambda=0,37$  мкм,  $d=0,01$ мкм та  $F=0,2$  (а) та на стоксівській довжині хвилі молекули  $N_2$   $\lambda=0,648$  мкм для ґратки  $\Lambda=0,37$  мкм,  $d=0,01$  мкм та  $F=0,2$  (б)

На рис. 7.16 наведено залежності коефіцієнта підсилення від фактору заповнення та товщини ґратки для довжини хвилі збудження 0,633 мкм і періоду 0,37 мкм для періодичної структури, яка містить підкладку з полікарбонату та ґратку зі срібла.

В таблиці 7.1. наведені розрахунки коефіцієнта підсилення раманівського розсіювання на періодичній структурі, коли підкладка з полікарбонату, а ґратка зі срібла. Максимальний коефіцієнт підсилення  $g_1 = 16,6445$  отримано при довжині хвилі збудження 0,633 мкм і періоді 0,37, факторі заповнення  $F=0,2$  і товщині ґратки  $d=0,01$  мкм.

На другому етапі досліджень оптимізовано ґраткову структуру, коли підкладка та ґратка зі срібла. Дослідження проведено на тих же довжинах хвиль, що і в попередньому випадку. Так, як підкладкою є срібло, то період такої структури буде залежати лише від довжини хвилі збудження.

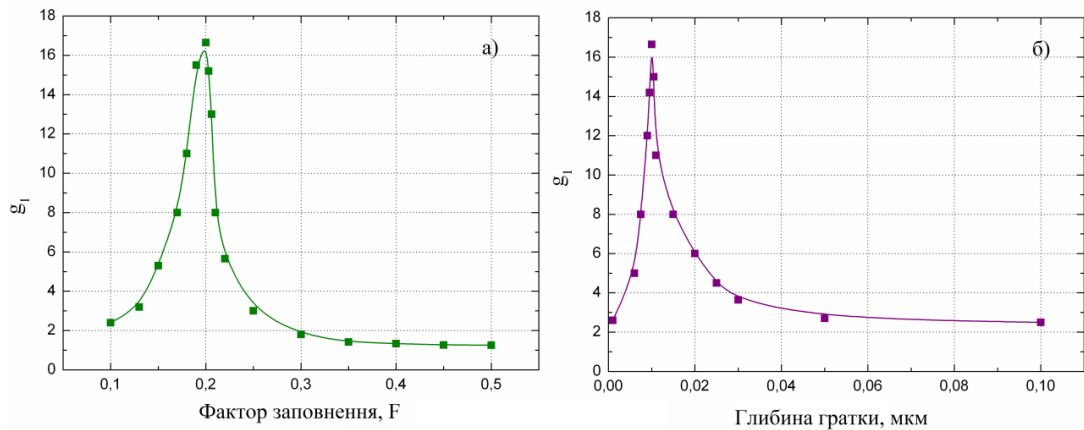


Рис. 7.16. Залежність коефіцієнта підсилення від фактору заповнення на  $\lambda_{3\sigma}=0,633$  мкм для ґратки з періодом  $\Lambda=0,37$  мкм і товщиною 0,01 мкм (а) та від товщини ґратки на  $\lambda_{3\sigma}=0,633$  мкм для  $\Lambda=0,37$  мкм при факторі заповнення 0,2 (а)

Максимальні періоди для такої структури будуть рівні: 0,5 мкм при  $\lambda_{3\sigma}=0,532$  мкм, 0,6 мкм при  $\lambda_{3\sigma}=0,633$  мкм та 0,75 при  $\lambda_{3\sigma}=0,785$  мкм. Відповідно, при довжині хвилі збудження для отримання максимального коефіцієнта підсилення раманівського сигналу, оптимізовано товщину ґратки в межах від 0,001 мкм до 0,01 мкм та фактор заповнення від 0,1 до 0,55.

Для періодичної прямокутної структури, коли підкладка та ґратка зі срібла найкращі коефіцієнти підсилення були отриманні при довжині хвилі збудження 0,633 мкм і періоді 0,6, факторі заповнення  $F=0,5$  і товщині ґратки  $d=0,03$  мкм. Максимальне підсилення на довжині хвилі збудження  $g_1=21,8242$ , а на стоксовій довжині хвилі молекули  $\text{CCl}_4$   $g_2=17,4127$ . На рис. 7.17 наведений розподіл коефіцієнта підсилення на довжині хвилі збудження та стоксівській, в межах одного періоду ґратки.

Таблиця 7.1 Розраховані коефіцієнти підсилення для періодичної структури підкладка з полікарбонату, ґратка зі срібла

Молекула	Хвильове число	$\lambda_{\text{стокс.}}$ , мкм	$g_1$	$g_2$	$ g_1 \cdot g_2 ^2$
CCl <sub>4</sub>	458	0,635732	16,6445	16,4881	$7,532 \cdot 10^4$
Cl <sub>2</sub>	557	0,636369		16,3777	$7,431 \cdot 10^4$
NO <sub>2</sub>	754	0,637642		16,0848	$7,168 \cdot 10^4$
O <sub>3</sub>	1043	0,639518		15,7222	$6,848 \cdot 10^4$
SO <sub>2</sub>	1151	0,640222		15,9889	$7,082 \cdot 10^4$
CO <sub>2</sub>	1286	0,641103		16,2874	$7,349 \cdot 10^4$
O <sub>2</sub>	1556	0,642874		16,8409	$7,857 \cdot 10^4$
HCN	2089	0,646399		17,4689	$8,454 \cdot 10^4$
N <sub>2</sub>	2331	0,648013		17,5098	$8,494 \cdot 10^4$
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	3070	0,652989		16,7065	$7,732 \cdot 10^4$
H <sub>2</sub>	4150	0,660406		14,7032	$5,989 \cdot 10^4$

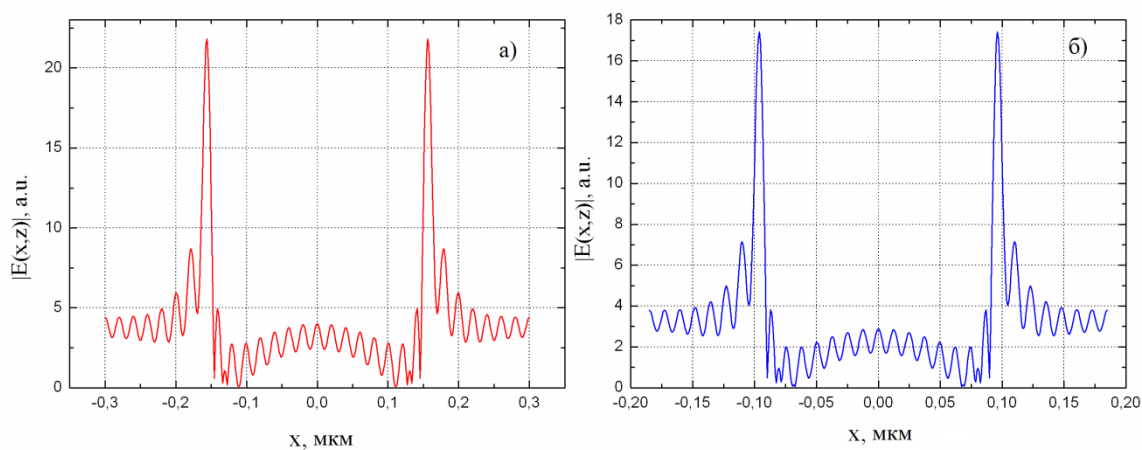


Рис. 7.17. Розподіл коефіцієнта підсилення в межах одного періоду на довжині хвилі збудження  $\lambda=0,633$  мкм при  $\Lambda=0,6$  мкм,  $d=0,03$  мкм та  $F=0,5$  (а) та на стоксовій довжині хвилі молекули CCl<sub>4</sub>  $\lambda=0,635$  мкм при  $\Lambda=0,6$  мкм,  $d=0,03$  мкм та  $F=0,5$  (б)

На рис. 7.18 наведено залежності коефіцієнта підсилення від фактору заповнення та товщини ґратки для довжини хвилі збудження 0,633 мкм і періоді 0,6 мкм для періодичної структури підкладка та ґратка зі срібла.

В таблиці 7.2 наведені розрахунки коефіцієнта підсилення раманівського розсіювання на періодичній структурі, коли підкладка та ґратки зі срібла. Максимальний коефіцієнт підсилення  $g_1 = 21,8242$  отримано при довжині хвилі збудження 0,633 мкм і періоді 0,6, факторі заповнення  $F=0,5$  і товщині ґратки  $d=0,03$  мкм.

При розгляді питання, пов'язаного з підсиленням раманівського розсіювання адсорбованих молекул, слід враховувати дві очевидні обставини. По-перше, поблизу поверхні металу падаюче і розсіяне випромінювання будуть підсилені.

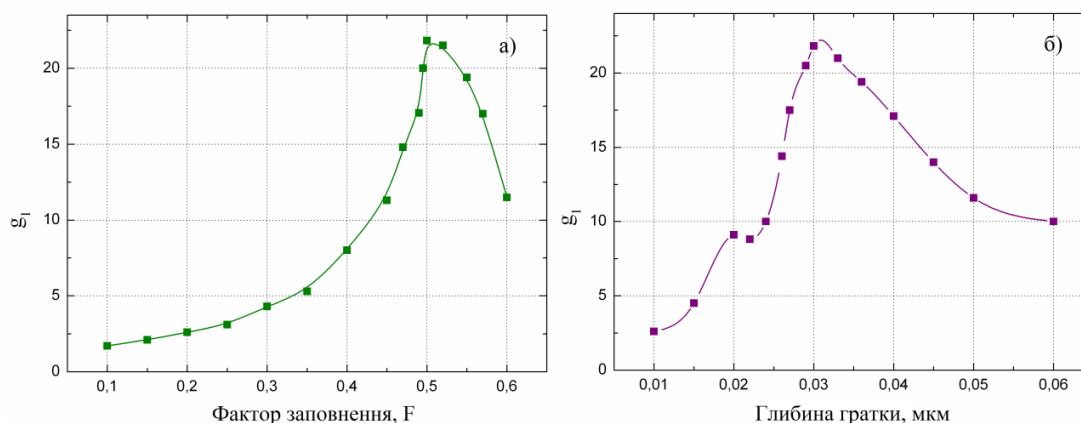


Рис. 7.18 Залежність коефіцієнта підсилення від фактору заповнення на  $\lambda_{зб}=0,633$  мкм при  $\Lambda=0,6$  мкм, товщині ґратки 0,03 мкм (а) та від глибини ґратки за фактора заповнення 0,5

Це відбувається за рахунок резонансного збудження поверхневих електромагнітних хвиль на шорсткій поверхні. Крім того, в окремих структурах на поверхні, а також в малих ізольованих частках будуть існувати локальні резонанси, пов'язані зі збудженням під дією світла колективної електронної осциляції. Це призведе до збільшення індукованого дипольного моменту молекули, що знаходиться поблизу металу. По-друге, якщо в разі ізольованої молекули раманівське розсіювання є наслідком модуляції коливання молекули її

електронної поляризації, то при адсорбції необхідно розглядати поляризованість системи молекула - метал, що означає поява нових збуджених станів, обумовлених можливістю переносу заряду, а також локальними змінами щільності електронного заряду поблизу поверхні, що виникають внаслідок хімічного зв'язку, або тунелювання електронів металу до місця розташування молекули.

Таблиця 7.2 Розраховані коефіцієнти підсилення для періодичної структури підкладка та ґратка зі срібла.

Молекула	Хвильове число	$\lambda_{\text{стокс.}}$ мкм	$g_1$	$g_2$	$ g_1 \cdot g_2 ^2$
CCl <sub>4</sub>	458	0,635732	21,8242	17,4127	$1,444 \cdot 10^5$
Cl <sub>2</sub>	557	0,636369		16,5108	$1,298 \cdot 10^5$
NO <sub>2</sub>	754	0,637642		14,7460	$1,036 \cdot 10^5$
O <sub>3</sub>	1043	0,639518		13,0181	$8,072 \cdot 10^4$
SO <sub>2</sub>	1151	0,640222		12,4239	$7,352 \cdot 10^4$
CO <sub>2</sub>	1286	0,641103		11,7554	$6,582 \cdot 10^4$
O <sub>2</sub>	1556	0,642874		10,6214	$5,373 \cdot 10^4$
HCN	2089	0,646399		8,9634	$3,827 \cdot 10^4$
N <sub>2</sub>	2331	0,648013		8,3889	$3,352 \cdot 10^4$
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	3070	0,652989		7,0704	$2,381 \cdot 10^4$
H <sub>2</sub>	4150	0,660406		5,8403	$1,625 \cdot 10^4$

### 7.3.2. Підсилення електромагнітного поля на періодичних структурах для застосування в спектроскопії комбінаційного розсіяння світла

Як зазначалося вище, підсилення локалізованого електричного поля є найбільш ефективним методом підвищення чутливості спектроскопічних методів дослідження, тому на даному етапі роботи ми дослідимо розподіл електромагнітного поля та коефіцієнта підсилення структурами детально розглянутими в попередньому пункті. Отже, в результаті чисельних

експериментів встановлено, що максимально допустимі періоди для металевих (срібло) ґраток на діелектричній (полікарбонат) підкладці в залежності від довжини хвилі збудження згідно [497] рівні: 0,3 мкм для  $\lambda_{зб}=0,532$  мкм, 0,37 мкм для  $\lambda_{зб}=0,633$  мкм та 0,46 мкм для  $\lambda_{зб}=0,785$  мкм. Товщина ґратки змінювалась в межах від 0,001 мкм до 0,1 мкм, фактор заповнення - від 0,1 до 0,5. Оптимальними параметрами ґратки для максимального підсилення електромагнітного поля є: при довжині хвилі збудження 0,532 мкм і періоді  $\Lambda=0,3$  мкм – товщина ґратки  $d=0,005$  мкм і фактор заповнення  $F=0,1$ ; для  $\lambda_{зб}=0,633$  мкм і періоді 0,37 мкм –  $d=0,01$  мкм і  $F=0,2$ ; для  $\lambda_{зб}=0,785$  мкм і періоді 0,46 мкм –  $d=0,005$  мкм і  $F=0,16$ . Розподіл концентрації електромагнітного поля та розподіл коефіцієнта підсилення в межах одного періоду для довжини хвилі збудження 0,633 мкм при оптимальних параметрах ґратки наведено на рис. 7.19. Моделювання електромагнітного поля у ґратках проводилось методом скінченних елементів.

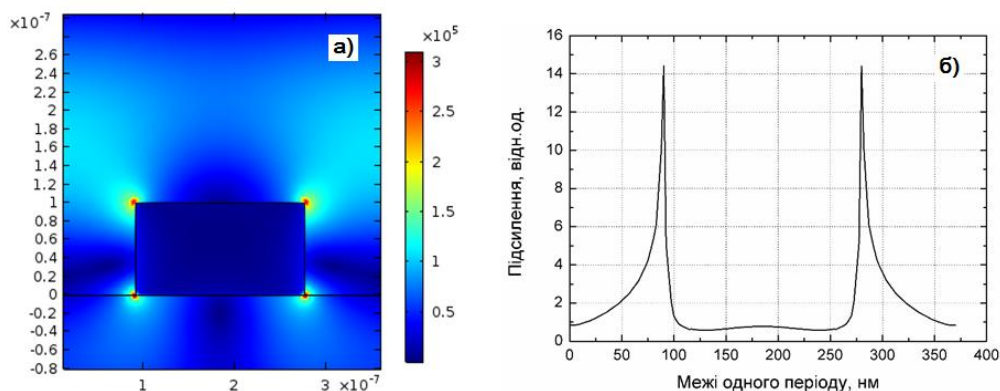


Рис. 7.19. Розподіл електромагнітного поля (а) і коефіцієнта підсилення (б) в межах одного періоду при довжині хвилі збудження 0,633 мкм у ґратці з  $\Lambda=0,37$  мкм  $d=0,1$  мкм і  $F=0,2$

Для періодичних структур на основі металевих (срібло) дифракційних ґраток та підкладки, оптимальними параметрами ґратки є: при довжині хвилі збудження 0,532 мкм і періоді  $\Lambda=0,5$  мкм – товщина ґратки  $d=0,02$  мкм і фактор



заповнення  $F=0,5$ ; для  $\lambda_{36}=0,633$  мкм і періоді  $0,6$  мкм –  $\epsilon d=0,03$  мкм і  $F=0,5$ ; для  $\lambda_{36}=0,785$  мкм і періоді  $0,75$  мкм –  $\epsilon d=0,05$  мкм і  $F=0,5$ .

На рис. 7.20 наведено розподіл концентрації електромагнітного поля та розподіл коефіцієнта підсилення в межах одного періоду для довжини хвилі збудження  $0,633$  мкм при оптимальних параметрах ґратки.

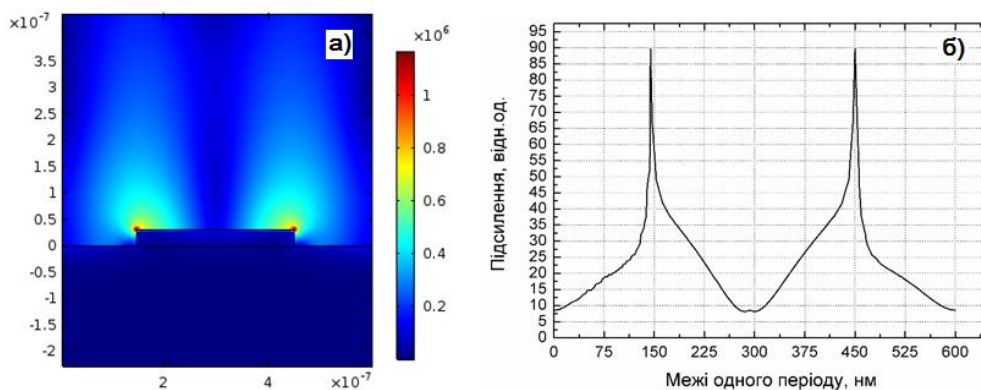


Рис. 7.20. Розподіл електромагнітного поля (а) і коефіцієнта підсилення (б) в межах одного періоду при довжині хвилі збудження  $0,633$  мкм у ґратці з  $\Lambda=0,6$  мкм,  $d=0,03$  мкм,  $F=0,5$ .

Періодичні структури на основі металевих ґратки та підкладки показали значно вище підсилення електромагнітного поля (90 відн. од.) в порівнянні з структурами на основі металевої ґратки та діелектричної підкладки (15 відн. од.) Такий же результат слідує з досліджень розподілу концентрації електромагнітного поля на ґратці (див. рис 7.19а і рис. 7.20а).

### 7.3.3. Прямокутна полікарбонатна ґратка покрита шаром золота як ефективна підкладка для спектроскопії комбінаційного розсіяння світла

На цьому етапі роботи представлені результати теоретичних досліджень та оптимізації прямокутних структур на основі полікарбонатних ґраток покритих шаром золота, які легко виготовляються та є доволі дешеві. Основною мотивацією для цієї роботи є розробка та характеристика таких ґраткових структур в якості КРС-підкладки.

Першим кроком нашого дослідження є визначення оптимальних параметрів прямокутної полікарбонатної ґратки із золотим покриттям, щоб отримати максимальне підсилення. Геометрія прямокутної ґраткової структури представлена на рис. 7.21. Золото вибирається як матеріал покриття для ґратки, діелектрична проникність, яка була використана з [333], а полікарбонат вибрали як підкладку з показником заломлення 1,59.

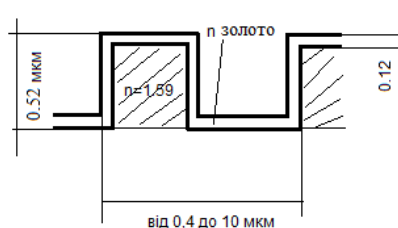


Рис. 7.21. Схема прямокутної металізованої ґратки

Підсилення було досягнуто при довжині хвилі збудження 0,785 мкм для ґратки з періодом 0,75 мкм та фактором заповнення  $F=0,48$ . Максимальне підсилення для довжини хвилі збудження 0,785 мкм становить  $g_1=18.0035$ , внаслідок чого середній коефіцієнт посилення  $|g_1 g_2|^2$  буде приблизно  $10^4$  [498]. Середній коефіцієнт підсилення КРС загалом визначається як показник якості підкладки КРС. Він може залежати і від інших чинників, крім періоду ґратки або довжини хвилі збудження, наприклад, молекулярної системи.

На рис. 7.22а показаний розподіл тангенціальної компоненти модуля напруженості електричного поля вздовж періоду ґратки для довжини хвилі збудження, а залежність коефіцієнта підсилення для довжини хвилі 0,785 мкм від коефіцієнта заповнення для періоду ґратки 0,75 мкм наведено на рис. 7.22б.

Слід зазначити, що падаюче і розсіяне випромінювання буде більше підсилюватися поблизу поверхні металу в порівнянні з об'ємом. Це пов'язано з резонансним збудженням поверхневих електромагнітних хвиль на нерівній поверхні. Більш того, резонанси, пов'язані з колективними електронними коливаннями, будуть відбуватися в певних структурах на поверхні та у малих ізолюваних частинках. В результаті індукований дипольний момент молекули поблизу металу збільшуватиметься.

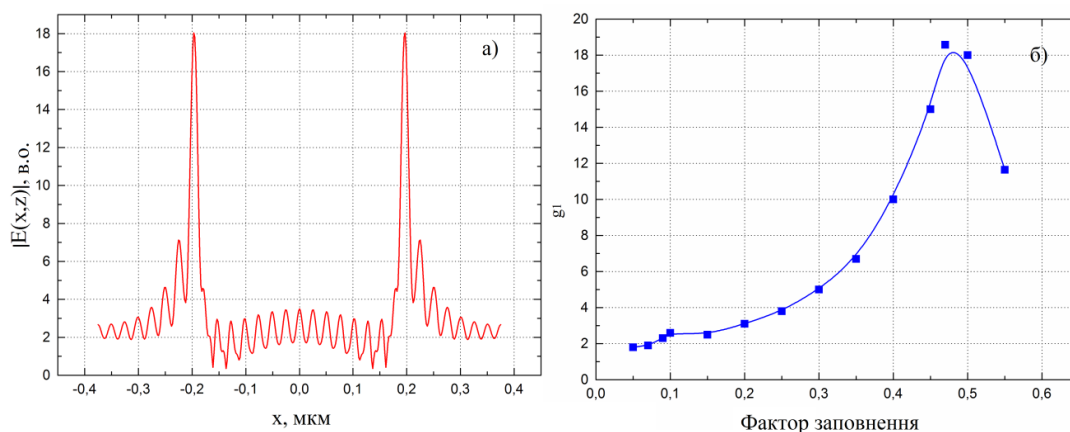


Рис. 7.22. Розподіл тангенціальної складової модуля напруженості електричного поля ( $g_1$ ) вздовж періоду ґратки (а) та залежність коефіцієнта підсилення від фактору заповнення (б) для довжини хвилі збудження 0,785 мкм

На дифракційну мікроструктуру з полікарбонату нанесено тонку плівку золота товщиною 0,12 мкм. Періодичні мікроструктури виготовлені за технологією райдужних голограм методом тиснення на тонкій плівці полікарбонату з періодами від 0,4 мкм до 10 мкм, з глибиною порядку 0,3 мкм. Зображення поверхні двох з отриманих зразків зображені на рис. 7.23.

На рис. 7.23а,б представлено зображення ґраткової мікроструктури з періодом 1,1 мкм з різним збільшенням. На рис. 7.23в,г представлено зображення ґраткової мікроструктури з періодом 1,6 мкм з різним збільшенням. Результати дослідження морфології поверхні одержаних періодичних мікроструктур наведені на рис. 7.24, 4.25.

Поверхня представляє собою періодичну структуру у вигляді рельєфу висотою біля 200 нм. Конденсація золота на плівку висотою до 120 нм відбувається як на гребнях рельєфу так і на впадинах. В результаті формується періодична метало-діелектрична структура із складною морфологією. Профіль канавки - трапеція, навіть близька до прямокутної з плоскими вершинами. Це означає, що золотий шар протравлюється по всій товщині до підкладки полікарбонату.

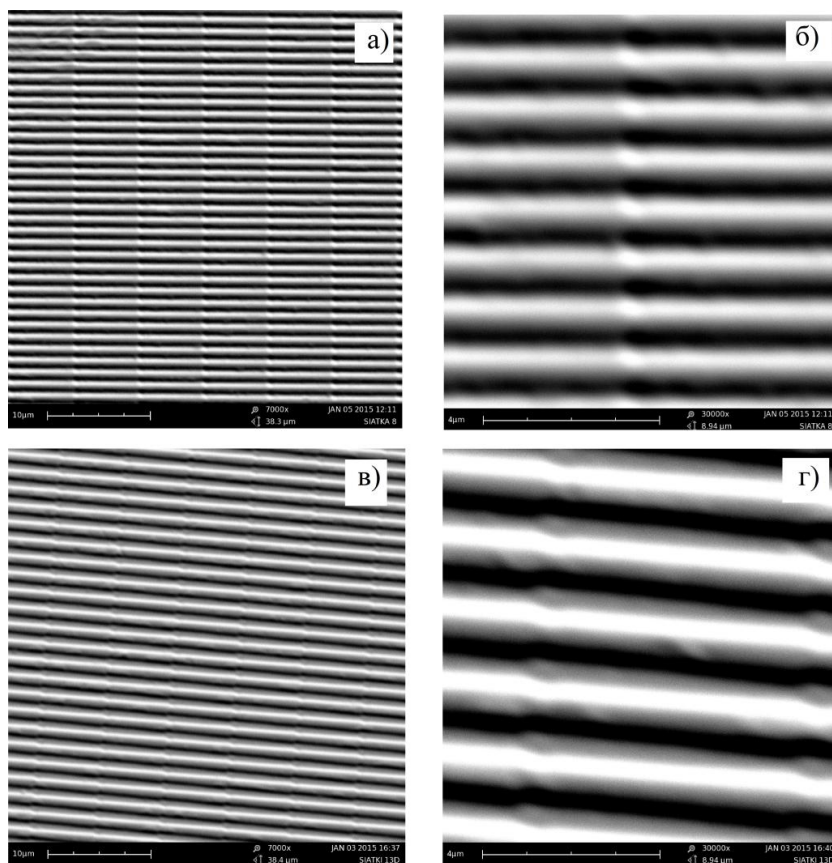


Рис. 7.23. Зображення поверхні ґраткових структур отриманих за допомогою скануючої електронної спектроскопії

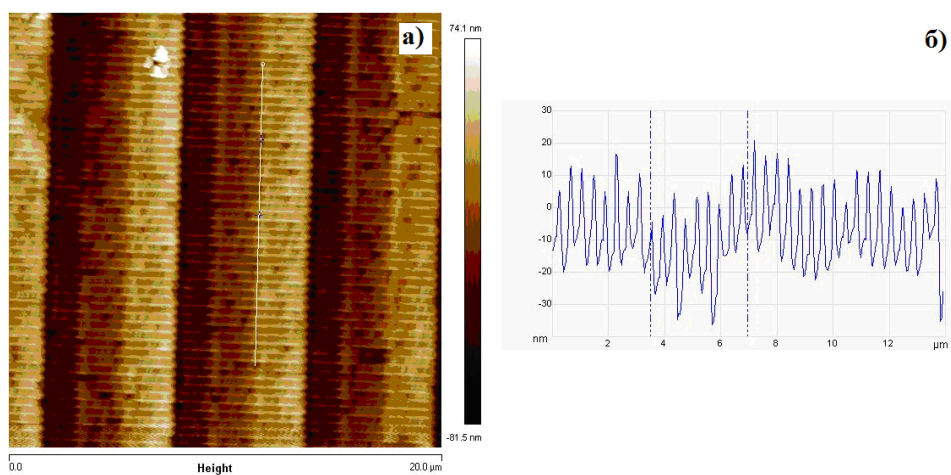


Рис. 7.24. Зображення поверхні періодичної мікроструктури з періодом ґратки 400 нм, висотою ґратки 520 нм (плівка золота 120 нм): а) скануюча електронна спектроскопія б) атомно-силової морфометрії металізованої ґратки

Готові ґратки з золотом були використані для отримання спектрів коливань ферменту холестерол-оксидаз (ChOX), як важливого аналітичного ферменту. Білок був пов'язаний ковалентною іммобілізацією з наночастинками золота, і комплекс був поміщений на поверхню ґратки.

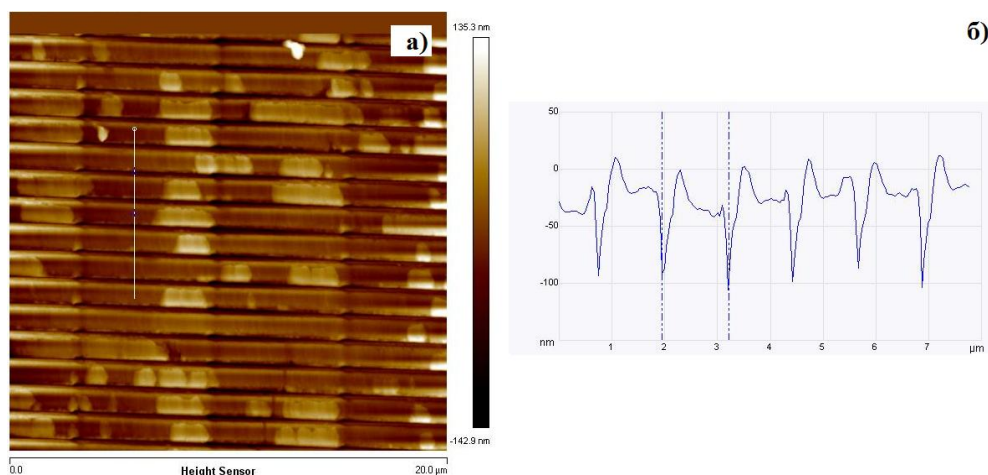


Рис. 7.25. Зображення поверхні періодичної мікроструктури з періодом ґратки 1200 нм, висотою ґратки 520 нм (плівка золота 120 нм): а) скануюча електронна спектроскопія б) атомно-силова морфометрія металізованої ґратки

Спектри КРС з ChOX представлені на рис. 7.26. Виявлено явище підсилення розсіювання, яке використовується для ідентифікації функціональних груп, що існують у досліджуваному білку.

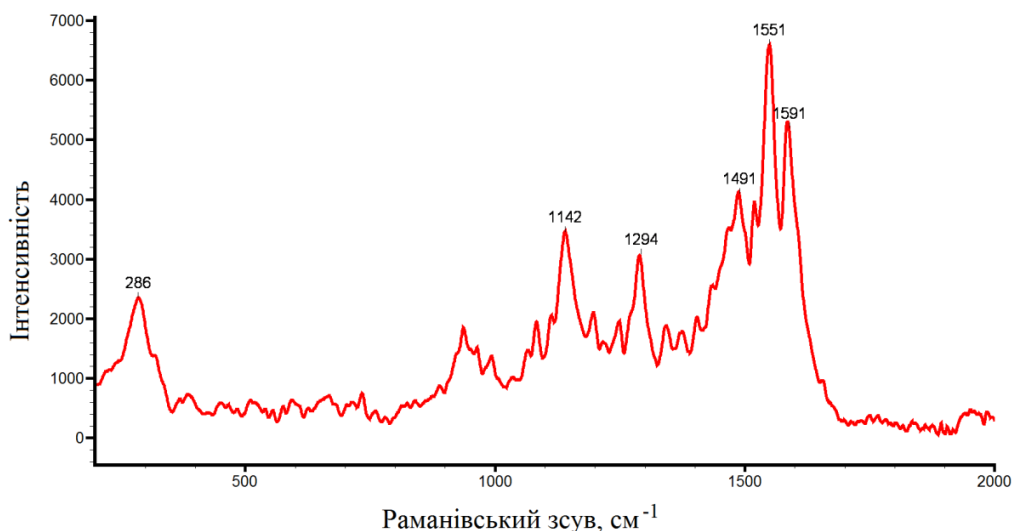


Рис. 7.26 Раманівський спектр ферменту холестеролу оксидази

Крім типових функціональних груп білків: амід I (смуга C = O) при  $1591\text{ cm}^{-1}$ , амід II (смуга N-H та C-H) при  $1551\text{ cm}^{-1}$ , C-H стр. вібрація на  $1491\text{ cm}^{-1}$ , амід III (CN і NH діапазон) при  $1294\text{ cm}^{-1}$ , амінокислота тирозину при  $1142\text{ cm}^{-1}$  та CC-діапазон при  $938\text{ cm}^{-1}$  [496], спостерігалися вібраційні лінії, що відносяться до протеазної групи флавінових аденин динуклеотидів (FAD). Лінія  $1343\text{ cm}^{-1}$  відповідає аденину, а лінія  $1247\text{ cm}^{-1}$  до кільця II молекул FAD [497]. Для визначення присутності ензиму холестерол оксидази можна використовувати сильну лінію на рівні  $1551\text{ cm}^{-1}$ , призначену для хімічних зв'язків, характерних для ChOX-протеїну.

#### **7.4 Прикладні аспекти застосування плазмонних мікро та наноструктур**

Отже можемо узагальнити, що розуміння та вивчення фізики резонансних явищ, таких як збудження резонансу хвилеводних мод в планарному хвилеводі з допомогою призми або ґратки, збудження резонансу плазмонів та плазмон-поляритонів з допомогою ґратки на плоскій поверхні дали можливість запропонувати і створити різноманітні твердотільні елементи на основі мікро- і наноструктур. Найбільш вірогідне застосування нанограток, в яких можливий широкосмуговий резонанс локалізованих поверхневих плазмонів при взаємодії з електромагнітним полем. Тут можливе підсилення поля в декілька сотень разів, що можна ефективно використати в системах КРС, які мають важливі застосування в біологічних науках. Зміна параметрів ґратки, навколишнього середовища та геометрії взаємодії оптичної хвилі з ґраткою призводить до порушення резонансу, тим самим до зміни коефіцієнта відбивання від ґратки, коефіцієнта пропускання та поглинання, що є основою для побудови різноманітних сенсорів.

Багатошарова структура діелектричний шар/металева ґратка/діелектричний шар/підкладка в умовах TE поляризації демонструє екстраординарні властивості пропускання в спектральному діапазоні від 1 до 10 мкм. Аномально високе

пропускання реалізується на довжині хвилі, яка відповідає двом резонансам: хвилеводного резонансу в діелектричних шарах та резонансу в діелектричній щілині металевої ґратки.

Дослідження взаємодії оптичного випромінювання з масивом періодично розміщених металевих нанодротів дає можливість створювати на їх основі плазмонні наномасштабні лазерні джерела; застосовувати їх в задачах фотокаталізу у біотехнологіях та медицині, перетворенні сонячної енергії, а також в галузі сенсорики.

Значна увага в роботі приділена реалізації та дослідженню нанооб'єктів у вигляді наночастинок різної форми, нанооболонки та нанокompозитних матеріалів, що дає можливість керувати піком поглинання поверхневого плазмона у видимій та ближній інфрачервоній області спектру. Оскільки, ефекту резонансу можна досягнути і при використанні різноманітних періодичних структур, що містять металеві фрагменти, а також нанокompозитних матеріалів з включеннями ансамблів металевих наночастинок, то вибір оптимальних матеріалів і конфігурації, експериментальне підтвердження резонансних оптичних ефектів і теоретичне обґрунтування результатів на основі сучасних моделей плазмонних систем дозволить вдосконалити та розробити нові типи твердотільних оптико-електронних елементів.

### **7.5. Висновки до сьомого розділу**

Вивчено досвід використання двошарових періодичних структур в якості сенсорів, що працюють на явищі плазмон-поляритонного резонансу, розглянуто умови виникнення цього явища та фактори, які впливають на характеристики резонансного провалу. Показано, що значення кута плазмонного резонансу залежить від довжини хвилі падаючого світла, періоду конкретної дифракційної ґратки та показників заломлення матеріалу ґратки і середовища падіння променя. На ширину та глибину резонансного провалу, а відповідно і чутливість сенсора, впливає конфігурація ґратки, а саме її період, глибина модуляції поверхневого рельєфу та товщина металевого покриття.

В ході досліджень розраховано кутову залежність коефіцієнта відбивання нульового порядку дифракції для поверхневих дифракційних ґраток різних конфігурацій, зокрема для серії прямокутних ґраток з полікарбонату та синусоїдальних ґраток з арсеніду галію; оптимізовано товщину напиленого шару золота для прямокутних дифракційних ґраток; встановлено, що оптимальна товщина напилення залежить від періоду дифракційної ґратки (для періодів 0,6 – 1,4 мкм оптимальна товщина становить 20-78 нм для прямокутної ґратки та 30-70 нм для синусоїдальної); з'ясовано, що модель задання металевого покриття прямокутної дифракційної ґратки суттєво впливає на спектральну характеристику результату дифракції; досліджено можливість використання двошарових ґраток в якості сенсора показника заломлення газового середовища (зміна показника заломлення середовища в межах десятитисячних викликає зміну кута ППР на соті долі градуса); для сенсорного елемента на базі прямокутної дифракційної ґратки з періодом 0,8 мкм та шаром золота 55 нм розраховано чутливість, яка становить 117,19.

Оптимізовано геометричні параметри ґратки GaAs з покриттям Au та створено на її основі сенсорний елемент. Наведено резонансні характеристики синусоїдальної ґратки GaAs з покриттям Au. Показано, що позиція піку плазмонного резонансу знаходиться в лінійній залежності від довжини хвилі збудження та зміни періоду ґратки. Теоретичні результати показують, що досліджувана структура є більш чутливою до зміни показника заломлення у рідких середовищах, ніж у газових середовищах. Теоретичні та експериментальні результати залежності коефіцієнта відбивання від кута падіння лазерного променя є досить хорошою кореляцією.

Прямокутні структури на базі полікарбонат/срібло та срібло/срібло були розраховані та оптимізовані для довжин хвиль збудження 0,532 мкм, 0,633 мкм і 0,785 мкм з метою отримання максимального збільшення комбінаційних сигналів. Показано, що досягнення максимального підсилення певної довжини хвилі збудження можливе лише для заданих комбінацій: період ґратки, глибина і коефіцієнт заповнення, які відповідають резонансу локалізованих поверхневих



плазмонів в інтерфейсі металу. Результати моделювання показали, що оптимізовані підкладки на основі прямокутних структур мають чутливість КРС приблизно  $10^4$ - $10^5$  для деяких різних молекул, що вказує на високу ефективність їх використання в рамановській спектроскопії. Повністю металеві періодичні структури є більш придатними для ефективного застосування їх в якості КРС підкладок, оскільки за допомогою них можна значно більше підсилити електромагнітне поле у порівнянні з метал-діелектричними періодичними структурами.

Показано, що полікарбонатні ґратки з золотим покриттям в комбінації з біофункціоналізованими наночастинками золота можуть використовуватися для аналітичних цілей, на прикладі раманівського спектру ферменту холестеролу оксидази.

## ВИСНОВКИ

У дисертації вирішено науково-технічну проблему фізики твердого тіла, а саме встановлено роль хвилеводного, плазмонного та плазмон-поляритонного резонансів, які виникають в процесі взаємодії електромагнітної хвилі з мікро- та наноструктурами та проведено моделювання і оптимізацію оптоелектронних елементів на їх основі для застосування в сенсорній електроніці. Проведені дослідження дали змогу зробити такі висновки:

1. Математичне формулювання точної системи рівнянь зв'язаних хвиль та алгоритму  $S$ -матриці детально представлені та адаптовані до простої матричної форми для використання на сучасній мові програмування з метою дослідження умов виникнення резонансних явищ в мікро- та наноструктурах. Для цього було отримано набір матричних зв'язків, що забезпечило стабільний алгоритм для обчислення коефіцієнтів пропускання та відбивання. Запропонований чисельний алгоритм був реалізований у стандартному математичному програмному забезпеченні. Запропоновано нове представлення функціональної залежності діелектричної проникності матеріалу періодичної структури у вигляді модифікованого комплексного ряду Фур'є, що забезпечує зменшення осциляцій в залежностях коефіцієнтів відбивання та пропускання від кількості використаних зв'язаних хвиль, також покращується збіжність результатів аналізу. Досліджено збіжність методу зв'язаних хвиль для аналізу дифракції на деяких рельєфних ґратках в оптичному та ближньому інфрачервоному діапазонах для певних довжин хвиль.

2. У випадку призмової структури встановлені нові закономірності, що визначають зв'язок між геометричними параметрами оптоелектронної призмової сенсорної системи та її чутливістю. Показано, що в призмовій структурі при реалізації плазмон-поляритонного резонансу можна досягнути вищої чутливості зміни кута мінімального відбивання до зміни показника заломлення навколишнього середовища в порівнянні зі структурою, що працює на явищі хвилеводного резонансу. Чутливість такого сенсорного елемента зростає при

зменшенні показника заломлення матеріалу призми, причому цей висновок стосується обох типів поляризації. Чутливість є вищою для хвиль ТЕ поляризації ніж для ТМ поляризації, і вона зростає при наближенні мінімального кута відбивання до кута повного внутрішнього відбивання.

3. Розглянуто умови виникнення хвилеводного, плазмон-поляритонного та плазмонного резонансів в ґраткових мікро- та наноструктурах, та фактори, які впливають на їх спектральні характеристики. Показано, що мікроструктура на основі ґратки в умовах хвилеводного резонансу характеризується високим коефіцієнтом відбивання у вузьких спектральних смугах та може бути використана як високочутливий елемент сенсорної електроніки. Причому, при нормальному падінні наявний один пік в спектрі відбивання і два піки – при падінні променя під кутом. Встановлено, що зміщення другого піку в спектрі відбивання менш чутливе до зміни певних структурних параметрів і є більш чутливим до зміни показника заломлення навколишнього середовища. Крім того, спектральні положення піків суттєво залежать від періоду ґратки і товщини хвилеводу.

4. Досліджено можливість використання в якості оптичного фільтра багатошарової структури типу: діелектричний шар/металева ґратка/діелектричний шар/підкладка в умовах ТЕ поляризації. Встановлено наявність єдиного піку пропускання в спектральному діапазоні від 1 до 10 мкм. Показано, що аномально високе пропускання реалізується на довжині хвилі, яка відповідає двом резонансам: хвилеводному резонансу в діелектричних шарах та резонансу в діелектричній щілині металевої ґратки.

5. Проаналізовано взаємодію оптичного випромінювання з наноструктурами типу: система періодично розташованих квадратного перерізу золотих та срібних нанодротів на діелектричній підкладці. Встановлено, що спектральне розташування піків поглинання при резонансі локалізованих поверхневих плазмонів масиву періодично розташованих металевих нанодротів близькі до резонансних довжин хвиль металевих наночастинок. Завдяки тому, що уявна частина діелектричної проникності срібла суттєво менша за уявну

частину діелектричної проникності золота, резонансний пік у сріблі розщеплюється на декілька піків в результаті інтерференції поля падаючої хвилі та розсіяного поля на сусідніх нанодротах. Встановлено, що тангенціальні складові напруженості поля на срібних нанодротах у декілька разів більші ніж поля на нанодротах із золота. Показано, що такі структури є перспективними елементами сенсорної електроніки.

6. На основі експериментальних даних діелектричної проникності в діапазоні 0.3...2 мкм для срібла та золота, 0.3...4.2 мкм для міді і 0.1...2 мкм для алюмінію знайдені аналітичні вирази для їх опису. Причому, весь спектральний діапазон (за виключенням уявної частини діелектричної проникності срібла) розбито на декілька інтервалів. Для кожного інтервалу довжин хвиль підбирались відповідні функції, переважно у вигляді поліномів. Відбір функції на кожному інтервалі здійснювався функцією Хевісайда. Таке аналітичне представлення діелектричної проникності є корисним для вивчення резонансних явищ та моделювання на їх основі елементів твердотільної електроніки.

7. Розглянуто умови виникнення локалізованого плазмонного резонансу в металевих наночастинках, нанооболонках та нанокомпозитних матеріалах, а також можливості їх застосування як чутливих елементів сенсорної електроніки. Встановлено, що зміною товщини оболонки металу на діелектричному чи напівпровідниковому ядрі можна добитися зміщення піку поверхневого плазмонного поглинання в інтервалі довжин хвиль видимої і ближньої інфрачервоної області спектру та оцінено вплив відносної діелектричної проникності оточуючого середовища на оптичні характеристики таких наноструктур. Показано, що для нанокомпозитного матеріалу на основі алмазоподібної вуглецевої плівки з диспергованими в неї наночастинками срібла ефективну діелектричну проникність найкраще описує теорія ефективного середовища Максвелла-Гарнетта. Спектральне положення піку поглинання є більш чутливим до діелектричної проникності алмазоподібної вуглецевої плівки ніж до радіусу наночастинок (радіус наночастинок менший за 25 нм).

Встановлено визначальний вплив об'ємної концентрації срібла, збільшення електромагнітної взаємодії між наночастинками та зміни діелектричної проникності матриці на положення піку плазмонного поглинання.

8. Проведено моделювання оптичних властивостей алмазоподібної вуглецевої плівки з диспергованими в ній наночастинками срібла в залежності від температури відпалу. В результаті відпалу, поряд з більш дрібними з'являються великі металеві нанокластери несиметричної форми. Показано, що після відпалу нанокompозиту плазмонні піки зміщуються в довгохвильову область і розширюються. Крім того, стають яскраво вираженими квадрупольні додаткові піки поглинання. Зміна спектральних параметрів відпалених нанокompозитних плівок, пояснюється зміною розміру та форми наночастинок, зміною відносної діелектричної проникності середовища та збільшенням взаємодії між нанокластерами. Встановлено, що алмазоподібна вуглецева плівка, з диспергованими в ній наночастинками срібла є перспективним матеріалом сенсорної електроніки.

9. Оптимізовано геометричні параметри ґратки на основі арсеніду галію покритої тонким шаром золота, та створено на її основі сенсорний елемент. Показано, що положення піку плазмонного резонансу знаходиться в лінійній залежності від довжини хвилі збудження та періоду ґратки. Теоретичні результати показують, що досліджувана структура є більш чутливою до зміни показника заломлення рідких середовищ, ніж газових. Теоретичні та експериментальні результати залежності коефіцієнта відбивання від кута падіння лазерного променя строго корелюють між собою.

10. Прямокутні структури на основі матеріалів полікарбонат/срібло та срібло/срібло були розраховані та оптимізовані для довжин хвиль збудження 0,532 мкм, 0,633 мкм і 0,785 мкм з метою отримання максимального підсилення сигналів гігантського комбінаційного розсіяння. Показано, що досягнення максимального підсилення заданої довжини хвилі збудження можливе лише за певних комбінацій періоду ґратки, її глибини і коефіцієнта заповнення, які відповідають поверхневому плазмон-поляритонному резонансу на поверхні

металу. Повністю металеві періодичні структури є більш придатними для ефективного застосування їх в якості підкладок гігантського комбінаційного розсіювання, оскільки за допомогою них можна значно більше підсилити електромагнітне поле у порівнянні з метал-діелектричними періодичними мікроструктурами.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Wood, R.W. (1902). On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 4(21), 396–402. <https://doi.org/10.1080/14786440209462857>.
2. Lord Rayleigh, O.M. (1907). On the dynamical theory of gratings. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 79(532), 399–416. DOI: 10.1098/rspa.1907.0051.
3. Fano, U. (1941). The theory of anomalous diffraction gratings and of quasi-stationary waves on metallic surfaces (Sommerfeld's waves). *JOSA*, 31(3), 213–222. <https://doi.org/10.1364/JOSA.31.000213>.
4. Enoch, S., & Bonod, N. (2012). *Plasmonics: from basics to advanced topics*, 167, 321, Springer.
5. Hessel, A., & Oliner, A.A. (1965). A new theory of Wood's anomalies on optical gratings. *Applied Optics*, 4(10), 1275–1297. <https://doi.org/10.1364/AO.4.001275>
6. Neviere, M., Petit, R., & Cadilhac, M. (1973). About the theory of optical grating coupler-waveguide systems. *Optics Communications*, 8(2), 113–117. [https://doi.org/10.1016/0030-4018\(73\)90150-8](https://doi.org/10.1016/0030-4018(73)90150-8).
7. Neviere, M., Vincent, P., Petit, R., & Cadilhac, M. (1973). Systematic study of resonances of holographic thin film couplers. *Optics Communications*, 9(1), 48–53. [https://doi.org/10.1016/0030-4018\(73\)90333-7](https://doi.org/10.1016/0030-4018(73)90333-7).
8. Mashev, L., & Popov, E. (1985). Zero order anomaly of dielectric coated gratings. *Optics Communications*, 55(6), 377–380. [https://doi.org/10.1016/0030-4018\(85\)90134-8](https://doi.org/10.1016/0030-4018(85)90134-8).
9. Yang, H.Y.D., Diaz, R., & Alexopoulos, N.G. (1997). Reflection and transmission of waves from multilayer structures with planar-implanted periodic material blocks. *JOSA B*, 14(10), 2513–2521. <https://doi.org/10.1364/JOSAB.14.002513>.
10. Gale, M.T., Knop, K., & Morf, R.H. (1990). Zero-order diffractive microstructures for security applications. *Optical Security and Anticounterfeiting Systems 1210*, 83–90. <https://doi.org/10.1117/12.17917>.

11. Christ, A., Tikhodeev, S.G., Gippius, N.A., Kuhl, J., & Giessen, H. (2003). Waveguide-plasmon polaritons: strong coupling of photonic and electronic resonances in a metallic photonic crystal slab. *Physical Review Letters*, *91*(18), 183901-1–183901-4. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.91.183901>.
12. Magnusson, R., & Ko, Y. H. (2016, September). Guided-mode resonance nanophotonics: fundamentals and applications. *Nanoengineering: Fabrication, Properties, Optics, and Devices XIII* (Vol. 9927, pp. 992702-1–992702-13). International Society for Optics and Photonics.
13. Wang, S.S., Magnusson, R., Bagby, J.S., & Moharam, M.G. (1990). Guided-mode resonances in planar dielectric-layer diffraction gratings. *JOSA A*, *7*(8), 1470–1474. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.7.001470>.
14. Wang, S.S., & Magnusson, R. (1993). Theory and applications of guided-mode resonance filters. *Applied Optics*, *32*(14), 2606–2613. <https://doi.org/10.1364/AO.32.002606>
15. Magnusson, R., & Wang, S.S. (1995). Transmission bandpass guided-mode resonance filters. *Applied Optics*, *34*(35), 8106–8109. <https://doi.org/10.1364/AO.34.008106>.
16. Wawro, D. D., Tibuleac, S., Magnusson, R., & Liu, H. (2000, May). Optical fiber endface biosensor based on resonances in dielectric waveguide gratings. *Biomedical Diagnostic, Guidance, and Surgical-Assist Systems Ii* (Vol. 3911, pp. 86-95). International Society for Optics and Photonics.
17. Magnusson, R. (2013). Flat-top resonant reflectors with sharply delimited angular spectra: an application of the Rayleigh anomaly. *Optics Letters*, *38*(6), 989–991. <https://doi.org/10.1364/OL.38.000989>.
18. Ko, Y.H., Niraula, M., Lee, K.J., & Magnusson, R. (2016). Properties of wideband resonant reflectors under fully conical light incidence. *Optics Express*, *24*(5), 4542–4551. <https://doi.org/10.1364/OE.24.004542>.
19. Peng, S., & Morris, G.M. (1996). Experimental demonstration of resonant anomalies in diffraction from two-dimensional gratings. *Optics Letters*, *21*(8), 549–551. <https://doi.org/10.1364/OL.21.000549>.



20. Sommerfeld, A. (1899). Ueber die Fortpflanzung elektrodynamischer Wellen längs eines Drahtes. *Annalen der Physik*, 303(2), 233–290. <https://doi.org/10.1002/andp.18993030202>.
21. Zenneck, J. (1907). Über die Fortpflanzung ebener elektromagnetischer Wellen längs einer ebenen Leiterfläche und ihre Beziehung zur drahtlosen Telegraphie. *Annalen der Physik*, 328(10), 846–866. <https://doi.org/10.1002/andp.19073281003>.
22. Ritchie, R.H., Arakawa, E.T., Cowan, J.J., & Hamm, R.N. (1968). Surface-plasmon resonance effect in grating diffraction. *Physical Review Letters*, 21(22), 1530–1533. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.21.1530>.
23. Turbadar, T. (1959). Complete absorption of light by thin metal films. *Proceedings of the Physical Society*, 73(1), 40–44. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0370-1328/73/1/307/meta>.
24. Otto, A. (1968). Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and nuclei*, 216(4), 398–410. <https://doi.org/10.1007/BF01391532>.
25. Kretschmann, E., & Raether, H. (1968). Radiative decay of non radiative surface plasmons excited by light. *Zeitschrift für Naturforschung A*, 23(12), 2135–2136. <https://doi.org/10.1515/zna-1968-1247>.
26. Barnes, W.L., Dereux, A., & Ebbesen, T.W. (2003). Surface plasmon subwavelength optics. *Nature*, 424(6950), 824–830. <https://www.nature.com/articles/nature01937>.
27. Gramotnev, D.K., & Bozhevolnyi, S.I. (2014). Nanofocusing of electromagnetic radiation. *Nature Photonics*, 8(1), 13–22. <https://www.nature.com/articles/nphoton.2013.232>.
28. Maier, S.A., & Atwater, H.A. (2005). Plasmonics: Localization and guiding of electromagnetic energy in metal/dielectric structures. *Journal of Applied Physics*, 98(1), 011101-1–011101-9. <https://doi.org/10.1063/1.1951057>.
29. Ozbay, E. (2006). Plasmonics: merging photonics and electronics at nanoscale dimensions. *Science*, 311(5758), 189–193. doi: 10.1126/science.1114849.

30. Atwater, H.A. (2007). The promise of plasmonics. *Scientific American*, 296(4), 56–62. doi:10.1038/scientificamerican0407-56.
31. Kauranen, M., & Zayats, A.V. (2012). Nonlinear plasmonics. *Nature Photonics*, 6(11), 737–748. <https://www.nature.com/articles/nphoton.2012.244>.
32. Sinibaldi, A., Danz, N., Descrovi, E., Munzert, P., Schulz, U., Sonntag, F., & Michelotti, F. (2012). Direct comparison of the performance of Bloch surface wave and surface plasmon polariton sensors. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 174, 292–298. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2012.07.015>.
33. Homola, J., Yee, S.S., & Gauglitz, G. (1999). Surface plasmon resonance sensors. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 54(1-2), 3–15. [https://doi.org/10.1016/S0925-4005\(98\)00321-9](https://doi.org/10.1016/S0925-4005(98)00321-9).
34. Zayats, A.V., Smolyaninov, I.I., & Maradudin, A.A. (2005). Nano-optics of surface plasmon polaritons. *Physics Reports*, 408(3-4), 131–314. <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2004.11.001>.
35. Ebbesen, T.W., Lezec, H.J., Ghaemi, H.F., Thio, T., & Wolff, P.A. (1998). Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays. *Nature*, 391(6668), 667–669. <https://www.nature.com/articles/35570>.
36. Koerkamp, K.K., Enoch, S., Segerink, F.B., Van Hulst, N.F., & Kuipers, L. (2004). Strong influence of hole shape on extraordinary transmission through periodic arrays of subwavelength holes. *Physical Review Letters*, 92(18), 183901-1–183901-4. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.183901>.
37. Ruan, H., Shuang, Y., Li, L., & Cui, T. (2017). Extraordinary optical transmission through a rectangular hole filled with extreme uniaxial metamaterials. *Optics Letters*, 42(12), 2386–2389. <https://doi.org/10.1364/OL.42.002386>.
38. Dionne, J.A., Sweatlock, L.A., Atwater, H.A., & Polman, A. (2006). Plasmon slot waveguides: Towards chip-scale propagation with subwavelength-scale localization. *Physical Review B*, 73(3), 035407-1–035407-9. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.035407>.

39. Goykhman, I., Desiatov, B., Khurgin, J., Shappir, J., & Levy, U. (2011). Locally oxidized silicon surface-plasmon Schottky detector for telecom regime. *Nano Letters*, 11(6), 2219–2224. doi: 10.1021/nl200187v.
40. Zhang, H.C., Cui, T.J., Zhang, Q., Fan, Y., & Fu, X. (2015). Breaking the challenge of signal integrity using time-domain spoof surface plasmon polaritons. *ACS Photonics*, 2(9), 1333–1340. doi: 10.1021/acsp Photonics.5b00316.
41. Gao, X., & Cui, T.J. (2015). Spoof surface plasmon polaritons supported by ultrathin corrugated metal strip and their applications. *Nanotechnology Reviews*, 4(3), 239–258. <https://doi.org/10.1515/ntrev-2014-0032>.
42. Anwar, R.S., Ning, H., & Mao, L. (2017). Recent advancements in surface plasmon polaritons-plasmonics in subwavelength structures at microwave and terahertz regime. *Digital Communications and Networks*, 1–14. <https://doi.org/10.1016/j.dcan.2017.08.004>.
43. Davis, T.J., Gómez, D.E., & Roberts, A. (2017). Plasmonic circuits for manipulating optical information. *Nanophotonics*, 6(3), 543–559. doi 10.1515/nanoph-2016-0131.
44. Дмитрук, М.Л., & Малинич, С.З. (2014). Поверхневі плазмонні резонанси та їх прояв у оптичних властивостях наноструктур благородних металів. *Укр. фіз. журн. Огляди*, 9(1), 3–37. [https://www.researchgate.net/profile/Serhiy\\_Malynych/publication/](https://www.researchgate.net/profile/Serhiy_Malynych/publication/).
45. Palik, E.D. (1991) *Handbook of Optical constants of Solids*. Academic press.
46. Maier, S. A. (2007). *Plasmonics: fundamentals and applications*. Springer Science & Business Media.
47. Kreibig, U., & Vollmer, M. (1995) *Optical Properties of Metal Clusters*. Berlin: Springer
48. Biagioni, P., Huang, J.-S., & Hecht, B. (2012) Nanoantennas for visible and infrared radiation. *Reports on Progress in Physics*, 75(2), 024402-1–024402-44. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0034-4885/75/2/024402/meta>.

49. Sanders, A.W., Routenberg, D.A., Wiley, B.J., Xia, Y., Dufresne, E.R., & Reed, M.A. (2006) Observation of plasmon propagation, redirection, and fan-out in silver nanowires. *Nano Letters*, 6, 1822–1826. doi: 10.1021/nl052471v.
50. Morozov, Y. M., Lapchuk, A. S., Fu, M. L., Kryuchyn, A. A., Huang, H. R., & Le, Z. C. (2018). Numerical analysis of end-fire coupling of surface plasmon polaritons in a metal-insulator-metal waveguide using a simple photoplastic connector. *Photonics Research*, 6(3), 149-156. <https://doi.org/10.1364/PRJ.6.000149>.
51. Etchegoin, P.G. (2013). Plasmonics and spectroscopy. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15(15), 5261–5261. doi: 10.1039/c3cp90034g.
52. Chen, J., Badioli, M., Alonso-González, P., Thongrattanasiri, S., Huth, F., Osmond, J., & Elorza, A.Z. (2012). Optical nano-imaging of gate-tunable graphene plasmons. *Nature*, 487(7405), 77–81. <https://www.nature.com/articles/nature11254>.
53. Stratakis, E., & Kymakis, E. (2013). Nanoparticle-based plasmonic organic photovoltaic devices. *Materials Today*, 16(4), 133–146. <https://doi.org/10.1016/j.mattod.2013.04.006>.
54. Berini, P., & De Leon, I. (2012). Surface plasmon–polariton amplifiers and lasers. *Nature Photonics*, 6(1), 16–24. <https://www.nature.com/articles/nphoton.2011.285>
55. Maier, S.A., Kik, P.G., Atwater, H.A., Meltzer, S., Harel, E., Koel, B.E., & Requicha, A.A. (2003). Local detection of electromagnetic energy transport below the diffraction limit in metal nanoparticle plasmon waveguides. *Nature Materials*, 2(4), 229–232. <https://www.nature.com/articles/nmat852>.
56. Poletti, A., & Treville, A. (2016). Nano and micro-sensors: Real time monitoring for the smart and sustainable city. *Chemical Engineering Transactions*, 47, 1–6. <http://www.aidic.it/cet/16/47/001.pdf>.
57. Vigneshvar, S., Sudhakumari, C.C., Senthilkumaran, B., & Prakash, H. (2016). Recent advances in biosensor technology for potential applications—an overview. *Frontiers in Bioengineering and Biotechnology*, 4, 11-1–11-9. <https://doi.org/10.3389/fbioe.2016.00011>.

58. Homola, J. (2008). Surface plasmon resonance sensors for detection of chemical and biological species. *Chemical Reviews*, 108(2), 462–493. doi: 10.1021/cr068107d.
59. Homola, J. (2006). Electromagnetic theory of surface plasmons. In *Surface plasmon resonance based sensors* (pp. 3-44). Springer, Berlin, Heidelberg.
60. Huang, D.W., Ma, Y.F., Sung, M.J., & Huang, C.P. (2010). Approach the angular sensitivity limit in surface plasmon resonance sensors with low index prism and large resonant angle. *Optical Engineering*, 49(5), 054403-1–054403-6. <https://doi.org/10.1117/1.3431662>.
61. Lee, C.C., & Jen, Y.J. (1999). Influence of surface roughness on the calculation of optical constants of a metallic film by attenuated total reflection. *Applied Optics*, 38(28), 6029–6033. <https://doi.org/10.1364/AO.38.006029>.
62. Yan, H., Hong-An, Y., Song-Quan, L., & Yin-Feng, D. (2013). The determination of the thickness and the optical dispersion property of gold film using spectroscopy of a surface plasmon in the frequency domain. *Chinese Physics B*, 22(2), 027301-1–027301-6. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1674-1056/22/2/027301/meta>.
63. Cardin, J., & Leduc, D. (2008). Determination of refractive index, thickness, and the optical losses of thin films from prism-film coupling measurements. *Applied Optics*, 47(7), 894–900. <https://doi.org/10.1364/AO.47.000894>.
64. Mukhtar, W.M., Halim, R.M., & Hassan, H. (2017). Optimization of SPR signals: Monitoring the physical structures and refractive indices of prisms. *EPJ Web of Conferences*, *EDP Sciences*, 162, 01001-1–01001-5. <https://doi.org/10.1051/epjconf/201716201001>.
65. Roh, S., Chung, T., & Lee, B. (2011). Overview of the characteristics of micro-and nano-structured surface plasmon resonance sensors. *Sensors*, 11(2), 1565–1588. doi:10.3390/s110201565.
66. Gupta, G., & Kondoh, J. (2007). Tuning and sensitivity enhancement of surface plasmon resonance sensor. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 122(2), 381–388. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2006.06.005>

67. Puiu, M., & Bala, C. (2016). SPR and SPR imaging: Recent trends in developing nanodevices for detection and real-time monitoring of biomolecular events. *Sensors*, *16*(6), 870-2–870-15. doi:10.3390/s16060870.
68. Lapchuk, A., Prygun, O., Fu, M., Le, Z., Xiong, Q., & Kryuchyn, A. (2017). Dispersion of speckle suppression efficiency for binary DOE structures: spectral domain and coherent matrix approaches. *Optics express*, *25*(13), 14575-14597. <https://doi.org/10.1364/OE.25.014575>.
69. Zeng, Y., Hu, R., Wang, L., Gu, D., He, J., Wu, S.Y., & Shao, Y. (2017). Recent advances in surface plasmon resonance imaging: detection speed, sensitivity, and portability. *Nanophotonics*, *6*(5), 1017–1030. doi 10.1515/nanoph-2017-0022.
70. Oliveira, L.C., Moreira, C.S., Lima, A.M.N., & Neff, H. (2016). A prism-based polymeric surface plasmon resonance biochip for angular and spectral modes. *Procedia Engineering*, *168*, 1350–1353. <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2016.11.372>.
71. Nuryadi, R., Mayasari, R. D., Aprilia, L., & Yulianto, B. (2015, August). Fabrication of ZnO/Au/prism-based surface plasmon resonance device for gas detection. *International Conference on Quality in Research (QiR)* (pp. 26-29). IEEE.
72. Lahav, A., Auslender, M., & Abdulhalim, I. (2008). Sensitivity enhancement of guided-wave surface-plasmon resonance sensors. *Optics Letters*, *33*(21), 2539–2541. <https://doi.org/10.1364/OL.33.002539>
73. Lahav, A., Shalabaney, A., & Abdulhalim, I.S. (2009). Surface plasmon sensor with enhanced sensitivity using top nano dielectric layer. *Journal of Nanophotonics*, *3*(1), 031501–031514. <https://doi.org/10.1117/1.3079803>.
74. Lee, K.S., Son, J.M., Jeong, D.Y., Lee, T.S., & Kim, W.M. (2010). Resolution enhancement in surface plasmon resonance sensor based on waveguide coupled mode by combining a bimetallic approach. *Sensors*, *10*(12), 11390–11399. <https://doi.org/10.3390/s101211390>.

75. Kegel, L.L., Boyne, D., & Booksh, K.S. (2014). Sensing with prism-based near-infrared surface plasmon resonance spectroscopy on nanohole array platforms. *Analytical chemistry*, 86(7), 3355–3364. doi: 10.1021/ac4035218.
76. Cherifi, A., & Bouhafs, B. (2017). Sensitivity enhancement of a surface plasmon resonance sensor using porous metamaterial layers. *Materials Research Express*, 4(12), 125009-1–125009-5. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/2053-1591/aa9ba8/meta>.
77. Boyd, J.T., & Kuo, C.S. (1976). Composite prism–grating coupler for coupling light into high refractive index thin-film waveguides. *Applied optics*, 15(7), 1681–1683. [https://doi.org/10.1364/AO.15.1681\\_1](https://doi.org/10.1364/AO.15.1681_1)
78. Byun, K.M., Jang, S.M., Kim, S.J., & Kim, D. (2009). Effect of target localization on the sensitivity of a localized surface plasmon resonance biosensor based on subwavelength metallic nanostructures. *JOSA A*, 26(4), 1027–1034. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.26.001027>
79. Patskovsky, S., Kabashin, A.V., Meunier, M., & Luong, J.H. (2003). Surface plasmon resonance sensor with silicon-based prism coupling. *Advanced Biomedical and Clinical Diagnostic Systems*, 4958, 144–149. <https://doi.org/10.1117/12.477863>.
80. Moreira, C.D.S., Oliveira, L.C., Fischer, R., Medeiros, E.S., Lima, A.M.N., & Neff, H. (2016). Polymer-based surface plasmon resonance biochip: construction and experimental aspects. *Research on Biomedical Engineering*, 32(1), 92–103. <http://dx.doi.org/10.1590/2446-4740.0709>.
81. Nenninger, G.G., Piliarik, M., & Homola, J. (2002). Data analysis for optical sensors based on spectroscopy of surface plasmons. *Measurement Science and Technology*, 13(12), 2038–2046. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0957-0233/13/12/332/meta>.
82. Homola, J., Lu, H.B., & Yee, S.S. (1999). Dual-channel surface plasmon resonance sensor with spectral discrimination of sensing channels using dielectric overlayer. *Electronics Letters*, 35(13), 1105–1106. doi: 10.1049/el:19990767.

83. Wei, Y., Su, Y., Liu, C., Nie, X., Liu, Z., Zhang, Y., & Zhang, Y. (2017). Two-Channel SPR Sensor Combined Application of Polymer-and Vitreous-Clad Optic Fibers. *Sensors*, *17*(12), 2862-1–2862-11. <https://doi.org/10.3390/s17122862>.
84. Den Herder, J.W., Brinkman, A.C., Kahn, S.M., Branduardi-Raymont, G., Thomsen, K., Aarts, H., & Decker, T. (2001). The reflection grating spectrometer on board XMM-Newton. *Astronomy & Astrophysics*, *365*(1), L7-L17. <https://doi.org/10.1051/0004-6361:20000058>.
85. Siesler, H.W., Ozaki, Y., Kawata, S., & Heise, H.M. (2008). *Near-infrared spectroscopy: principles, instruments, applications*. John Wiley & Sons.
86. Leitgeb, R., Wojtkowski, M., Kowalczyk, A., Hitzenberger, C.K., Sticker, M., & Fercher, A.F. (2000). Spectral measurement of absorption by spectroscopic frequency-domain optical coherence tomography. *Optics Letters*, *25*(11), 820–822. <https://doi.org/10.1364/OL.25.000820>
87. Triebel, P., Moeller, T., Diehl, T., Burkhardt, M., Erdmann, L., & Gatto, A. (2016). Optical Diffraction Gratings for Spectroscopic Instruments. *Optik & Photonik*, *11*(2), 41–44. <https://doi.org/10.1002/opph.201600010>.
88. Pügner, T., Knobbe, J., & Grüger, H. (2016). Near-infrared grating spectrometer for mobile phone applications. *Applied Spectroscopy*, *70*(5), 734–745. <https://www.osapublishing.org/as/abstract.cfm?uri=as-70-5-734>.
89. Sellar, R.G., & Boreman, G.D. (2005). Classification of imaging spectrometers for remote sensing applications. *Optical Engineering*, *44*(1), 013602-1–013602-3. doi: 10.1117/1.1813441.
90. Voronov, D.L., Warwick, T., Gullikson, E.M., Salmassi, F., & Padmore, H.A. (2016). Innovative diffraction gratings for high-resolution resonant inelastic soft x-ray scattering spectroscopy. *AIP Conference Proceedings*, *1741*(1), 040015-1–040015-3. <https://doi.org/10.1063/1.4952887>.
91. Muttikulangara, S.S., Baranski, M., Rehman, S., Hu, L., & Miao, J. (2017). MEMS Tunable Diffraction Grating for Spaceborne Imaging Spectroscopic Applications. *Sensors*, *17*(10), 2372-1–2372-13. doi:10.3390/s17102372.



92. Borovytsky, V., Hudz, O., & Antonenko, V. (2017, August). The improved optical setup for Abbe-Porter experiment. *Current Developments in Lens Design and Optical Engineering XVIII* (p. 1037513). International Society for Optics and Photonics. <https://doi.org/10.1117/12.2273714>
93. Jelger, P., Wang, P., Sahu, J.K., Laurell, F., & Clarkson, W.A. (2008). High-power linearly-polarized operation of a cladding-pumped Yb fibre laser using a volume Bragg grating for wavelength selection. *Optics Express*, *16*(13), 9507–9512. <https://doi.org/10.1364/OE.16.009507>
94. Tarasov, A., & Chu, H. (2015). Solid-state laser wavelength selection and tuning by fused-silica-transmission gratings with subwavelength deep-surface relief. *Optics Letters*, *40*(15), 3572–3575. <https://doi.org/10.1364/OL.40.003572>
95. Treacy, E. (1969). Optical pulse compression with diffraction gratings. *IEEE Journal of quantum Electronics*, *5*(9), 454–458. doi: 10.1109/JQE.1969.1076303.
96. Arbore, M.A., Marco, O., & Fejer, M.M. (1997). Pulse compression during second-harmonic generation in aperiodic quasi-phase-matching gratings. *Optics Letters*, *22*(12), 865–867. <https://doi.org/10.1364/OL.22.000865>
97. Alessi, D.A., Rosso, P.A., Nguyen, H.T., Aasen, M.D., Britten, J.A., & Haefner, C. (2016). Active cooling of pulse compression diffraction gratings for high energy, high average power ultrafast lasers. *Optics Express*, *24*(26), 30015–30023. <https://doi.org/10.1364/OE.24.030015>.
98. Minoli, D. (2003). *Telecommunications technology handbook*. Artech House.
99. Takahashi, H., Suzuki, S., Kato, K., & Nishi, I. (1990). Arrayed-waveguide grating for wavelength division multi/demultiplexer with nanometre resolution. *Electronics Letters*, *26*(2), 87–88. doi: 10.1049/el:19900058.
100. Brouckaert, J., Bogaerts, W., Selvaraja, S., Dumon, P., Baets, R., & Van Thourhout, D. (2008). Planar concave grating demultiplexer with high reflective Bragg reflector facets. *IEEE Photonics Technology Letters*, *20*(4), 309–311. doi: 10.1109/LPT.2007.915585.
101. Alipour-Banaei, H., Mehdizadeh, F., & Hassangholizadeh-Kashtiban, M. (2013). A novel proposal for all optical PhC-based demultiplexers suitable for DWDM

- applications. *Optical and Quantum Electronics*, 45(10), 1063–1075. <https://doi.org/10.1007/s11082-013-9717-x>.
102. Jafari, A., & Kirk, A.G. (2011). Demonstration of distributed etched diffraction grating demultiplexer. *IEEE Photonics Journal*, 3(4), 651–657. doi: 10.1109/jphot.2011.2159582.
103. Zhou, G., Logeeswaran, V.J., Tay, F.E., & Chau, F.S. (2004). Diffraction grating scanner using a micromachined resonator. *17th International Conference on Micro Electro Mechanical Systems, (MEMS)* (pp. 45–48). IEEE
104. Fitio, V.M., & Smirnova, T.N. (2012). Analysis of light wave diffraction and amplification by reflection grating operating in the second-order Bragg regime 1. Approximate theory. *JOSA B*, 29(4), 691–697. <https://doi.org/10.1364/JOSAB.29.000691>
105. Fitio, V.M., & Smirnova, T.N. (2012). Analysis of light wave diffraction and amplification by reflection grating operating in the second-order Bragg regime 2. reflectivity and spectral characteristics of a grating. *JOSA B*, 29(5), 944–949. <https://doi.org/10.1364/JOSAB.29.000944>
106. Bonod, N., & Neauport, J. (2016). Diffraction gratings: from principles to applications in high-intensity lasers. *Advances in Optics and Photonics*, 8(1), 156–199. <https://doi.org/10.1364/AOP.8.000156>.
107. Guo, D., Wang, M., & Hao, H. (2015). Displacement measurement using a laser feedback grating interferometer. *Applied Optics*, 54(31), 9320–9325. <https://doi.org/10.1364/AO.54.009320>.
108. Eggleton, B.J., Slusher, R.E., de Sterke, C.M., Krug, P.A., & Sipe, J.E. (1996). Bragg grating solitons. *Physical Review Letters*, 76(10), 1627–1630. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.76.1627>.
109. Kang, D.H., Park, S.O., Hong, C.S., & Kim, C.G. (2005). The signal characteristics of reflected spectra of fiber Bragg grating sensors with strain gradients and grating lengths. *NDT & E International*, 38(8), 712–718. <https://doi.org/10.1016/j.ndteint.2005.04.006>.

110. Divliansky, I. (2017). Volume Bragg Gratings: Fundamentals and Applications in Laser Beam Combining and Beam Phase Transformations. *Holographic Materials and Optical Systems*. InTech.
111. Porto, J.A., Garcia-Vidal, F.J., & Pendry, J.B. (1999). Transmission resonances on metallic gratings with very narrow slits. *Physical Review Letters*, 83(14), 2845–2848. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.83.2845>.
112. Vincenti, M.A., de Ceglia, D., Scalora, M., Akozbek, N., & Bloemer, M.J. (2011). Enhancement and Inhibition of Transmission from metal gratings: Engineering the Spectral Response. *Proc. of SPIE*, 7946, 794625-1–794625-7. doi: 10.1117/12.874673.
113. Treacy, M.M.J. (2002). Dynamical diffraction explanation of the anomalous transmission of light through metallic gratings. *Physical Review B*, 66(19), 195105-1–195105-10. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.195105>.
114. Bonod, N., Enoch, S., Li, L., Popov, E., & Nevière, M. (2003). Resonant optical transmission through thin metallic films with and without holes. *Optics Express*, 11(5), 482–490. <https://doi.org/10.1364/OE.11.000482>.
115. D'Aguanno, G., Mattiucci, N., Bloemer, M.J., De Ceglia, D., Vincenti, M.A., & Alù, A. (2011). Transmission resonances in plasmonic metallic gratings. *JOSA B*, 28(2), 253–264. <https://doi.org/10.1364/JOSAB.28.000253>.
116. Schröter, U., & Heitmann, D. (1998). Surface-plasmon-enhanced transmission through metallic gratings. *Physical Review B*, 58(23), 15419-1–15419-3. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.15419>.
117. Sun, Z., Jung, Y.S., & Kim, H.K. (2003). Role of surface plasmons in the optical interaction in metallic gratings with narrow slits. *Applied Physics Letters*, 83(15), 3021–3023. <https://doi.org/10.1063/1.1618021>.
118. Cao, Q., & Lalanne, P. (2002). Negative role of surface plasmons in the transmission of metallic gratings with very narrow slits. *Physical Review Letters*, 88(5), 057403-1–057403-4. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.057403>.

119. Bonod, N., Tayeb, G., Maystre, D., Enoch, S., & Popov, E. (2008). Total absorption of light by lamellar metallic gratings. *Optics Express*, *16*(20), 15431–15438. <https://doi.org/10.1364/OE.16.015431>
120. Chern, R.L., Chen, Y.T., & Lin, H.Y. (2010). Anomalous optical absorption in metallic gratings with subwavelength slits. *Optics Express*, *18*(19), 19510–19521. <https://doi.org/10.1364/OE.18.019510>.
121. Min, C., Li, J., Veronis, G., Lee, J.Y., Fan, S., & Peumans, P. (2010). Enhancement of optical absorption in thin-film organic solar cells through the excitation of plasmonic modes in metallic gratings. *Applied Physics Letters*, *96*(13), 133302-1–133302-3. <https://doi.org/10.1063/1.3377791>.
122. López-Rios, T., Mendoza, D., Garcia-Vidal, F.J., Sánchez-Dehesa, J., & Pannetier, B. (1998). Surface shape resonances in lamellar metallic gratings. *Physical Review Letters*, *81*(3), 665–668. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.81.665>.
123. Gat, N. (2000, April). Imaging spectroscopy using tunable filters: a review. *Wavelet Applications VII* (Vol. 4056, pp. 50-65). International Society for Optics and Photonics.
124. Quaranta, G., Basset, G., Martin, O. J., & Gallinet, B. (2017). Color-selective and versatile light steering with up-scalable subwavelength planar optics. *ACS Photonics*, *4*(5), 1060–1066. doi: 10.1021/acsp Photonics.7b00232.
125. Wang, S.S., & Magnusson, R. (1995). Multilayer waveguide-grating filters. *Applied Optics*, *34*(14), 2414–2420. <https://doi.org/10.1364/AO.34.002414>.
126. Marchetti, R., Vitali, V., Lacava, C., Cristiani, I., Giuliani, G., Muffato, V., & Carroll, L. (2017). Low-loss micro-resonator filters fabricated in silicon by CMOS-compatible lithographic techniques: design and characterization. *Applied Sciences*, *7*(2), 174–185. doi:10.3390/app7020174.
127. Bellini, B., Donisi, D., Asquini, R., & d'Alessandro, A. (2005). A tuneable waveguided optical filter made of polymer and liquid crystal slices operating in C-band: analysis of transmission and reflection properties. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, *429*(1), 265–276. <https://doi.org/10.1080/15421400590931006>

128. Guo, X., Zhang, X., Li, H., Liu, Y., & Liu, Y. (2010). A wide tuning range electro-optic filter based on long-period waveguide grating. *Chinese Science Bulletin*, 55(13), 1338–1342. <https://doi.org/10.1007/s11434-009-0359-0>.
129. Hill, K.O., & Meltz, G. (1997). Fiber Bragg grating technology fundamentals and overview. *Journal of Lightwave Technology*, 15(8), 1263–1276. doi: 10.1109/50.618320.
130. Goh, C.S., Set, S.Y., & Kikuchi, K. (2002). Widely tunable optical filters based on fiber Bragg gratings. *IEEE Photonics Technology Letters*, 14(9), 1306–1308. doi: 10.1109/LPT.2002.801080.
131. Lumeau, J., Smirnov, V., Glebov, A., & Glebov, L.B. (2010). Ultra-narrow bandpass filters based on volume Bragg grating technologies. *Photonics in the Transportation Industry: Auto to Aerospace III*, 7675, p. 76750H-1–76750H-3. <https://doi.org/10.1117/12.852637>.
132. Guo, T., Tam, H.Y., Krug, P.A., & Albert, J. (2009). Reflective tilted fiber Bragg grating refractometer based on strong cladding to core recoupling. *Optics Express*, 17(7), 5736–5742. <https://doi.org/10.1364/OE.17.005736>
133. Silva, R.E., Becker, M., Rothhardt, M., Bartelt, H., & Pohl, A.A. (2017). Electrically Tunable Multiwavelength Bragg Grating Filter Acoustically Induced in a Highly Birefringent Suspended Core Fiber. *IEEE Photonics Journal*, 9, 1–9. doi: 10.1109/JPHOT.2017.2654449.
134. Kaur, R., Sharma, N., & Kaur, J. (2017). RGB color filter based on triple layer high contrast grating in SOI waveguide. *Journal of Optics*, 46(3), 320–323. <https://doi.org/10.1007/s12596-016-0384-8>.
135. Yang, W., Sun, T., Rao, Y., Megens, M., Chan, T., Yoo, B. W., & Chang-Hasnain, C.J. (2014). High speed optical phased array using high contrast grating all-pass filters. *Optics Express*, 22(17), 20038–20044. <https://doi.org/10.1364/OE.22.020038>
136. Ott, D., SeGall, M., Divliansky, I., Venus, G., & Glebov, L. (2015). High-contrast filtering by multipass diffraction between paired volume Bragg gratings. *Applied Optics*, 54(31), 9065–9070. <https://doi.org/10.1364/AO.54.009065>.

137. Molesini, G. (1984). Reflection holographic gratings for optical filtering. *Optica Acta: International Journal of Optics*, 31(8), 903–916. <https://doi.org/10.1080/713821596>.
138. Havermeyer, F., Liu, W., Moser, C., Psaltis, D., & Steckman, G.J. (2004). Volume holographic grating-based continuously tunable optical filter. *Optical Engineering*, 43(9), 2017–2022. <https://doi.org/10.1117/1.1773775>.
139. Rakuljic, G. A., & Leyva, V. (1993). Volume holographic narrow-band optical filter. *Optics Letters*, 18(6), 459–461. <https://doi.org/10.1364/OL.18.000459>.
140. Glebov, A.L., Mokhun, O., Rapaport, A., Vergnole, S., Smirnov, V., & Glebov, L.B. (2012). Volume Bragg gratings as ultra-narrow and multiband optical filters. *Proc. SPIE 8428, Micro-Optics 2012*, 84280C-1–84280C-4. <https://doi.org/10.1117/12.923575>.
141. Magnusson, R., & Wang, S.S. (1992). New principle for optical filters. *Applied Physics Letters*, 61(9), 1022–1024. <https://doi.org/10.1063/1.107703>.
142. Nicolescu, E., & Escuti, M.J. (2010). Polarization-independent tunable optical filters using bilayer polarization gratings. *Applied optics*, 49(20), 3900–3904. <https://doi.org/10.1364/AO.49.003900>.
143. Mateus, C.F., Huang, M.C., Deng, Y., Neureuther, A.R., & Chang-Hasnain, C.J. (2004). Ultrabroadband mirror using low-index cladded subwavelength grating. *IEEE Photonics Technology Letters*, 16(2), 518-520. doi: 10.1109/LPT.2003.821258.
144. Dhawan, A., Canva, M., & Vo-Dinh, T. (2011). Narrow groove plasmonic nano-gratings for surface plasmon resonance sensing. *Optics Express*, 19(2), 787–813. <https://doi.org/10.1364/OE.19.000787>.
145. Couture, M., Zhao, S.S., & Masson, J.F. (2013). Modern surface plasmon resonance for bioanalytics and biophysics. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15(27), 11190–11216. doi: 10.1039/C3CP50281C.
146. Wijaya, E., Lenaerts, C., Maricot, S., Hastanin, J., Habraken, S., Vilcot, J.P., & Szunerits, S. (2011). Surface plasmon resonance-based biosensors: From the development of different SPR structures to novel surface functionalization

- strategies. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 15(5), 208–224. <https://doi.org/10.1016/j.cossms.2011.05.001>.
147. Singh, P. (2016). SPR biosensors: Historical perspectives and current challenges. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 229, 110–130. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2016.01.118>
148. Byun, K.M., Kim, S.J., & Kim, D. (2007). Grating-coupled transmission-type surface plasmon resonance sensors based on dielectric and metallic gratings. *Applied Optics*, 46(23), 5703–5708. <https://doi.org/10.1364/AO.46.005703>.
149. Dhawan, A., Canva, M., & Vo-Dinh, T. (2011). Narrow groove plasmonic nano-gratings for surface plasmon resonance sensing. *Optics Express*, 19(2), 787–813. <https://doi.org/10.1364/OE.19.000787>.
150. Pi, S., Zeng, X., Zhang, N., Ji, D., Chen, B., Song, H., & Song, Y. (2016). Dielectric-grating-coupled surface plasmon resonance from the back side of the metal film for ultrasensitive sensing. *IEEE Photonics Journal*, 8(1), 1–7. doi: 10.1109/JPHOT.2015.2509870.
151. Hu, C., & Liu, D. (2010). High-performance grating coupled surface plasmon resonance sensor based on Al-Au Bimetallic layer. *Modern Applied Science*, 4(6), 8–13. doi:10.5539/mas.v4n6p8.
152. Turker, B., Guner, H., Ayas, S., Ekiz, O.O., Acar, H., Guler, M.O., & Dâna, A. (2011). Grating coupler integrated photodiodes for plasmon resonance based sensing. *Lab on a Chip*, 11(2), 282–287. doi:10.1039/C0LC00081G.
153. Lu, M., Peng, W., Liu, Q., Liu, Y., Li, L., Liang, Y., & Masson, J.F. (2017). Dual channel multilayer-coated surface plasmon resonance sensor for dual refractive index range measurements. *Optics Express*, 25(8), 8563–8570. <https://doi.org/10.1364/OE.25.008563>
154. Sun, X., Shu, X., & Chen, C. (2015). Grating surface plasmon resonance sensor: angular sensitivity, metal oxidization effect of Al-based device in optimal structure. *Applied Optics*, 54(6), 1548–1554. <https://doi.org/10.1364/AO.54.001548>.
155. Nazarova, D., Nedelchev, L., & Sharlandjiev, P. (2013). Surface plasmon-polariton resonances in metal-coated holographic azopolymer gratings. *Bulgarian*

- Chemical Communications*, 45, 115–118. [https://www.researchgate.net/profile/Lian\\_Nedelchev/](https://www.researchgate.net/profile/Lian_Nedelchev/)
156. Hua-Jun, Z. (2012). High sensitivity refractive index gas sensing enhanced by surface plasmon resonance with nano-cavity antenna array. *Chinese Physics B*, 21(8), 087104-1–087104-5. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1674-1056/21/8/087104/meta>.
157. Jahanshahi, P., & Adikan, F.R.M. (2015). Sensitivity enhancement of graphene-based surface plasmon resonance biosensor using germanium nanowires grating. *Journal of Medical and Bioengineering*, 4(2), 145–149. doi:10.12720/jomb.4.2.145-149
158. Nikitin, P.I., Anokhin, P.M., & Beloglazov, A.A. (1997). Chemical sensors based on surface plasmon resonance in Si grating structures. *International Conference on Solid State Sensors and Actuators, TRANSDUCERS'97*, (pp. 1359–1362). IEEE.
159. Jandieri, V., Meng, P., Yasumoto, K., & Liu, Y. (2015). Scattering of light by gratings of metal-coated circular nanocylinders on a dielectric substrate. *JOSA A*, 32(7), 1384–1389. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.32.001384>.
160. Okamoto, T., Yamaguchi, I., & Kobayashi, T. (2000). Local plasmon sensor with gold colloid monolayers deposited upon glass substrates. *Optics Letters*, 25(6), 372–374. <https://doi.org/10.1364/OL.25.000372>.
161. Zhu, J., Qin, L., Song, S., Zhong, J., & Lin, S. (2015). Design of a surface plasmon resonance sensor based on grating connection. *Photonic Sensors*, 5(2), 159–165. <https://doi.org/10.1007/s13320-015-0244-1>.
162. Søndergaard, T., & Bozhevolnyi, S.I. (2009). Surface-plasmon polariton resonances in triangular-groove metal gratings. *Physical Review B*, 80(19), 195407-1–195407-9. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.195407>.
163. Ichihashi, K., Mizutani, Y., & Iwata, T. (2014). Enhancement of the sensitivity of a diffraction-grating-based surface plasmon resonance sensor utilizing the first- and negative-second-order diffracted lights. *Optical Review*, 21(5), 728–731. <https://doi.org/10.1007/s10043-014-0119-5>.



164. Болеста, І. (2012). Поверхневі плазмон-поляритони. *Електроніка та інформаційні технології*, (2), 3–26. [http://elit.lnu.edu.ua/pdf/2\\_1.pdf](http://elit.lnu.edu.ua/pdf/2_1.pdf).
165. Климов, В.В. (2010). *Наноплазмоника*. Физматлит.
166. Eustis, S., & El-Sayed, M.A. (2006). Why gold nanoparticles are more precious than pretty gold: noble metal surface plasmon resonance and its enhancement of the radiative and nonradiative properties of nanocrystals of different shapes. *Chemical Society Reviews*, 35(3), 209–217. doi: 10.1039/B514191E.
167. Dulkeith, E., Niedereichholz, T., Klar, T.A., Feldmann, J., Von Plessen, G., Gittins, D.I., & Caruso, F. (2004). Plasmon emission in photoexcited gold nanoparticles. *Physical Review B*, 70(20), 205424-1–205424-4. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.70.205424>.
168. Sönnichsen, C., Reinhard, B. M., Liphardt, J., & Alivisatos, A. P. (2005). A molecular ruler based on plasmon coupling of single gold and silver nanoparticles. *Nature Biotechnology*, 23(6), 741-1–741-5. <https://www.nature.com/articles/nbt1100>.
169. Salem, J.K., El-Nahhal, I.M., & Najri, B.A., Hammad, T.M. (2016). Utilization of surface Plasmon resonance band of silver nanoparticles for determination of critical micelle concentration of cationic surfactants. *Chemical Physics Letters*, 664, 154–158. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2016.10.025>
170. Barnes, W.L., Dereux, A., & Ebbesen, T.W. (2003). Surface plasmon subwavelength optics. *Nature*, 424(6950), 824–830. <https://www.nature.com/articles/nature01937>
171. De Aberasturi, D.J., Serrano-Montes, A.B., & Liz-Marzán, L.M. (2015). Modern applications of plasmonic nanoparticles: from energy to health. *Advanced Optical Materials*, 3(5), 602–617. <https://doi.org/10.1002/adom.201500053>.
172. Fritzsche, W., & Taton, T.A. (2003). Metal nanoparticles as labels for heterogeneous, chip-based DNA detection. *Nanotechnology*, 14(12), R63–R73.
173. Hu, M., Chen, J., Li, Z.Y., Au, L., Hartland, G.V., Li, X., & Xia, Y. (2006). Gold nanostructures: engineering their plasmonic properties for biomedical applications. *Chemical Society Reviews*, 35(11), 1084–1094.

174. Demchuk, A., Bolesta, I., Kushnir, O., & Kolych, I. (2017). The Computational Studies of Plasmon Interaction. *Nanoscale Research Letters*, *12*(1), 273. <https://doi.org/10.1186/s11671-017-2050-8>.
175. Pillai, S., Catchpole, K.R., Trupke, T., & Green, M.A. (2007). Surface plasmon enhanced silicon solar cells. *Journal of Applied Physics*, *101*(9), 093105-1–093105-8. <https://doi.org/10.1063/1.2734885>.
176. Atwater, H.A., & Polman, A. (2010). Plasmonics for improved photovoltaic devices. *Nature Materials*, *9*(3), 205–213. <https://www.nature.com/articles/nmat2629>.
177. Matheu, P., Lim, S.H., Derkacs, D., McPheeters, C., & Yu, E.T. (2008). Metal and dielectric nanoparticle scattering for improved optical absorption in photovoltaic devices. *Applied Physics Letters*, *93*(11), 113108-1–113108-3. <https://doi.org/10.1063/1.2957980>.
178. Narayanan, R., & El-Sayed, M.A. (2005). Catalysis with transition metal nanoparticles in colloidal solution: nanoparticle shape dependence and stability. *J. Phys. Chem. B*, *109*(26), 12663–12676. DOI: 10.1021/jp051066p.
179. Larsson, E.M., Langhammer, C., Zorić, I., & Kasemo, B. (2009). Nanoplasmonic probes of catalytic reactions. *Science*, *326*(5956), 1091–1094. doi:10.1126/science.1176593.
180. Awazu, K., Fujimaki, M., Rockstuhl, C., Tominaga, J., Murakami, H., Ohki, Y., & Watanabe, T. (2008). A plasmonic photocatalyst consisting of silver nanoparticles embedded in titanium dioxide. *Journal of the American Chemical Society*, *130*(5), 1676–1680. doi: 10.1021/ja076503n.
181. Špačková, B., Wrobel, P., Bocková, M., & Homola, J. (2016). Optical biosensors based on plasmonic nanostructures: a review. *Proceedings of the IEEE*, *104*(12), 2380–2408. DOI: 10.1109/JPROC.2016.2624340.
182. Miller, M.M., & Lazarides, A.A. (2005). Sensitivity of metal nanoparticle surface plasmon resonance to the dielectric environment. *The Journal of Physical Chemistry B*, *109*(46), 21556–21565. doi: 10.1021/jp054227y.

183. Cao, J., Sun, T., & Grattan, K.T. (2014). Gold nanorod-based localized surface plasmon resonance biosensors: A review. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 195, 332–351. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2014.01.056>.
184. Anker, J.N., Hall, W.P., Lyandres, O., Shah, N.C., Zhao, J., & Van Duyne, R.P. (2008). Biosensing with plasmonic nanosensors. *Nature Materials*, 7(6), 442–453. [https://doi.org/10.1142/9789814287005\\_0032](https://doi.org/10.1142/9789814287005_0032).
185. Ozbay, E. (2006). Plasmonics: merging photonics and electronics at nanoscale dimensions. *Science*, 311(5758), 189–193. doi: 10.1126/science.1114849.
186. Bar, H., Bhui, D.K., Sahoo, G.P., Sarkar, P., De, S.P., & Misra, A. (2009). Green synthesis of silver nanoparticles using latex of *Jatropha curcas*. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 339(1-3), 134–139. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2009.02.008>.
187. Kruis, F.E., Fissan, H., & Peled, A. (1998). Synthesis of nanoparticles in the gas phase for electronic, optical and magnetic applications. *Journal of Aerosol Science*, 29(5-6), 511–535. [https://doi.org/10.1016/S0021-8502\(97\)10032-5](https://doi.org/10.1016/S0021-8502(97)10032-5).
188. Lamprecht, B., Schider, G., Lechner, R. T., Ditlbacher, H., Krenn, J. R., Leitner, A., & Aussenegg, F. R. (2000). Metal nanoparticle gratings: influence of dipolar particle interaction on the plasmon resonance. *Physical Review Letters*, 84(20), 4721–4724. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.4721>.
189. Sharma, B., Frontiera, R.R., Henry, A.I., Ringe, E., & Van Duyne, R.P. (2012). SERS: Materials, applications, and the future. *Materials Today*, 15(1-2), 16–25. [https://doi.org/10.1016/S1369-7021\(12\)70017-2](https://doi.org/10.1016/S1369-7021(12)70017-2).
190. Seo, S., Chang, T.W., & Liu, G.L. (2018). 3D Plasmon Coupling Assisted Sers on Nanoparticle-Nanocup Array Hybrids. *Scientific Reports*, 8(1), 3002-1–3002-11. <https://www.nature.com/articles/s41598-018-19256-7>
191. Abalde-Cela, S., Aldeanueva-Potel, P., Mateo-Mateo, C., Rodríguez-Lorenzo, L., Alvarez-Puebla, R.A., & Liz-Marzán, L.M. (2010). Surface-enhanced Raman scattering biomedical applications of plasmonic colloidal particles. *Journal of the Royal Society Interface*, 7(4), S435–S450. doi: 10.1098/rsif.2010.0125.focus.

192. Maier, S.A., Kik, P.G., & Atwater, H.A. (2002). Observation of coupled plasmon-polariton modes in Au nanoparticle chain waveguides of different lengths: Estimation of waveguide loss. *Applied Physics Letters*, *81*(9), 1714–1716. <https://doi.org/10.1063/1.1503870>.
193. Maier, S.A., Kik, P.G., Atwater, H.A., Meltzer, S., Harel, E., Koel, B.E., & Requicha, A.A. (2003). Local detection of electromagnetic energy transport below the diffraction limit in metal nanoparticle plasmon waveguides. *Nature Materials*, *2*(4), 229–232. <https://www.nature.com/articles/nmat852>.
194. Fang, Y., & Sun, M. (2015). Nanoplasmonic waveguides: towards applications in integrated nanophotonic circuits. *Light: Science & Applications*, *4*(e294), 1–11. <https://www.nature.com/articles/lisa201567>.
195. Taylor, A.B., & Zijlstra, P. (2017). Single-molecule plasmon sensing: current status and future prospects. *ACS Sensors*, *2*(8), 1103–1122. doi: 10.1021/acssensors.7b00382.
196. Patra, P.P., Chikkaraddy, R., Tripathi, R.P., Dasgupta, A., & Kumar, G.P. (2014). Plasmo-fluidic single-molecule surface-enhanced Raman scattering from dynamic assembly of plasmonic nanoparticles. *Nature Communications*, *5*, 4357-1–4357-8. <https://www.nature.com/articles/ncomms5357>.
197. Stuart, D.A., Haes, A.J., Yonzon, C.R., Hicks, E.M., & Van Duyne, R.P. (2005). Biological applications of localised surface plasmonic phenomena. *IEEE Proceedings-Nanobiotechnology*, *152*(1), 13–32. doi:10.1049/ip-nbt:20045012.
198. Sperling, R.A., Gil, P.R., Zhang, F., Zanella, M., & Parak, W.J. (2008). Biological applications of gold nanoparticles. *Chemical Society Reviews*, *37*(9), 1896–1908. doi: 10.1039/B712170A.
199. Kauranen, M., & Zayats, A.V. (2012). Nonlinear plasmonics. *Nature Photonics*, *6*(11), 737–748. <https://www.nature.com/articles/nphoton.2012.244>.
200. Oldenburg, S.J., Hale, G.D., Jackson, J.B., & Halas, N.J. (1999). Light scattering from dipole and quadrupole nanoshell antennas. *Applied Physics Letters*, *75*(8), 1063–1065. <https://doi.org/10.1063/1.124597>.

201. Liu, C., Lv, J., Liu, Z., Zheng, S., Liu, Q., Sun, T., & Chu, P.K. (2016). Theoretical Assessment of Localized Surface Plasmon Resonance Properties of Au-Interlayer-Ag Multilayered Nanoshells. *Plasmonics*, *11*(6), 1589–1595. <https://doi.org/10.1007/s11468-016-0214-5>.
202. Durach, M., Rusina, A., Klimov, V.I., & Stockman, M.I. (2008). Nanoplasmonic renormalization and enhancement of Coulomb interactions. *New Journal of Physics*, *10*(10), 105011-1–105011-14. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1367-2630/10/10/105011/meta>.
203. Shishodia, M.S., Fainberg, B.D., & Nitzan, A. (2011). Theory of energy transfer interactions near sphere and nanoshell based plasmonic nanostructures. *Plasmonics: Metallic Nanostructures and Their Optical Properties IX*, *8096*, 80961G-1–80961G-5. <https://doi.org/10.1117/12.892940>.
204. Kalele, S., Gosavi, S.W., Urban, J., & Kulkarni, S.K. (2006). Nanoshell particles: synthesis, properties and applications. *Current Science*, 1038–1052. <https://www.jstor.org/stable/24093981>.
205. Liang, Z., Li, X., Xie, Y., & Liu, S. (2014). ‘Smart’ gold nanoshells for combined cancer chemotherapy and hyperthermia. *Biomedical Materials*, *9*(2), 025012-1–025012-6. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1748-6041/9/2/025012/meta>.
206. Tam, F., Moran, C., & Halas, N. (2004). Geometrical parameters controlling sensitivity of nanoshell plasmon resonances to changes in dielectric environment. *The Journal of Physical Chemistry B*, *108*(45), 17290–17294. doi: 10.1021/jp048499x.
207. Ochsenkühn, M.A., Jess, P.R., Stoquert, H., Dholakia, K., & Campbell, C.J. (2009). Nanoshells for surface-enhanced Raman spectroscopy in eukaryotic cells: cellular response and sensor development. *ACS Nano*, *3*(11), 3613–3621. doi: 10.1021/nn900681c.
208. Jiang, X., Hu, S., Li, Z., Lv, J., & Si, G. (2016). Fabrication and characterization of plasmonic nanorods with high aspect ratios. *Optical Materials*, *58*, 323–326. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2016.05.013>.

209. Liu, Y., Yuan, H., Kersey, F.R., Register, J.K., Parrott, M.C., & Vo-Dinh, T. (2015). Plasmonic gold nanostars for multi-modality sensing and diagnostics. *Sensors*, *15*(2), 3706–3720. <https://doi.org/10.3390/s150203706>.
210. Li, M., Cushing, S.K., Liang, H., Suri, S., Ma, D., & Wu, N. (2013). Plasmonic nanorice antenna on triangle nanoarray for surface-enhanced Raman scattering detection of hepatitis B virus DNA. *Analytical Chemistry*, *85*(4), 2072–2078. doi: 10.1021/ac303387a.
211. Abid, I., Bohloul, A., Najmaei, S., Avendano, C., Liu, H. L., Péchou, R., & Lou, J. (2016). Resonant surface plasmon–exciton interaction in hybrid MoSe<sub>2</sub>@Au nanostructures. *Nanoscale*, *8*(15), 8151–8159. doi: 10.1039/C6NR00829A.
212. Cao, E., Lin, W., Sun, M., Liang, W., & Song, Y. (2018). Exciton-plasmon coupling interactions: from principle to applications. *Nanophotonics*, *7*(1), 145–167. doi: <https://doi.org/10.1515/nanoph-2017-0059>.
213. Fofang, N.T., Grady, N.K., Fan, Z., Govorov, A.O., & Halas, N.J. (2011). Plexciton dynamics: exciton– plasmon coupling in a J-aggregate– Au nanoshell complex provides a mechanism for nonlinearity. *Nano Letters*, *11*(4), 1556–1560. doi: 10.1021/nl104352.
214. Zhao, W., Wang, S., Liu, B., Verzhbitskiy, I., Li, S., Giustiniano, F., & Oulton, R.F. (2016). Exciton–plasmon coupling and electromagnetically induced transparency in monolayer semiconductors hybridized with Ag nanoparticles. *Advanced Materials*, *28*(14), 2709–2715. <https://doi.org/10.1002/adma.201504478>.
215. Prasad, P. N. (2004). *Nanophotonics*. John Wiley & Sons.
216. Beecroft, L.L., & Ober, C.K. (1997). Nanocomposite materials for optical applications. *Chemistry of Materials*, *9*(6), 1302–1317. doi: 10.1021/cm960441a.
217. Wang, H.Q., Batentschuk, M., Osvet, A., Pinna, L., & Brabec, C.J. (2011). Rare-Earth Ion Doped Up-Conversion Materials for Photovoltaic Applications. *Advanced Materials*, *23*(22-23), 2675–2680. <https://doi.org/10.1002/adma.201100511>.

218. Dresselhaus, M.S., Chen, G., Ren, Z.F., Dresselhaus, G., Henry, A., & Fleurial, J.P. (2009). New composite thermoelectric materials for energy harvesting applications. *JOM*, 61(4), 86–90. <https://doi.org/10.1007/s11837-009-0058-y>.
219. Cho, N., Roy Choudhury, K., Thapa, R.B., Sahoo, Y., Ohulchanskyy, T., Cartwright, A.N., & Prasad, P.N. (2007). Efficient Photodetection at IR Wavelengths by Incorporation of PbSe–Carbon-Nanotube Conjugates in a Polymeric Nanocomposite. *Advanced Materials*, 19(2), 232–236. <https://doi.org/10.1002/adma.200600648>.
220. Brennan, L.J., Purcell-Milton, F., Salmeron, A.S., Zhang, H., Govorov, A.O., Fedorov, A.V., & Gun'ko, Y.K. (2015). Hot plasmonic electrons for generation of enhanced photocurrent in gold-TiO<sub>2</sub> nanocomposites. *Nanoscale Research Letters*, 10(1), 38-1–38-12. <https://doi.org/10.1186/s11671-014-0710-5>.
221. Berry Jr, K.R., Dunklin, J.R., Blake, P.A., & Roper, D.K. (2015). Thermal dynamics of plasmonic nanoparticle composites. *The Journal of Physical Chemistry C*, 119(19), 10550–10557. doi: 10.1021/jp512701v.
222. Ajayan, P.M., Schadler, L.S., & Braun, P.V. (2006). *Nanocomposite science and technology*. John Wiley & Sons.
223. Rafiee, M.A., Rafiee, J., Wang, Z., Song, H., Yu, Z.Z., & Koratkar, N. (2009). Enhanced mechanical properties of nanocomposites at low graphene content. *ACS Nano*, 3(12), 3884–3890. doi: 10.1021/nm9010472.
224. Qi, X.Y., Yan, D., Jiang, Z., Cao, Y.K., Yu, Z.Z., Yavari, F., & Koratkar, N. (2011). Enhanced electrical conductivity in polystyrene nanocomposites at ultra-low graphene content. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 3(8), 3130–3133. doi: 10.1021/am200628c.
225. Tyagi, M., & Tyagi, D. (2014). Polymer Nanocomposites and their Applications in Electronics Industry. *Int. J. Electron. Electr. Eng*, 7(6), 603–608. [https://www.ripublication.com/irph/ijeec\\_spl/ijeecv7n6\\_10.pdf](https://www.ripublication.com/irph/ijeec_spl/ijeecv7n6_10.pdf).
226. Leszczyńska, A., Njuguna, J., Pielichowski, K., & Banerjee, J.R. (2007). Polymer/montmorillonite nanocomposites with improved thermal properties: Part I. Factors influencing thermal stability and mechanisms of thermal stability

- improvement. *Thermochimica Acta*, 453(2), 75–96.  
<https://doi.org/10.1016/j.tca.2006.11.002>.
227. Chronakis, I.S. (2005). Novel nanocomposites and nanoceramics based on polymer nanofibers using electrospinning process—a review. *Journal of Materials Processing Technology*, 167(2-3), 283–293.  
<https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2005.06.053>.
228. Mol, B., Joy, L.K., Thomas, H., Thomas, V., Joseph, C., Narayanan, T.N., & Anantharaman, M.R. (2016). Evidence for enhanced optical properties through plasmon resonance energy transfer in silver silica nanocomposites. *Nanotechnology*, 27(8), 085701-1–085701-4. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0957-4484/27/8/085701/meta>.
229. Carvalho, D., Sousa, T., Morais, P.V., & Piedade, A.P. (2016). Polymer/metal nanocomposite coating with antimicrobial activity against hospital isolated pathogen. *Applied Surface Science*, 379, 489–496.  
<https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2016.04.109>.
230. Kreibig, U., & Vollmer, M. (2013). *Optical properties of metal clusters*. Springer Science & Business Media.
231. Korotcenkov, G. (2014). Nanocomposites in Electrochemical Sensors. In *Handbook of Gas Sensor Materials* (pp. 223–235) Springer, New York.
232. Godovsky, D.Y. (2000). Device applications of polymer-nanocomposites. *Biopolymers·PVA Hydrogels, Anionic Polymerisation Nanocomposites* (pp. 163–205). Springer, Berlin, Heidelberg.
233. Shrivastava, S., Jadon, N., & Jain, R. (2016). Next-generation polymer nanocomposite-based electrochemical sensors and biosensors: A review. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 82, 55–67.  
<https://doi.org/10.1016/j.trac.2016.04.005>.
234. Kondawar, S.B., & Patil, P.T. (2017). Conducting Polymer Nanocomposites for Sensor Applications. *Conducting Polymer Hybrids*, (pp. 223–267). Springer, Cham.



235. Bolesta, I., Vakiv, M., Haiduchok, V., Kushnir, O., Demchuk, A., Nastyshyn, S., & Gamernyk, R. (2018). Optical Properties of LiNbO<sub>3</sub>-Ag Nanocomposites. *Acta Physica Polonica, A*, 133(4). doi: 10.12693/APhysPolA.133.860.
236. Vladoiu, R., Porosnicu, C., Mandes, A., Jepu, I., Dinca, V., Marcu, A., & Avotina, L. (2016). DLC Thin Films and Carbon Nanocomposite Growth by Thermionic Vacuum Arc (TVA) Technology. *Diamond and Carbon Composites and Nanocomposites*, (pp. 23–35). InTech,.
237. Tripathi, S.N., Rao, G.S., Mathur, A.B., & Jasra, R. (2017). Polyolefin/graphene nanocomposites: a review. *RSC Advances*, 7(38), 23615–23632. doi: 10.1039/C6RA28392F.
238. Chawla, K.K. (2013). *Ceramic matrix composites*. Springer Science & Business Media.
239. Ceschini, L., Dahle, A., Gupta, M., Jarfors, A.E.W., Jayalakshmi, S., Morri, A., & Singh, R.A. (2017). Metal Matrix Nanocomposites: An Overview. *Aluminum and Magnesium Metal Matrix Nanocomposites*, (pp. 1–17). Springer, Singapore.
240. Faupel, F., Zaporojtchenko, V., Strunskus, T., & Elbahri, M. (2010). Metal-polymer nanocomposites for functional applications. *Advanced Engineering Materials*, 12(12), 1177–1190. <https://doi.org/10.1002/adem.201000231>.
241. Gao, B., Rozin, M.J., & Tao, A.R. (2013). Plasmonic nanocomposites: polymer-guided strategies for assembling metal nanoparticles. *Nanoscale*, 5(13), 5677–5691. doi: 10.1039/C3NR01091K.
242. Reyna, A.S., & de Araújo, C.B. (2017). High-order optical nonlinearities in plasmonic nanocomposites—a review. *Advances in Optics and Photonics*, 9(4), 720–774. <https://doi.org/10.1364/AOP.9.000720>.
243. Taflove, A., & Hagness, S.C. (2005). *Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method*. Artech House.
244. Bao, G., Chen, Z., & Wu, H. (2005). Adaptive finite-element method for diffraction gratings. *JOSA A*, 22(6), 1106–1114. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.22.001106>.

245. Li, L. (1993). Multilayer modal method for diffraction gratings of arbitrary profile, depth, and permittivity. *JOSA A*, 10(12), 2581–2591. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.10.002581>.
246. Knop, K. (1978). Rigorous diffraction theory for transmission phase gratings with deep rectangular grooves. *JOSA*, 68(9), 1206–1210. <https://doi.org/10.1364/JOSA.68.001206>.
247. Moharam, M.G., & Gaylord, T.K. (1981). Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction. *JOSA*, 71(7), 811–818. <https://doi.org/10.1364/JOSA.71.000811>.
248. Li, L., & Haggans, C.W. (1993). Convergence of the coupled-wave method for metallic lamellar diffraction gratings. *JOSA A*, 10(6), 1184–1189. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.10.001184>.
249. Granet, G., & Guizal, B. (1996). Efficient implementation of the coupled-wave method for metallic lamellar gratings in TM polarization. *JOSA A*, 13(5), 1019–1023. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.13.001019>.
250. Popov, E., & Nevière, M. (2000). Grating theory: new equations in Fourier space leading to fast converging results for TM polarization. *JOSA A*, 17(10), 1773–1784. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.17.001773>.
251. Li, L. (1996). Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures. *JOSA A*, 13(9), 1870–1876. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.13.001870>
252. Moharam, M.G., Pommet, D.A., Grann, E.B., & Gaylord, T.K. (1995). Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach. *JOSA A*, 12(5), 1077–1086. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.12.001077>.
253. Chateau, N., & Hugonin, J.P. (1994). Algorithm for the rigorous coupled-wave analysis of grating diffraction. *JOSA A*, 11(4), 1321–1331. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.11.001321>.
254. Kim, H., Lee, I.M., & Lee, B. (2007). Extended scattering-matrix method for efficient full parallel implementation of rigorous coupled-wave analysis. *JOSA A*, 24(8), 2313–2327. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.24.002313>.

255. Jia, H., & Yasumoto, K. (2004). A novel formulation of the Fourier model method in S-matrix form for arbitrary shaped gratings. *International Journal of Infrared and Millimeter Waves*, 25(11), 1591–1609. <https://doi.org/10.1023/B:IJIM.0000047450.11515.4a>
256. Pisarenco, M., Maubach, J., Setija, I., & Mattheij, R. (2011). Modified S-matrix algorithm for the aperiodic Fourier modal method in contrast-field formulation. *JOSA A*, 28(7), 1364–1371. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.28.001364>
257. Pai, D.M., & Awada, K.A. (1991). Analysis of dielectric gratings of arbitrary profiles and thicknesses. *JOSA A*, 8(5), 755–762. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.8.000755>.
258. Skigin, D. C., & Depine, R. A. (1997). The multilayer modal method for electromagnetic scattering from surfaces with several arbitrarily shaped grooves. *Journal of Modern Optics*, 44(5), 1023-1036. <https://doi.org/10.1080/09500349708230714>
259. Li, L. (1994). Multilayer-coated diffraction gratings: differential method of Chandezon et al. revisited. *JOSA A*, 11(11), 2816–2828. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.11.001685>.
260. Martynov, V., Vidal, B., Vincent, P., Brunel, M., Roschupkin, D. V., Agafonov, Y., & Yuakshin, A. (1994). Comparison of modal and differential methods for multilayer gratings. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 339(3), 617-625. [https://doi.org/10.1016/0168-9002\(94\)90202-X](https://doi.org/10.1016/0168-9002(94)90202-X).
261. Li, L. (2003). Note on the S-matrix propagation algorithm. *JOSA A*, 20(4), 655–660. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.20.000655>.
262. Yuffa, A.J., & Scales, J.A. (2012). Object-oriented electrodynamic S-matrix code with modern applications. *Journal of Computational Physics*, 231(14), 4823–4835. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2012.03.018>.
263. Iff, W., Kämpfe, T., Jourlin, Y., & Tishchenko, A. V. (2017). Memory sparing, fast scattering formalism for rigorous diffraction modeling. *Journal of Optics*,

- 19(7), 075602-1–075602-14. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/2040-8986/aa7012/meta>
264. Zinenko, T.L., Marciniak, M., & Nosich, A.I. (2013). Accurate analysis of light scattering and absorption by an infinite flat grating of thin silver nanostrips in free space using the method of analytical regularization. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 19(3), 9000108–9000108. doi: 10.1109/JSTQE.2012.2227685.
265. Shapoval, O.V., & Nosich, A.I. (2013). Finite gratings of many thin silver nanostrips: Optical resonances and role of periodicity. *AIP Advances*, 3(4), 042120-1–042120-13. <https://doi.org/10.1063/1.4802880>.
266. Chekroun, M.Z., Bassou, G., Salomon, L., Zenati, A., Taalbi, A., Bendaoud, H., & Ameri, M. (2012). Optical Near Field Study of Ag Nanowires by the Differential Method. *Journal of Modern Physics*, 3(1), 102–109. doi:10.4236/jmp.2012.31014.
267. Kim, K., Kim, D.J., Moon, S., Kim, D., & Byun, K.M. (2009). Localized surface plasmon resonance detection of layered biointeractions on metallic subwavelength nanogratings. *Nanotechnology*, 20(31), 315501-1–315501-6. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0957-4484/20/31/315501/meta>.
268. Deinega, A., Belousov, S., & Valuev, I. (2013). Transfer-matrix approach for finite-difference time-domain simulation of periodic structures. *Physical Review E*, 88(5), 053305-1–053305-10. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.88.053305>.
269. Katsidis, C.C., & Siapkias, D.I. (2002). General transfer-matrix method for optical multilayer systems with coherent, partially coherent, and incoherent interference. *Applied Optics*, 41(19), 3978–3987. <https://doi.org/10.1364/AO.41.003978>.
270. Balili, R.B. (2012). Transfer matrix method in nanophotonics. *International Journal of Modern Physics: Conference Series*, 17, 159–168. <https://doi.org/10.1142/S2010194512008045>.
271. Li, Z.Y., & Lin, L.L. (2003). Photonic band structures solved by a plane-wave-based transfer-matrix method. *Physical Review E*, 67(4), 046607-1–046607-11. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.67.046607>.

272. Li, Z.Y. (2005). Principles of the plane-wave transfer-matrix method for photonic crystals. *Science and Technology of Advanced Materials*, 6(7), 837–841. <http://iopscience.iop.org/article/10.1016/j.stam.2005.06.013/meta>.
273. Li, Z.Y., & Ho, K.M. (2003). Light propagation in semi-infinite photonic crystals and related waveguide structures. *Physical Review B*, 68(15), 155101-1–155101-8. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.155101>.
274. Draine, B.T., & Flatau, P.J. (1994). Discrete-dipole approximation for scattering calculations. *JOSA A*, 11(4), 1491–1499. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.11.001491>.
275. Yurkin, M.A., Maltsev, V.P., & Hoekstra, A.G. (2007). The discrete dipole approximation for simulation of light scattering by particles much larger than the wavelength. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 106, 546–557. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2007.01.033>.
276. Mishchenko, M. I., Videen, G., Babenko, V.A., Khlebtsov, N.G., & Wriedt, T. (2004). T-matrix theory of electromagnetic scattering by particles and its applications: a comprehensive reference database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 88, 357–406. doi:10.1016/j.jqsrt.2004.05.002.
277. Khlebtsov, N.G. (2013). T-matrix method in plasmonics: An overview. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 123, 184–217. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2012.12.027>
278. Moreno, E., Erni, D., Hafner, C., & Vahldieck, R. (2002). Multiple multipole method with automatic multipole setting applied to the simulation of surface plasmons in metallic nanostructures. *JOSA A*, 19(1), 101–111. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.19.000101>.
279. Lee, K.H., Ahmed, I., Goh, R.S.M., Khoo, E.H., Li, E.P., & Hung, T.G.G. (2011). Implementation of the FDTD method based on Lorentz-Drude dispersive model on GPU for plasmonics applications. *Progress In Electromagnetics Research*, 116, 441–456. doi:10.2528/PIER11042002.
280. Hohenester, U., & Krenn, J. (2005). Surface plasmon resonances of single and coupled metallic nanoparticles: A boundary integral method approach. *Physical*

- Review B*, 72(19), 195429-1–195429-9. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.195429>.
281. Chen, X., Moore, J.E., Zekarias, M., & Jensen, L. (2015). Atomistic electrodynamic simulations of bare and ligand-coated nanoparticles in the quantum size regime. *Nature Communications*, 6, 8921-1–8921-8. <https://www.nature.com/articles/ncomms9921>
282. Bohren, C.F., & Huffman, D.R. (2008). *Absorption and scattering of light by small particles*. John Wiley & Sons.
283. Klar, T., Perner, M., Grosse, S., Von Plessen, G., Spirkl, W., & Feldmann, J. (1998). Surface-plasmon resonances in single metallic nanoparticles. *Physical Review Letters*, 80(19), 4249–4259. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.4249>.
284. Jain, P.K., Lee, K.S., El-Sayed, I.H., & El-Sayed, M.A. (2006). Calculated absorption and scattering properties of gold nanoparticles of different size, shape, and composition: applications in biological imaging and biomedicine. *The Journal of Physical Chemistry B*, 110(14), 7238–7248. doi: 10.1021/jp057170o.
285. Ghadarghadr, S., Hao, Z., & Mosallaei, H. (2009). Plasmonic array nanoantennas on layered substrates: modeling and radiation characteristics. *Optics Express*, 17(21), 18556–18570. <https://doi.org/10.1364/OE.17.018556>.
286. Ahmadi, A., Ghadarghadr, S., & Mosallaei, H. (2010). An optical reflectarray nanoantenna: The concept and design. *Optics Express*, 18(1), 123–133. <https://doi.org/10.1364/OE.18.000123>.
287. Brongersma, M.L., Hartman, J.W., & Atwater, H.A. (2000). Electromagnetic energy transfer and switching in nanoparticle chain arrays below the diffraction limit. *Physical Review B*, 62(24), R16356–R16359. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.62.R16356>
288. Lamprecht, B., Schider, G., Lechner, R.T., Ditlbacher, H., Krenn, J.R., Leitner, A., & Aussenegg, F.R. (2000). Metal nanoparticle gratings: influence of dipolar particle interaction on the plasmon resonance. *Physical Review Letters*, 84(20), 4721–4724. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.4721>.

289. Yang, T., & Crozier, K.B. (2008). Surface plasmon coupling in periodic metallic nanoparticle structures: a semi-analytical model. *Optics Express*, 16(17), 13070–13079. <https://doi.org/10.1364/OE.16.013070>.
290. Weber, W.H., & Ford, G.W. (2004). Propagation of optical excitations by dipolar interactions in metal nanoparticle chains. *Physical Review B*, 70(12), 125429-1–125429-8. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.70.125429>
291. Koenderink, A.F., de Waele, R., Prangma, J.C., & Polman, A. (2007). Experimental evidence for large dynamic effects on the plasmon dispersion of subwavelength metal nanoparticle waveguides. *Physical Review B*, 76(20), 201403-1–201403-16. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.201403>.
292. Scholes, G.D., & Rumbles, G. (2011). Excitons in nanoscale systems. *Materials For Sustainable Energy: A Collection of Peer-Reviewed Research and Review Articles from Nature Publishing Group*, (pp. 12–25). World Scientific.
293. Luo, X., Morrin, A., Killard, A.J., & Smyth, M.R. (2006). Application of nanoparticles in electrochemical sensors and biosensors. *Electroanalysis*, 18(4), 319–326. <https://doi.org/10.1002/elan.200503415>.
294. Achermann, M. (2010). Exciton– plasmon interactions in metal– semiconductor nanostructures. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 1(19), 2837–2843. doi: 10.1021/jz101102e.
295. Neogi, A., Lee, C.W., Everitt, H.O., Kuroda, T., Tackeuchi, A., & Yablonovitch, E. (2002). Enhancement of spontaneous recombination rate in a quantum well by resonant surface plasmon coupling. *Physical Review B*, 66(15), 153305-1–153305-4. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.153305>.
296. Toropov, A.A., Shubina, T.V., Belyaev, K.G., Ivanov, S.V., Kop'ev, P.S., Ogawa, Y., & Minami, F. (2011). Enhancement of excitonic emission in semiconductor heterostructures due to resonant coupling to multipole plasmon modes in a gold particle. *Physical Review B*, 84(8), 085323-1–085323-9. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.085323>.
297. Govorov, A.O., Bryant, G.W., Zhang, W., Skeini, T., Lee, J., Kotov, N.A., & Naik, R.R. (2006). Exciton– plasmon interaction and hybrid excitons in

- semiconductor– metal nanoparticle assemblies. *Nano Letters*, 6(5), 984–994. doi: 10.1021/nl0602140.
298. Vasa, P., Pomraenke, R., Schwieger, S., Mazur, Y.I., Kunets, V., Srinivasan, P., & Salamo, G. (2008). Coherent exciton–surface-plasmon-polariton interaction in hybrid metal-semiconductor nanostructures. *Physical Review Letters*, 101(11), 116801-1–116801-4. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.116801>.
299. Fedutik, Y., Temnov, V.V., Schöps, O., Woggon, U., & Artemyev, M.V. (2007). Exciton-plasmon-photon conversion in plasmonic nanostructures. *Physical Review Letters*, 99(13), 136802-1–136802-9. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.136802>.
300. Garnett, J.M. (1905). Colours in metal glasses, in metallic films and in metallic solutions II. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 76(511), 370–373. doi: 10.1098/rspa.1905.0039.
301. Ruppin, R. (2000). Evaluation of extended Maxwell-Garnett theories. *Optics Communications*, 182(4-6), 273–279. [https://doi.org/10.1016/S0030-4018\(00\)00825-7](https://doi.org/10.1016/S0030-4018(00)00825-7).
302. Barrera, R.G., Monsivais, G., & Mochán, W.L. (1988). Renormalized polarizability in the Maxwell Garnett theory. *Physical Review B*, 38(8), 5371–5379. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.38.5371>
303. Chýlek, P., & Srivastava, V. (1983). Dielectric constant of a composite inhomogeneous medium. *Physical Review B*, 27(8), 5098–5106. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.27.5098>
304. Bergman, D.J. (1978). The dielectric constant of a composite material – a problem in classical physics. *Physics Reports*, 43(9), 377–407. [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(78\)90009-1](https://doi.org/10.1016/0370-1573(78)90009-1)
305. Wood, D.M., & Ashcroft, N.W. (1977). Effective medium theory of optical properties of small particle composites. *Philosophical Magazine*, 35(2), 269–280. <https://doi.org/10.1080/14786437708237052>



306. Sareni, B., Krähenbühl, L., Beroual, A., & Brosseau, C. (1996). Effective dielectric constant of periodic composite materials. *Journal of Applied Physics*, 80(3), 1688–1696. <https://doi.org/10.1063/1.362969>
307. Hashin, Z., & Shtrikman, S. (1962). A variational approach to the theory of the effective magnetic permeability of multiphase materials. *Journal of Applied Physics*, 33(10), 3125–3131. <https://doi.org/10.1063/1.1728579>
308. Hedayati, M.K., Javaherirahim, M., Mozooni, B., Abdelaziz, R., Tavassolizadeh, A., Chakravadhanula, V.S.K., & Elbahri, M. (2011). Design of a perfect black absorber at visible frequencies using plasmonic metamaterials. *Advanced Materials*, 23(45), 5410–5414. <https://doi.org/10.1002/adma.201102646>
309. Hedayati, M.K., Fahr, S., Etrich, C., Faupel, F., Rockstuhl, C., & Elbahri, M. (2014). The hybrid concept for realization of an ultra-thin plasmonic metamaterial antireflection coating and plasmonic rainbow. *Nanoscale*, 6(11), 6037–6045. doi: 10.1039/C4NR00087K .
310. Hedayati, M.K., Faupel, F., & Elbahri, M. (2012). Tunable broadband plasmonic perfect absorber at visible frequency. *Applied Physics A*, 109(4), 769–773. <https://doi.org/10.1007/s00339-012-7344-1>.
311. Etrich, C., Fahr, S., Hedayati, M.K., Faupel, F., Elbahri, M., & Rockstuhl, C. (2014). Effective optical properties of plasmonic nanocomposites. *Materials*, 7(2), 727–741. doi:10.3390/ma7020727.
312. Zeng, B., Gao, Y., & Bartoli, F.J. (2013). Ultrathin nanostructured metals for highly transmissive plasmonic subtractive color filters. *Scientific Reports*, 3, 2840-1–2840-9. <https://www.nature.com/articles/srep02840>.
313. Savoia, S., Ricciardi, A., Crescitelli, A., Granata, C., Esposito, E., Galdi, V., & Cusano, A. (2013). Surface sensitivity of Rayleigh anomalies in metallic nanogratings. *Optics Express*, 21(20), 23531–23542. <https://doi.org/10.1364/OE.21.023531>.
314. Wu, D., Li, R., Liu, Y., Yu, Z., Yu, L., Chen, L., & Ye, H. (2017). Ultra-narrow band perfect absorber and its application as plasmonic sensor in the visible region.

- Nanoscale Research Letters*, 12(1), 427-1–427-11. <https://doi.org/10.1186/s11671-017-2203-9>.
315. Yong, Z., Zhang, S., Gong, C., & He, S. (2016). Narrow band perfect absorber for maximum localized magnetic and electric field enhancement and sensing applications. *Scientific Reports*, 6, 24063-1–24063-7. <https://www.nature.com/articles/srep24063>.
316. Gu, Y., Zhang, L., Yang, J. K., Yeo, S. P., & Qiu, C.W. (2015). Color generation via subwavelength plasmonic nanostructures. *Nanoscale*, 7(15), 6409–6419. doi: 10.1039/C5NR00578G.
317. Shiraishi, K., & Muraki, K. (2015). Metal-film subwavelength-grating polarizer with low insertion losses and high extinction ratios in the terahertz region. *Optics Express*, 23(13), 16676–16681. <https://doi.org/10.1364/OE.23.016676>
318. Brigger, I., Dubernet, C., & Couvreur, P. (2012). Nanoparticles in cancer therapy and diagnosis. *Advanced Drug Delivery Reviews*, 64, 24–36. <https://doi.org/10.1016/j.addr.2012.09.006>
319. Lee, K. S., & El-Sayed, M.A. (2006). Gold and silver nanoparticles in sensing and imaging: sensitivity of plasmon response to size, shape, and metal composition. *The Journal of Physical Chemistry B*, 110(39), 19220–19225. doi: 10.1021/jp062536y
320. Blaber, M.G., Arnold, M.D., & Ford, M.J. (2009). Search for the ideal plasmonic nanoshell: the effects of surface scattering and alternatives to gold and silver. *The Journal of Physical Chemistry C*, 113(8), 3041–3045. doi: 10.1021/jp810808h
321. Garitaonandia, J.S., Insausti, M., Goikolea, E., Suzuki, M., Cashion, J.D., Kawamura, N., & Rojo, T. (2008). Chemically induced permanent magnetism in Au, Ag, and Cu nanoparticles: localization of the magnetism by element selective techniques. *Nano Letters*, 8(2), 661–667. doi: 10.1021/nl073129g
322. Sekhon, J.S., & Verma, S.S. (2011). Refractive index sensitivity analysis of Ag, Au, and Cu nanoparticles. *Plasmonics*, 6(2), 311–317. <https://link.springer.com/article/10.1007/s11468-011-9206-7>

323. Maier, S.A., Brongersma, M.L., Kik, P.G., Meltzer, S., Requicha, A.A., & Atwater, H.A. (2001). Plasmonics – a route to nanoscale optical devices. *Advanced materials*, 13(19), 1501–1505. <https://doi.org/10.1002/adma.200390134>.
324. Oliveira, L.C., Moreira, C.S., Neff, H., & Lima, A.M.N. (2016). Optical properties and instrumental performance of thin noble metal (Cu, Au, Ag) films near the surface plasmon resonance. *Procedia Engineering*, 168, 834–837. <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2016.11.285>.
325. Antosiewicz, T.J., Apell, S.P., & Shegai, T. (2014). Plasmon–exciton interactions in a core–shell geometry: from enhanced absorption to strong coupling. *ACS Photonics*, 1(5), 454–463. DOI: 10.1021/ph500032d.
326. LeBlanc, S.J., McClanahan, M.R., Jones, M., & Moyer, P.J. (2013). Enhancement of multiphoton emission from single CdSe quantum dots coupled to gold films. *Nano Letters*, 13(4), 1662–1669. DOI: 10.1021/nl400117h.
327. Mann, D., Nascimento-Duplat, D., Keul, H., Möller, M., Verheijen, M., Xu, M., & Buskens, P. (2017). The influence of particle size distribution and shell imperfections on the plasmon resonance of Au and Ag nanoshells. *Plasmonics*, 12(3), 929–945. <https://doi.org/10.1007/s11468-016-0345-8>.
328. Liu, W., Wang, X., Chai, Y., Gao, S., & Li, F. (2017). Multiple plasmon resonance in a concentric silver-atomic medium nanoshell. *Journal of Applied Physics*, 121(12), 123102-1–123102-11. <https://doi.org/10.1063/1.4978767>.
329. Fitio, V.M., & Bobitski, Y.V. (2004). Resonance effects in a dielectric grating; total absorption of electromagnetic waves by a dielectric grating on metal system. *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics*, 6(10), 943–951. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1464-4258/6/10/004/meta>.
330. Yaremchuk, I., Tamulevičius, T., Fitio, V., Gražulevičiūtė, I., Bobitski, Y., & Tamulevičius, S. (2013). Numerical implementation of the S-matrix algorithm for modeling of relief diffraction gratings. *Journal of Modern Optics*, 60(20), 1781–1788. <https://doi.org/10.1080/09500340.2013.861032>.
331. Yaremchuk, I., Fitio, V., & Bobitski, Ya. (2014) Rigorous analysis of the relief and multilayer subwavelength periodic structures. *Proc. XI<sup>th</sup> International*

- Conference “Modern Problems of Radio Engineering, Telecommunications, and Computer Science” (TCSET’2014)*, (pp. 304–305) NULP, Lviv.
332. Khavasi, A., Mehrany, K., & Rashidian, B. (2007). Three-dimensional diffraction analysis of gratings based on Legendre expansion of electromagnetic fields. *JOSA B*, 24(10), 2676–2685. <https://doi.org/10.1364/JOSAB.24.002676>.
333. Johnson, P.B., & Christy, R.W. (1972). Optical constants of the noble metals. *Physical Review B*, 6(12), 4370–4379. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.6.4370>.
334. Zhang, D., Wang, P., Jiao, X., Min, C., Yuan, G., Deng, Y., & Liu, W. (2006). Polarization properties of subwavelength metallic gratings in visible light band. *Applied Physics B*, 85(1), 139–143. <https://doi.org/10.1007/s00340-006-2403-y>.
335. Rotenberg, N., & Sipe, J.E. (2011). Analytic model of plasmonic coupling: Surface relief gratings. *Physical Review B*, 83(4), 045416-1–045416-11. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.045416>.
336. Material Properties – UV-Grade Synthetic Fused Silica. Web site <http://www.cvimellesgriot.com/products/Documents/TechnicalGuide/Material-Properties.pdf> (2012).
337. Yaremchuk, I., Fitio, V., Andrulėvicius, M., & Tamulevicius, S. (2012, August) Rigorous Coupled-Wave Analysis of Multilayered Grating Structures. *14<sup>th</sup> International Conference School Advanced Materials and Technologies* (p. 70) Palanga, Lithuania.
338. Russell, P.S.J. (1984). Power conservation and field structures in uniform dielectric gratings. *JOSA A*, 1(3), 293–299. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.1.000293>
339. Шестопалов В.П., & Сиренко Ю.К. (1989). *Динамическая теория решеток*. Киев: Наукова думка.
340. Фітьо, В.М., Яремчук, І.Я., & Бобицький, Я.В. (2012). Точність аналізу оптичної дифракції на рельєфних ґратках методом зв’язаних хвиль. *Радіофізика та електроніка*, 3(17), 30–36. <http://dspace.nbu.gov.ua/handle/123456789/105877>

341. Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Y., & Bobitski, Y.W. (2013). Accuracy of coupled-wave analysis of relief diffraction gratings in optical range. *Telecommunications and Radio Engineering*, 72(8), 661–671. DOI: 10.1615/TelecomRadEng.v72.i8.20.
342. Fitio, V.M. (2006). Transmissions of Metallic Gratings with Narrow Slots. *8-th International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling*, (pp. 113–116). IEEE.
343. Lalanne, P., & Morris, G.M. (1996). Highly improved convergence of the coupled-wave method for TM polarization. *JOSA A*, 13(4), 779–784. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.13.000779>
344. Фітьо, В.М., & Бобицький, Я.В. (2013). *Оптична дифракція на періодичних структурах*, Львів: Видавництво Львівської політехніки.
345. Weismann, M., Gallagher, D.F., & Panoiu, N.C. (2015). Accurate near-field calculation in the rigorous coupled-wave analysis method. *Journal of Optics*, 17(12), 125612-1–125612-11. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/2040-8978/17/12/125612/meta>
346. Moharam, M.G., & Gaylord, T. K. (1986). Rigorous coupled-wave analysis of metallic surface-relief gratings. *JOSA A*, 3(11), 1780–1787. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.3.001780>.
347. Fitio, V., Yaremchuk, I., Bendzyak, A., & Bobitski, Y. (2017, April). Modified RCWA method for studying the resonance diffraction phenomena on metal gratings. *37th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO)* (pp. 170-174). IEEE.
348. Fitio, V., Yaremchuk, I., Bendzyak, A., & Bobitski, Y. (2017, May). Application RCWA for studying plasmon resonance under diffraction by metal gratings. *First Ukraine Conference on Electrical and Computer Engineering (UKRCON)*, (pp. 667–670). IEEE.
349. Fitio, V., Yaremchuk, I., Bendsyak, A., & Bobitski Y. (2018). Application RCWA to studying localize surface plasmon resonance under diffraction by metallic gratings, Submitted.

350. Fitio, V.M., Sakhno, O.V., & Smirnova, T.N. (2008). Analysis of the diffraction by the gratings generated in the materials with a nonlinear response. *Optik-International Journal for Light and Electron Optics*, 119(5), 236–246. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2006.10.005>.
351. Mock, J.J., Barbic, M., Smith, D.R., Schultz, D.A., & Schultz, S. (2002). Shape effects in plasmon resonance of individual colloidal silver nanoparticles. *The Journal of Chemical Physics*, 116(15), 6755–6759. <https://doi.org/10.1063/1.1462610>.
352. Almeida, V.R., Xu, Q., Barrios, C.A., & Lipson, M. (2004). Guiding and confining light in void nanostructure. *Optics Letters*, 29(11), 1209–1211. <https://doi.org/10.1364/OL.29.001209>.
353. Li, Q., Jia, Y., Dai, L., Yang, Y., & Li, J. (2015). Controlled rod nanostructured assembly of diphenylalanine and their optical waveguide properties. *ACS Nano*, 9(3), 2689–2695. DOI: 10.1021/acsnano.5b00623.
354. Thomas, P.A., Auton, G.H., Kundys, D., Grigorenko, A.N., & Kravets, V.G. (2017). Strong coupling of diffraction coupled plasmons and optical waveguide modes in gold stripe-dielectric nanostructures at telecom wavelengths. *Scientific Reports*, 7, 45196-1–45196-8. <https://www.nature.com/articles/srep45196?shunter=1489658586817>.
355. Yaremchuk, I.Y., Fitio, V.M., & Bobitski, Y.V. (2016). Enhanced optical transmission of the triple-layer resonant waveguide structure. *Semiconductor Physics Quantum Electronics & Optoelectronics*, 19(2), 156–161. doi: 10.15407/spqeo19.02.156.
356. Unger, H.G. (1977). *Planar optical waveguides and fibres*. Oxford Engineering Science Series, Oxford: Clarendon Press.
357. Smirnova, T.N., Sakhno, O.V., Fitio, V.M., Gritsai, Y., & Stumpe, J. (2014). Simple and high performance DFB laser based on dye-doped nanocomposite volume gratings. *Laser Physics Letters*, 11(12), 125804-1–125804-9. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1612-2011/11/12/125804/meta>.

358. Smirnova, T.N., Sakhno, O.V., Stumpe, J., & Fitio, V.M. (2016). Polymer distributed feedback dye laser with an external volume Bragg grating inscribed in a nanocomposite by holographic technique. *JOSA B*, 33(2), 202–210. <https://doi.org/10.1364/JOSAB.33.000202>.
359. Fitio, V.M., Bendzyak, A.V., Yaremchuk, I.Y., & Bobitski, Y.V. (2017). Wave equation solution for multilayer planar waveguides in a spatial frequency domain. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*, 20(4), 424–429. <https://doi.org/10.15407/spqeo20.04.424>.
360. Vakarchuk, I.O. (2004). *Quantum Mechanics*. Ivan Franko National University of Lviv, Lviv
361. Levine, B.F. (1993). Quantum-well infrared photodetectors. *Journal of Applied Physics*, 74(8), R1–R81. <https://doi.org/10.1063/1.354252>.
362. Faist, J., Capasso, F., Sivco, D.L., Sirtori, C., Hutchinson, A.L., & Cho, A.Y. (1994). Quantum cascade laser. *Science*, 264(5158), 553–556. DOI: 10.1126/science.264.5158.553.
363. Noda, S., Yamashita, T., Ohya, M., Muromoto, Y., & Sasaki, A. (1993). All-optical modulation for semiconductor lasers by using three energy levels in n-doped quantum wells. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 29(6), 1640–1647. doi: 10.1109/3.234416.
364. Rzhanov, A.G., & Grigas, S.E. (2010). Numerical algorithm for waveguide and leaky modes determination in multilayer optical waveguides. *Technical Physics*, 55(11), 1614–1618. <https://doi.org/10.1134/S1063784210110113>.
365. Fitio, V.M., Romakh, V.V., & Bobitski, Y.V. (2014). Numerical method for analysis of waveguide modes in planar gradient waveguides. *Materials Science*, 20(3), 256–261. <http://dx.doi.org/10.5755/j01.ms.20.3.4841>.
366. Fitio, V.M., Romakh, V.V., Bartkiv, L.V., & Bobitski, Y.V. (2016). The accuracy of computation of mode propagation constants for planar gradient waveguides in the frequency domain. *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik*, 47(2-3), 237–245. <https://doi.org/10.1002/mawe.201600473>.

367. Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Y., Romakh, V.V., & Bobitski, Y.V. (2016, August). Numerical Solution of One-Dimensional Stationary Schrödinger Equation in the Frequency Domain. *International Conference on Nanotechnology and Nanomaterials* (pp. 3–17). Springer, Cham.
368. Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Y., Romakh, V.V., & Bobitski, Y.V. (2015). A solution of one-dimensional stationary Schrödinger equation by the Fourier transform. *ACES*, 30(5), 534–539. <http://www.aces-society.org/search.php?vol=30&no=5&type=2>.
369. Fitio, V., Yaremchuk, I.Ya., Romakh, V.V., & Bobitski, Ya.V. (2014, August) One-dimensional Stationary Schrödinger Equation with the Fourier Transformation. *International Conference Nanomaterials: Applications and Properties* (pp. 02NAESF07-1 - 02NAESF07-2) Lviv, Ukraine.
370. Goodman, J.W. (2005). *Introduction to Fourier optics*. Roberts and Company Publishers.
371. Kittel, C., McEuen, P., & McEuen, P. (1996). *Introduction to solid state physics*. New York: Wiley.
372. Khlebtsov, N.G. (2008). Optics and biophotonics of nanoparticles with a plasmon resonance. *Quantum Electronics*, 38(6), 504–529. <http://iopscience.iop.org/article/10.1070/QE2008v038n06ABEH013829/meta>.
373. Levy, O., & Stroud, D. (1997). Maxwell Garnett theory for mixtures of anisotropic inclusions: Application to conducting polymers. *Physical Review B*, 56(13), 8035–8040. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.56.8035>.
374. Barrera, R.G., Monsivais, G., & Mochán, W.L. (1988). Renormalized polarizability in the Maxwell Garnett theory. *Physical Review B*, 38(8), 5371–5379. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.38.5371>.
375. Li, W., Seal, S., Megan, E., Ramsdell, J., Scammon, K., Lelong, G., & Richardson, K.A. (2003). Physical and optical properties of sol-gel nano-silver doped silica film on glass substrate as a function of heat-treatment temperature. *Journal of Applied Physics*, 93(12), 9553–9561. <https://doi.org/10.1063/1.1571215>.



376. Bruggeman, V.D. (1935). Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen. I. Dielektrizitätskonstanten und Leitfähigkeiten der Mischkörper aus isotropen Substanzen. *Annalen der Physik*, 416(7), 636–664. <https://doi.org/10.1002/andp.19354160705>.
377. Shin, D., Tibuleac, S., Maldonado, T.A., & Magnusson, R. (1998). Thin-film optical filters with diffractive elements and waveguides. *Optical Engineering*, 37(9), 2634–2647. <https://doi.org/10.1117/1.601764>.
378. Lee, K.J., Curzan, J., Shokooh-Saremi, M., & Magnusson, R. (2011). Resonant wideband polarizer with single silicon layer. *Applied Physics Letters*, 98(21), 211112-1–211112-3. <https://doi.org/10.1063/1.3594244>.
379. Ma, J., & Zhang, D. (2012). Ultra-sensitive bio-sensor based on GMR in self-suspended-membrane-type germanium grating. *Journal of Optics*, 14(8), 085002-1–085002-5. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/2040-8978/14/8/085002/meta>.
380. Wawro, D., Ding, Y., Gimlin, S., Zimmerman, S., Kearney, C., Pawlowski, K., & Magnusson, R. (2009). Guided-mode resonance sensors for rapid medical diagnostic testing applications. *Proc. of SPIE*, 7173, 717303-1–717303-9. <https://doi.org/10.1117/12.809523>.
381. Petrovska, H.A., Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Y., & Bobitski, Y.V. (2013, August). Properties of prismatic structures consisting dielectric waveguide. *12th International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling (LFNM)* (pp. 71–73). IEEE.
382. Fitio, V., Yaremchuk, I., & Bobitski, Y. (2011). Optical excitation of surface plasmon polariton and waveguide modes resonances on prismatic structures. *Optica Applicata*, 41(4), 929–939. Retrieved from [http://direct.dbc.wroc.pl/Content/17198/OA\\_vol41\\_2011\\_4.pdf#page=135](http://direct.dbc.wroc.pl/Content/17198/OA_vol41_2011_4.pdf#page=135).
383. Yaremchuk, I.Y., Fitio, V.M., & Bobitski, Y.V. (2011). New design of interference band-pass infrared filter. *Opto-Electronics Review*, 19(2), 193–197. <https://doi.org/10.2478/s11772-011-0008-4>.
384. Яремчук, І.Я., Фітьо, В.М., & Бобицький, Я.В. (2009). Модель інфрачервоних тонкоплівкових фільтрів на основі інтерференційного

- дзеркала. *Вісник Національного університету „Львівська політехніка”*. *Електроніка*, 646, 218–225. [http://vlp.com.ua/files/21\\_36.pdf](http://vlp.com.ua/files/21_36.pdf).
385. Petrovska H., Fitio, V., Stakhira, P., Yaremchuk, I., Cherpak, V., & Bobitski Ya. (2014, August). Resonance Gain of the Waveguide Mode in the Structure: Glass Prism-dielectric Layer- a Layer of Organic semiconductor. *Proc. 16<sup>th</sup> International Conference School Advanced Materials and Technologies*, (p. 64) Palanga, Lithuania.
386. Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Ya., Bobitski, Ya.V. (2010, May) Resonance absorption of energy of waveguide modes in prismatic structure with metallic film and dielectrics layer. *8<sup>th</sup> International conference on Electronic Processes In Organic And Inorganic Materials*, (p. 148) Synyogora, Ukraine.
387. Yaremchuk, I.Ya., Fitio, V.M., Bobitski, Ya.V. (2010, September) Surface Plasmon-polaritons and waveguide modes in prismatic structures. *10<sup>th</sup> International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling LFNМ\*2010* (pp. 63-65) Sevastopol, Ukraine.
388. Yaremchuk, I., Fitio, V., & Bobitski, Y. (2012, February). Waveguide-based resonance sensor design. *International Conference on Modern Problems of Radio Engineering Telecommunications and Computer Science (TCSET)* (pp. 508–508). IEEE.
389. Atamanyuk, N.V. Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Y., & Bobitski, Ya.V. (2011, October) Waveguide resonance in a prism structure. *3<sup>th</sup> International Conference «Electronics and applied physics»* (pp. 47–48) Kyiv, Ukraine.
390. Yaremchuk I. (2010, October) Refractive index sensitivity the prismatic structures. *11<sup>th</sup> International Young Scientists Conference Optics and High Technology Material Science SPO 2010* (p. 103) Kyiv, Ukraine.
391. Яремчук І.Я., Петровська Г.А., Фітьо В.М., & Бобицький Я.В. (2017). Детальний аналіз елемента призмового сенсора, що працює на явищі поверхневого плазмонного резонансу. *Вісник Національного університету „Львівська політехніка”*. Серія “Радіоелектроніка та телекомунікації”, 885, 97–102. <http://science.lpnu.ua/srt/all-volumes-and-issues>.

392. Awazu, K., Rockstuhl, C., Fujimaki, M., Fukuda, N., Tominaga, J., Komatsubara, T., & Ohki, Y. (2007). High sensitivity sensors made of perforated waveguides. *Optics Express*, 15(5), 2592–2597. <https://doi.org/10.1364/OE.15.002592>.
393. Mitsas, C.L., & Siapkas, D.I. (1995). Generalized matrix method for analysis of coherent and incoherent reflectance and transmittance of multilayer structures with rough surfaces, interfaces, and finite substrates. *Applied Optics*, 34(10), 1678–1683. <https://doi.org/10.1364/AO.34.001678>.
394. Фітьо, В.М., Яремчук, І.Я., Ромах, В.В., & Бобицький, Я.В. (2010). Резонанс поверхневих плазмонів та хвилеводних мод у призмових структурах. *Вісник Національного університету „Львівська політехніка”. Електроніка*, 681, 160–166. <http://ena.lp.edu.ua/handle/ntb/24074>.
395. Moreira, C.S., Lima, A.M.N., Neff, H., & Thirstrup, C. (2008). Temperature-dependent sensitivity of surface plasmon resonance sensors at the gold–water interface. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 134(2), 854–862. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2008.06.045>.
396. Chiang, H.P., Chen, C.W., Wu, J.J., Li, H.L., Lin, T.Y., Sánchez, E.J., & Leung, P.T. (2007). Effects of temperature on the surface plasmon resonance at a metal–semiconductor interface. *Thin Solid Films*, 515(17), 6953–6961. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2007.02.034>.
397. Yaremchuk, I. (2017, Серпень) Influence Of Temperature On The Sensitivity Surface-Plasmon Resonance Sensor. *IX-а Українсько-польська науково-практична конференція «Електроніка та інформаційні технології», (ЕЛІТ-2017) (с. 249-250)*. Видавництво ЛНУ ім. І. Франка, Львів.
398. Yaremchuk I., Fitio V., Andrela V., & Bobitski Ya. (2017, August) Influence of temperature on the surface-plasmon resonance sensor elements. *International research and practice conference: Nanotechnology and nanomaterials (NANO 2017)*, (p. 478). SEM Burlaka, Kiev.
399. Yaremchuk, I., Fitio, V., Petrovska, H., & Bobitski, Ya. The temperature impact on the surface-plasmon resonance sensor element. *Submitted*.

400. Wang, Q., Zhang, D., Huang, Y., Ni, Z., & Zhuang, S. (2011). Tunable intensity of the spectral reflectance of a guided-mode resonance filter with dual channels. *Optics & Laser Technology*, 43(7), 1091–1095. <https://doi.org/10.1016/j.optlastec.2011.02.004>.
401. Magnusson, R., Wawro, D., Zimmerman, S., & Ding, Y. (2011). Resonant photonic biosensors with polarization-based multiparametric discrimination in each channel. *Sensors*, 11(2), 1476–1488. doi:10.3390/s110201476
402. Robertson, J. (2002). Diamond-like amorphous carbon. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 37(4-6), 129–281. [https://doi.org/10.1016/S0927-796X\(02\)00005-0](https://doi.org/10.1016/S0927-796X(02)00005-0).
403. Grill, A. (1999). Electrical and optical properties of diamond-like carbon. *Thin Solid Films*, 355, 189–193. [https://doi.org/10.1016/S0040-6090\(99\)00516-7](https://doi.org/10.1016/S0040-6090(99)00516-7).
404. Tamulevičius, T., Šeperys, R., Andrulevičius, M., Kopustinskas, V., Meškinis, Š., Tamulevičius, S., & Daugelavičius, R. (2012). Application of holographic sub-wavelength diffraction gratings for monitoring of kinetics of bioprocesses. *Applied Surface Science*, 258(23), 9292–9296. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2012.04.022>.
405. Smietana, M., Korwin-Pawłowski, M.L., Bock, W.J., Pickrell, G.R., & Szmidt, J. (2008). Refractive index sensing of fiber optic long-period grating structures coated with a plasma deposited diamond-like carbon thin film. *Measurement Science and Technology*, 19(8), 085301-1–085301-7. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0957-0233/19/8/085301/meta>.
406. Yaremchuk, I., Tamulevičius, T., Fitio, V., Gražulevičiūtė, I., Bobitski, Y., & Tamulevičius, S. (2013). Guide-mode resonance characteristics of periodic structure on base of diamond-like carbon film. *Optics Communications*, 301, 1-6. <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2013.03.032>.
407. Meskinis, S., Kopustinskas, V., Slapikas, K., Gudaitis, R., Tamulevicius, S., & Niaura, G. (2006). *Proceedings of the International Conference Technologies and Devices, Vilnius, Lithuania*, 1, 5961. [http://www.lei.lt/technologies - Devices - conference/Conference\\_proceedings.pdf](http://www.lei.lt/technologies-Devices-conference/Conference_proceedings.pdf).

408. Lim, K.S., Aryanfar, I., Chong, W.Y., Cheong, Y.K., Harun, S.W., & Ahmad, H. (2012). Integrated microfibre device for refractive index and temperature sensing. *Sensors*, 12(9), 11782–11789. <https://doi.org/10.3390/s120911782>.
409. Pacifici, D., Lezec, H.J., Atwater, H.A., & Weiner, J. (2008). Quantitative determination of optical transmission through subwavelength slit arrays in Ag films: Role of surface wave interference and local coupling between adjacent slits. *Physical Review B*, 77(11), 115411-1–115411-5. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.115411>.
410. Garcia-Vidal, F.J., Martin-Moreno, L., Ebbesen, T.W., & Kuipers, L. (2010). Light passing through subwavelength apertures. *Reviews of Modern Physics*, 82(1), 729. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.729>.
411. Lezec, H.J., & Thio, T. (2004). Diffracted evanescent wave model for enhanced and suppressed optical transmission through subwavelength hole arrays. *Optics Express*, 12(16), 3629–3651. <https://doi.org/10.1364/OPEX.12.003629>.
412. Moreno, E., Martín-Moreno, L., & García-Vidal, F.J. (2006). Extraordinary optical transmission without plasmons: the s-polarization case. *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics*, 8(4), S94–S97. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1464-4258/8/4/S07/meta>.
413. Yaremchuk, I.Y., Fitio, V.M., & Bobitski, Y.V. (2017). Resonance phenomena in one-dimensional grating-based structures. *Semiconductor Physics Quantum Electronics & Optoelectronics*, 20(1), 85–90. <https://doi.org/10.15407/spqeo20.01.085>
414. Yaremchuk, I.Y., Fitio, V.M., & Bobitski, Y.V. (2013, August). High transmission of light through metallic grating limited by dielectric layers. *12th International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling (LFNM)* (pp. 74–76). IEEE.
415. Fitio, V., Yaremchuk, I., & Bobitski, Y. (2013, May). Extraordinary optical transmission through metallic subwavelength structure under TE and TM polarizations. *Proc. XIV International Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanostructures*, (p. 130). Ivano-Frankivsk, Ukraine.

416. Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Ya., Vernyhor, O.L., & Bobitski Ya.V. (2017, August) Plasmon resonance in the periodic square nanowires on dielectric substrates. *International research and practice conference: Nanotechnology and nanomaterials (NANO 2017)*, (p. 578). SEB Burlaka, Kiev.
417. Fitio, V.M., Yaremchuk, I.Y., & Bobitski, Y.V. (2011, September). Optical properties of the Ag and Au nanowires gratings. *11th International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling (LFNM)* (pp. 1–2). IEEE.
418. Yaremchuk, I.Ya., Fitio, V.M., & Bobitski, Ya.V. (2011, October) Metallic nanowires gratings under plasmon resonance condition. *12<sup>th</sup> International Young Scientists Conference Optics and High Technology Material Science SPO 2011* (p. 261) Kyiv, Ukraine.
419. Fitio, V., Yaremchuk, I., & Bobitski, Ya. (2012, August) Interaction light with nanowires grating on dielectric substrate. *14<sup>th</sup> International Conference School Advanced Materials and Technologies* (p. 45) Palanga, Lithuania.
420. Fitio, V., Yaremchuk, I., Vernyhor, O., & Bobitski, Y. (2018). Resonance of surface-localized plasmons in a system of periodically arranged gold and silver nanowires on a dielectric substrate. *Applied Nanoscience*, 8(5), 1015–1024. <https://doi.org/10.1007/s13204-018-0686-z>.
421. Фітьо, В., Яремчук, І., & Бобицький, Я. (2011, Вересень). Резонанс плазмонів в ґратках з нанодротоми з срібла та золота. *III Науково-практична конференція «Електроніка та інформаційні технології», (ЕЛІТ-2011)* (с.143) Видавництво ЛНУ ім. І. Франка, Львів
422. Khlebtsov, N.G., & Dykman, L.A. (2010). Optical properties and biomedical applications of plasmonic nanoparticles. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 111(1), 1–35. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2009.07.012>.
423. Martin, J., Proust, J., Gérard, D., & Plain, J. (2013). Localized surface plasmon resonances in the ultraviolet from large scale nanostructured aluminum films. *Optical Materials Express*, 3(7), 954–959. <https://doi.org/10.1364/OME.3.000954>.

424. McPeak, K.M., Jayanti, S.V., Kress, S.J., Meyer, S., Iotti, S., Rossinelli, A., & Norris, D.J. (2015). Plasmonic films can easily be better: rules and recipes. *ACS Photonics*, 2(3), 326–333. DOI: 10.1021/ph5004237.
425. Babar, S., & Weaver, J.H. (2015). Optical constants of Cu, Ag, and Au revisited. *Applied Optics*, 54(3), 477–481. <https://doi.org/10.1364/AO.54.000477>.
426. Ordal, M.A., Bell, R.J., Alexander, R.W., Long, L.L., & Querry, M.R. (1985). Optical properties of fourteen metals in the infrared and far infrared: Al, Co, Cu, Au, Fe, Pb, Mo, Ni, Pd, Pt, Ag, Ti, V, and W. *Applied Optics*, 24(24), 4493–4499. <https://doi.org/10.1364/AO.24.004493>.
427. Hagemann, H.J., Gudat, W., & Kunz, C. (1975). Optical constants from the far infrared to the x-ray region: Mg, Al, Cu, Ag, Au, Bi, C, and Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. *JOSA*, 65(6), 742–744. <https://doi.org/10.1364/JOSA.65.000742>.
428. Stahrenberg, K., Herrmann, T., Wilmers, K., Esser, N., Richter, W., & Lee, M.J.G. (2001). Optical properties of copper and silver in the energy range 2.5–9.0eV. *Physical Review B*, 64(11), 115111-1–115111-9. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.64.115111>
429. Werner, W.S., Glantschnig, K., & Ambrosch-Draxl, C. (2009). Optical constants and inelastic electron-scattering data for 17 elemental metals. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 38(4), 1013–1092. <https://doi.org/10.1063/1.3243762>.
430. Gao, L., Lemarchand, F., & Lequime, M. (2011). Comparison of different dispersion models for single layer optical thin film index determination. *Thin Solid Films*, 520(1), 501–509. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2011.07.028>.
431. Yakubovsky, D.I., Arsenin, A.V., Stebunov, Y.V., Fedyanin, D.Y., & Volkov, V.S. (2017). Optical constants and structural properties of thin gold films. *Optics Express*, 25(21), 25574–25587. <https://doi.org/10.1364/OE.25.025574>.
432. Rakić, A.D., Djurišić, A.B., Elazar, J.M., & Majewski, M.L. (1998). Optical properties of metallic films for vertical-cavity optoelectronic devices. *Applied Optics*, 37(22), 5271–5283. <https://doi.org/10.1364/AO.37.005271>.

433. Palik, E.D. (1997). *Handbook of Optical Constants of Solids, Five-Volume Set: Handbook of Thermo-Optic Coefficients of Optical Materials with Applications*. Elsevier.
434. Fitio, V., Vernygor, O., Yaremchuk, I., & Bobitski, Y. (2018, February). Analytical approximations of the noble metals dielectric permittivity. *14th International Conference on Advanced Trends in Radioelectronics, Telecommunications and Computer Engineering (TCSET)* (pp. 426–430). IEEE.
435. Berger, A. (1993). Prolate silver particles in glass surfaces. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 163(2), 185–194. [https://doi.org/10.1016/0022-3093\(93\)90767-R](https://doi.org/10.1016/0022-3093(93)90767-R)
436. Yaremchuk, I.Y., Mineckiy, P.S., Fitio, V.M., Bobitski, Y.V., & Lesyuk, R.I. (2015, April). Plasmon resonance of the silver nanoparticles with different shape. *35th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO)* (pp. 185–187). IEEE.
437. Yaremchuk, I., Fitio, V., & Bobitski, Y. (2012, May). Silver nanoparticles under plasmon resonance conditions. *28th International Conference on Microelectronics (MIEL)* (pp. 297–300). IEEE.
438. Яремчук, І.Я., Баріляк, А.Я., Атаманюк, Н.В., & Бобицький, Я.В. (2012, Квітень). Оптимізація структурних параметрів нанооболонки в умовах плазмонного резонансу для біотехнологій. *Тези доповідей п'ятнадцятої відкритої науково-технічної конференції професорсько-викладацького складу ІТРЕ НУ „Львівська політехніка” з проблем електроніки*, (с. 121). Видавництво НУ «Львівська політехніка», Львів.
439. Barylyak A., Yaremchuk I., Wojnarowska R., Sheregii E., & Bobitski Ya. (2015, June) Characterization and plasmonic effect of Ag-TiO<sub>2</sub>:S nanocomposites. *Materials of scientific and technical conference “Laser technologies. Laser and their application”*, (pp. 125–127) Truskavets, Ukraine
440. Kirillin, M., Agrba, P., Kamensky, V., Shirmanova, M., Sirotkina, M., & Zagainova, E. (2009, June). Nanoparticles for contrasting OCT images of skin. *European Conference on Biomedical Optics*, 7372\_0V–7372\_3V. [https://doi.org/10.1364/ECBO.2009.7372\\_0V](https://doi.org/10.1364/ECBO.2009.7372_0V)



441. Ivanov, S., Barylyak, A., Besaha, K., Bund, A., Bobitski, Y., Wojnarowska-Nowak, R., Yaremchuk I. & Kus-Liśkiewicz, M. (2016). Synthesis, characterization, and photocatalytic properties of sulfur-and carbon-codoped TiO<sub>2</sub> nanoparticles. *Nanoscale Research Letters*, 11(1), 140-1–140-12. <https://doi.org/10.1186/s11671-016-1353-5>.
442. Kurylo, P., & Yaremchuk, I. (2012, February). Optical properties of silver-silica nanoshells. *International Conference on Modern Problems of Radio Engineering Telecommunications and Computer Science (TCSET)* (pp. 520–520). IEEE.
443. Adler, D.C., Huang, S.W., Huber, R., & Fujimoto, J.G. (2008). Photothermal detection of gold nanoparticles using phase-sensitive optical coherence tomography. *Optics Express*, 16(7), 4376–4393. <https://doi.org/10.1364/OE.16.004376>.
444. Sotiriou, C., & Pusztai, L. (2009). Gene-expression signatures in breast cancer. *New England Journal of Medicine*, 360(8), 790–800. DOI: 10.1056/NEJMra0801289.
445. Wu, J., Wang, C., Sun, J., & Xue, Y. (2011). Neurotoxicity of silica nanoparticles: brain localization and dopaminergic neurons damage pathways. *ACS Nano*, 5(6), 4476–4489. DOI: 10.1021/nn103530b.
446. Bulavinets, T., Yaremchuk, I., & Bobitski, Y. (2016). Modeling Optical Characteristics of Multilayer Nanoparticles of Different Sizes for Applications in Biomedicine. *Nanophysics, Nanophotonics, Surface Studies, and Applications* (pp. 101–115). Springer, Cham.
447. Bulavinets, T.O., Yaremchuk, I.Y., Kotsko, A.Y., & Bobitski, Y.V. (2016, September). Modeling absorption and scattering cross sections of the multilayer nanoshells in the near infrared spectrum region. *13th International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling (LFNM)* (pp. 35–37). IEEE.
448. Bulavinets, T.O., Yaremchuk, I.Ya., & Bobitski, Ya.V. (2015, August). Modeling optical parameters of multilayer nanoshells to improve plasmon resonance efficiency. *Abstract book International research and practice conference: Nanotechnology and nanomaterials (NANO 2015)*, (p. 41). Lviv, Ukraine.

449. Endrino, J.L., Sánchez-López, J.C., Galindo, R.E., Horwat, D., & Anders, A. (2010). Beneficial silver: antibacterial nanocomposite Ag-DLC coating to reduce osteolysis of orthopaedic implants. *Journal of Physics: Conference Series*, 252(1), 012005-1–012005-7. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/252/1/012005/meta>.
450. Meškinis, Š., Peckus, D., Vasiliauskas, A., Čiegis, A., Gudaitis, R., Tamulevičius, T., Yaremchuk I., & Tamulevičius, S. (2017). Photovoltaic Properties and Ultrafast Plasmon Relaxation Dynamics of Diamond-Like Carbon Nanocomposite Films with Embedded Ag Nanoparticles. *Nanoscale Research Letters*, 12(1), 288-1–288-10. <https://doi.org/10.1186/s11671-017-2065-1>.
451. Tamulevičius, S., & Meškinis, Š. (2008). Diamond like Carbon Films: Growth and Characterization. In *Functionalized Nanoscale Materials, Devices and Systems* (pp. 225-240). Springer, Dordrecht.
452. Yaremchuk, I., Tamulevičienė, A., Tamulevičius, T., Šlapikas, K., Balevičius, Z., & Tamulevičius, S. (2014). Modeling of the plasmonic properties of DLC-Ag nanocomposite films. *Physica Status Solidi (a)*, 211(2), 329–335. <https://doi.org/10.1002/pssa.201330067>.
453. Yaremchuk, I., Fitio, V., Volos, V., & Bobitski, Ya. (2015, April). Plasmonic effect of DLC-Ag nanocomposites. *Book of abstracts Ukrainian-German Symposium on Physics and Chemistry of Nanostructures and on Nanobiotechnology*, (p. 163). Kyiv.
454. Yaremchuk I., Fitio V., Volos V., & Bobitski Ya. (2015, August) Plasmon effects in DLC-Ag nanocomposite structures. *Proc. 17<sup>th</sup> International Conference School Advanced Materials and Technologies*, (pp. 52) Palanga, Lithuania.
455. Yaremchuk, I., Fitio, V., Volos, V., & Bobitski, Ya. (2015, August). Numerical simulation and design of structures and composite materials with metallic nanoinclusions. *Abstract book International research and practice conference: Nanotechnology and nanomaterials (NANO 2015)*, (p. 237). Lviv, Ukraine.
456. Yaremchuk, I., Tamulevičienė, A., Tamulevičius, T., Šlapikas, K., & Tamulevičius, S. (2013, May). Modeling of plasmonic properties of DLC-Ag

- nanocomposites. *Proc. International Conference EMRS - Strasbourg - SPRING 13 N: Atomic-scale engineering of multifunctional nano-sized materials and films*, (p. 14). Strasbourg, France.
457. Yaremchuk, I., Tamulevicienė, A., Tamulevicius, T., Šlapikas, K., Andrulevicius, M., & Tamulevicius, S. (2015). Optical Properties Nanocomposite Composed of Ag Nanoparticles Embedded in a DLC Film. *Nano-Structures for Optics and Photonics. Series: NATO Science for Peace and Security Series B: Physics and Biophysics* (pp. 565–566). Springer, Dordrecht.
458. Yaremchuk, I., Fitio, V., & Bobitski, Y. (2016, February). Shape effect of silver nanoparticles on plasmon properties of DLC: Ag nanocomposites. *13th International Conference on Modern Problems of Radio Engineering, Telecommunications and Computer Science (TCSET)*, (pp. 392–394). IEEE.
459. Яремчук, І.Я., Фітьо, В.М., & Бобицький, Я.В. (2016). Моделювання плазмонних властивостей нанокмпозитних матеріалів на основі алмазоподібної вуглецевої плівки та наночастинок срібла. *Вісник Національного університету "Львівська політехніка". Серія "Радіoeлектроніка та телекомунікації"*, 849, 292–299. <http://science.lpnu.ua/srt/all-volumes-and-issues>.
460. Yaremchuk, I., Tamulevicienė, A., Tamulevicius, T., Šlapikas, K., Andrulevicius, & M., Tamulevicius, S. (2013, August) Optical absorption properties of the DLC-Ag nanocomposite films. *15<sup>th</sup> International Conference School Advanced Materials and Technologies* (p. 97) Palanga, Lithuania.
461. Yaremchuk, I., Fitio, V., Velska, K., & Bobitski, Ya. (2014, August) Effective dielectric permittivity of plasmonic nanocomposite materials. *Summer school and International research and practice conference: Nanotechnology and nanomaterials (NANO 2014)* (p. 316) Eurosvit, Lviv.
462. Яремчук, І.Я. (2015, Серпень) Моделювання оптичних характеристик алмазоподібних вуглецевих плівок допованих сріблом. *VII-а Українсько-польська науково-практична конференція «Електроніка та інформаційні технології»*, (ЕЛІТ-2015) (с. 208). Видавництво ЛНУ ім. І. Франка, Львів..

463. Yaremchuk, I., Meškinis, Š., Fitio, V., Bobitski, Y., Šlapikas, K., Čiegis, A., Balevičius Z., Selskis A. & Tamulevičius, S. (2015). Spectroellipsometric characterization and modeling of plasmonic diamond-like carbon nanocomposite films with embedded Ag nanoparticles. *Nanoscale Research Letters*, 10(1), 157-1–175-7. <https://doi.org/10.1186/s11671-015-0854-y>.
464. Battie, Y., Resano-Garcia, A., Chaoui, N., Zhang, Y., & En Naciri, A. (2014). Extended Maxwell-Garnett-Mie formulation applied to size dispersion of metallic nanoparticles embedded in host liquid matrix. *The Journal of Chemical Physics*, 140(4), 044705-1–044705-9. <https://doi.org/10.1063/1.4862995>
465. Alsawafta, M., Badilescu, S., Paneri, A., Truong, V.V., & Packirisamy, M. (2011). Gold-poly (methyl methacrylate) nanocomposite films for plasmonic biosensing applications. *Polymers*, 3(4), 1833–1848. doi:10.3390/polym3041833
466. Yeshchenko, O.A., Dmitruk, I.M., Alexeenko, A.A., & Dmytruk, A.M. (2007). Size-dependent melting of spherical copper nanoparticles embedded in a silica matrix. *Physical Review B*, 75(8), 085434-1–085434-6. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.085434>
467. Zhang, C., Zhang, S., Yu, L., Zhang, Z., Wu, Z., & Zhang, P. (2012). Preparation and tribological properties of water-soluble copper/silica nanocomposite as a water-based lubricant additive. *Applied Surface Science*, 259, 824–830. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2012.07.132>.
468. Yaremchuk, I.Ya., Fitio, V.M., Bulavinets, T.O., & Bobitski, Y.V. (2018). Optical properties of the nanocomposite materials based on plasmon nanoparticles. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*, 21(2), 195–199. [http://journal-spqeo.org.ua/n2\\_2018/v21n2-p195-199.pdf](http://journal-spqeo.org.ua/n2_2018/v21n2-p195-199.pdf)
469. Bazioti, C., Dimitrakopoulos, G.P., Kehagias, T., Komninou, P., Siozios, A., Lidorikis, E., & Patsalas, P. (2014). Influence of laser annealing on the structural properties of sputtered AlN: Ag plasmonic nanocomposites. *Journal of Materials Science*, 49(11), 3996–4006. <https://doi.org/10.1007/s10853-014-8044-3>
470. Meškinis, Š., Čiegis, A., Vasiliauskas, A., Šlapikas, K., Gudaitis, R., Yaremchuk, I., Fitio, V., Bobitski, Ya. & Tamulevičius, S. (2016). Annealing effects on structure

- and optical properties of diamond-like carbon films containing silver. *Nanoscale Research Letters*, 11(1), 146-1–146-9. <https://doi.org/10.1186/s11671-016-1362-4>.
471. Vasilevskiy, M. I. (2000). Effective dielectric response of composites containing uniaxial inclusions. *Physica Status Solidi (b)*, 219(1), 197–204. [https://doi.org/10.1002/1521-3951\(200005\)219:1<197::AID-PSSB197>3.0.CO;2-5](https://doi.org/10.1002/1521-3951(200005)219:1<197::AID-PSSB197>3.0.CO;2-5).
472. Malitson, I. H. (1965). Interspecimen comparison of the refractive index of fused silica. *JOSA*, 55(10), 1205–1209. <https://doi.org/10.1364/JOSA.55.001205>.
473. Chu, Y., Banaee, M.G., & Crozier, K.B. (2010). Double-resonance plasmon substrates for surface-enhanced Raman scattering with enhancement at excitation and stokes frequencies. *ACS Nano*, 4(5), 2804–2810. DOI: 10.1021/nn901826q.
474. Yaremchuk, I., Tamulevičienė, A., Tamulevičius, T., Andrulevicius, M., & Tamulevičius, S. (2013, November) Nanocomposite DLC-Ag based periodic structures for sensing applications. *International Conference NanotechItaly 2013* (p. 107). Venice, Italy.
475. Yaremchuk, I., Fitio, V., Meškinis, Š., Tamulevičius, S., & Bobitski, Ya. (2015, October). Thin-film nanocomposites grating based sensors. *International meeting Clusters and Nanostructured materials* (p. 138) Uzhhorod, Vodogray, Ukraine.
476. Yaremchuk, I., Tamulevičienė, A., Tamulevičius, T., & Tamulevičius, S. (2014). Optical Properties of DLC-Ag Nanocomposite and Grating Structures on their Base. *Applied Mechanics and Materials*, 490, 53–57. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMM.490-491.53>.
477. Yaremchuk, I., Fitio, V., Meškinis, Š., Tamulevičius, S., & Bobitski, Y. (2017). Design of Thin Film Nanocomposite Grating Based Sensors. *Nano-Optics: Principles Enabling Basic Research and Applications* (pp. 565–566). Springer, Dordrecht
478. Pendry, J.B., Martin-Moreno, L., & Garcia-Vidal, F.J. (2004). Mimicking surface plasmons with structured surfaces. *Science*, 305(5685), 847–848. DOI: 10.1126/science.1098999
479. Meškinis, Š., Yaremchuk, I., Grigaliūnas, V., Vasiliauskas, A., & Čiegis, A. (2016). Plasmonic Properties of Nanostructured Diamond Like Carbon/Silver

- Nanocomposite Films with Nanohole Arrays. *Materials Science*, 22(4), 467–471. <http://dx.doi.org/10.5755/j01.ms.22.4.13193>.
480. Escoubas, L., Simon, J.J., Loli, M., Berginc, G., Flory, F., & Giovannini, H. (2003). An antireflective silicon grating working in the resonance domain for the near infrared spectral region. *Optics Communications*, 226(1-6), 81–88. <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2003.08.034>.
481. Первак, Ю.О. (2005) *Оптика багатошарових покриттів: навчальний посібник для студентів фізичного та радіофізичного факультетів*. К.: Видавничо-поліграфічний центр “Київський університет”.
482. Fitio, V.M., & Bobitski, Y.V. (2008, August). Alternative methods for antireflection of optical surfaces with use of the transition layers and diffraction gratings. *9th International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling, LFNM-2008*, (pp. 139–141). IEEE
483. Фітьо, В., & Яремчук, І. (2010). Просвітлення ґраткою межі прозорий діелектрик-повітря. *Теоретична електротехніка*, 61, 180–187. [http://elit.lnu.edu.ua/pdf/61\\_23.pdf](http://elit.lnu.edu.ua/pdf/61_23.pdf).
484. Yaremchuk, I. (2012, October) Guided-mode resonant grating filters. *13<sup>th</sup> International Young Scientists Conference Optics and High Technology Material Science SPO 2012*, (p. 261) Kyiv, Ukraine.
485. Fitio, V.M., Laba, H.P, & Bobitski, Y.V. (2006) Electromagnetic resonance absorption into metallic grating. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*, 9(3), 49–55. <http://dspace.nbu.gov.ua/handle/123456789/121618>.
486. Gale, M.T. (1997). Replication techniques for diffractive optical elements. *Microelectronic Engineering*, 34(3-4), 321–339. [https://doi.org/10.1016/S0167-9317\(97\)00189-5](https://doi.org/10.1016/S0167-9317(97)00189-5).
487. Homola, J., Koudela, I., & Yee, S.S. (1999). Surface plasmon resonance sensors based on diffraction gratings and prism couplers: sensitivity comparison. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 54(1-2), 16–24. [https://doi.org/10.1016/S0925-4005\(98\)00322-0](https://doi.org/10.1016/S0925-4005(98)00322-0).

488. Petrovska, H.A., Yaremchuk, I.Y., Fitio, V.M., Suriadova, O.D., & Bobitski, Y.V. (2016, September). Optimization metal-coated gratings for sensors applications. *13th International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling (LFNM)* (pp. 30–31). IEEE.
489. Ichihashi, K., Mizutani, Y., & Iwata, T. (2014). Enhancement of the sensitivity of a diffraction-grating-based surface plasmon resonance sensor utilizing the first-and negative-second-order diffracted lights. *Optical Review*, 21(5), 728–731. <https://doi.org/10.1007/s10043-014-0119-5>
490. Yaremchuk, I., Petrovska, H., Fitio, V., Bobitski, Y., Sheregii, E., & Wojnarowska-Nowak, R. (2017, May). Sensors element on base of the relief Au-coated GaAs grating. *First Ukraine Conference on Electrical and Computer Engineering (UKRCOEN)* (pp. 709–712). IEEE.
491. Bobitski, Ya., Yaremchuk, I., Sheregii, E., & Wojnarowska-Nowak, R. (2016, September) Gold-Coated Gratings for SERS Applications. *7<sup>th</sup> International Conference on Advanced Optoelectronics and Lasers CAOL\*2016* (pp.46-47). Odessa, Ukraine
492. Yaremchuk, I., Petrovska, H., Fitio, V., & Bobitski, Y. (2017). Optimization and Fabrication of the Gold-Coated GaAs Diffraction Gratings for Surface Plasmon Resonance Sensors. *Optik-International Journal for Light and Electron Optics*, 158 535–540. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2017.12.148>.
493. Wang, A.X., & Kong, X. (2015). Review of recent progress of plasmonic materials and nano-structures for surface-enhanced Raman scattering. *Materials*, 8(6), 3024–3052. doi:10.3390/ma8063024.
494. Jiao, Y., Ryckman, J.D., Ciesielski, P.N., Escobar, C.A., Jennings, G.K., & Weiss, S.M. (2011). Patterned nanoporous gold as an effective SERS template. *Nanotechnology*, 22(29), 295302-1–295302-6. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0957-4484/22/29/295302/meta>.
495. Wojnarowska-Nowak, R., Polit, J., Broda, D., Bobitski, Y., Starowicz, Z., Gonchar, M., & Sheregii, E. M. (2017). Surface-enhanced Raman scattering and

- Plasmon effect for enzymatic bionanocomplexes characterization. In *EPJ Web of Conferences*(Vol. 133, p. 05001). EDP Sciences.
496. Yaremchuk, I., Petrovska, H., Karelko, I., Fitio, V., & Bobitski, Y. (2017, April). Optimization of the grating-based structures for the efficient SERS substrates. *37th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO)* (pp. 119–123). IEEE.
497. Петровська Г.А., Яремчук І.Я., Мурвай І.М., Фітьо В.М., & Бобицький Я.В. (2017) Підсилення електромагнітного поля періодичними структурами для застосування у раманівській спектроскопії. *Вісник Національного університету "Львівська політехніка". Серія "Радіоелектроніка та телекомунікації"*, 885, 141–146 <http://science.lpnu.ua/srt/all-volumes-and-issues>.
498. Yaremchuk, I., Petrovska, H., Bobitski, Y., Sheregii, E., & Wojnarowska-Nowak R. (2017, May). Gold-coated polycarbonate grating-based substrates for Raman spectroscopy. *First Ukraine Conference on Electrical and Computer Engineering (UKRCON)* (pp. 717–720). IEEE.
499. Zheng, Y., Carey, P.R., & Palfey, B.A. (2004). Raman spectrum of fully reduced flavin. *Journal of Raman Spectroscopy*, 35(7), 521–524. <https://doi.org/10.1002/jrs.1218>.



## ДОДАТОК А



„ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор

з науково-педагогічної роботи

Національного університету

„Львівська політехніка”

к.т.н., доц. Давидчак О.Р.

\_\_\_\_\_ 2018 р.

## АКТ

про використання результатів дисертації докторанта Яремчук Ірини Ярославівни «Хвилеводний, плазмон-поляритонний і плазмонний резонансні ефекти в мікро- та наноструктурах для сенсорної електроніки» представленої на здобуття наукового ступеня доктора технічних наук у навчальному процесі кафедри фотоніки

Комісія у складі зав. кафедри фотоніки проф., д.т.н. Бобицького Я.В., проф. д.ф.-м.н. Фітьо В.М., ст. викладача Демковича І.В., ст. викладача Петровської Г.А. склала даний акт про те, що результати докторської дисертації к.т.н., доцента Яремчук Ірини Ярославівни «Хвилеводний, плазмон-поляритонний і плазмонний резонансні ефекти в мікро- та наноструктурах для сенсорної електроніки» використано у навчальному процесі кафедри фотоніки, а саме:

- створено курс лекцій та лабораторний практикум для студентів спеціальності 153 «Мікро- та наносистемна техніка» з дисципліни «Нанофотоніка» в якому використано результати досліджень, щодо умов виникнення хвилеводного, плазмон-поляритонного та плазмонного резонансів в ґраткових мікро- та наноструктурах, та факторів, які впливають на їх спектральні характеристики.

- модернізовано курс лекцій для студентів базового напрямку 051004 «Оптехніка» з дисципліни «Фізичні основи взаємодії лазерного випромінювання з речовиною» в якому використано результати досліджень, щодо взаємодії електромагнітного випромінювання з наночастинками благородних металів та нанокомпозитних матеріалів.

Голова комісії  
Завідувач кафедри фотоніки  
д.т.н., проф.

Бобицький Я.В.

Члени комісії:

Д.ф.-м.н., проф.

Фітьо В.М.

Ст. викл.

Демкович І.В.

Ст. викл.

Петровська Г.А.



### АКТ

про використання результатів дисертації докторанта Яремчук Ірини Ярославівни «Хвилеводний, плазмон-поляритонний і плазмонний резонансні ефекти в мікро- та наноструктурах для сенсорної електроніки» представленої на здобуття наукового ступеня доктора технічних наук при виконанні держбюджетної науково-дослідної роботи ДБ/Тектон кафедри фотоніки Національного університету „Львівська політехніка”

Комісія у складі начальника НДЧ, к.т.н., доцента Жук Л.В., завідувача відділу науково-організаційного супроводу наукових досліджень к.т.н. Лазько Г.В., завідувача кафедри фотоніки проф., д.т.н. Бобицького Я.В. та заступника начальника планово-фінансового відділу Чулой Т.М. цим актом підтверджують, що результати докторської дисертації докторанта Яремчук І.Я. «Хвилеводний, плазмон-поляритонний і плазмонний резонансні ефекти в мікро- та наноструктурах для сенсорної електроніки» використано при виконанні держбюджетної науково-дослідної роботи ДБ/Тектон „Архітектоніка мікро- та наноструктур в умовах оптичної дифракції та плазмонного резонансу для потреб сучасної фотоніки”, № держреєстрації 0115U000427.

В результаті досліджень виконаних докторантом Яремчук І.Я.

- досліджено умови збудження плазмон-поляритонної хвилі в наногратках. Розраховано та оптимізовано структури прямокутних ґраток полікарбонат-срібло та срібло-срібло для довжин хвиль збудження 532нм, 633нм та 785нм для отримання максимального підсилення раманівських сигналів. Показано, що досягнення максимального підсилення для певної довжини хвилі збудження можливо лише при певних комбінаціях періоду ґратки, її товщини та фактора заповнення, що відповідає резонансам поверхневих плазмонів в місцях контакту з металом.

- розраховано оптичні константи нанокompозитного матеріалу на основі алмазоподібної вуглецевої плівки з диспергованими в неї наночастинками срібла. Показано, що розмір, форма наночастинок, а також взаємодія між ними впливають на величину комплексного ефективного показника заломлення нанокompозиту та мають визначальне значення для положення максимуму піку поглинання (плазмонного піку) та ширини спектру поглинання.

- досліджено та проаналізовано властивості мікро- і наноструктур для синтезу спеціальних біосенсорів та плазмонних фотокаталізаторів з використанням резонансних явищ.

Голова комісії  
Начальник НДЧ,  
к.т.н., доцент

Жук Л.В.

Члени комісії:  
Завідувач відділу науково-організаційного  
супроводу наукових досліджень, к.т.н.  
Завідувач кафедри фотоніки  
проф., д.т.н.  
Заступник начальника  
планово-фінансового відділу

Лазько Г.В.

Бобицький Я.В.

Чулой Т.М.



НАУКОВО-ВИРОБНИЧЕ ПІДПРИЄМСТВО "ЕЛЕКТРОН-КАРАТ"  
ДОЧІРНЕ ПІДПРИЄМСТВО ПРАТ "КОНЦЕРН-ЕЛЕКТРОН"

код ЄДРПОУ: 23273999  
п/р 26001000020774 у ПАТ «ВіЕс Банк» м. Львова  
МФО 325213. Інв. код з ПДВ 232739913050. № свід. 17949122

79031, Україна, м. Львів, Стрийська, 202  
тел.: 032-263-10-65, тел./факс: 032-294-97-35  
www.carat.electron.ua; e-mail: office@carat.electron.ua

13. 06 2018 р. № 1925/64

**ЗАТВЕРДЖУЮ**

Генеральний директор  
НВП "ЕЛЕКТРОН-КАРАТ"  
доктор техн. наук, професор



*М.М.Ваків*  
М.М.Ваків

**АКТ**

Про використання результатів дисертаційної роботи докторанта кафедри фотоніки Національного університету «Львівська політехніка» Яремчук Ірини Ярославівни «Хвилеводний, плазмон-поляритонний і плазмонний резонансні ефекти в мікро- та наноструктурах для сенсорної електроніки» поданої на здобуття наукового ступеня доктора технічних наук

Цим актом підтверджуємо використання низки результатів дисертаційної роботи докторанта кафедри фотоніки Національного університету «Львівська політехніка» Яремчук Ірини Ярославівни в НВП "ЕЛЕКТРОН-КАРАТ". Зокрема використано:

-математичні моделі дослідження фізики резонансних явищ, які виникають в процесі взаємодії електромагнітної хвилі з мікро- та наноструктурами в умовах оптичної дифракції та плазмонного, плазмон-поляритонного і хвилеводного резонансів для прогнозування оптичних характеристик фільтрів з метою їх подальшого виготовлення;

- особливості хвилеводного та плазмон-поляритонного резонансів та розподілу електромагнітного поля в металевих мікроструктурах в умовах TE і TM поляризацій з метою створення сенсорних елементів на їх основі;

- дослідження впливу металевих нановключень з врахуванням їх розміру, форми та концентрації на оптичні та електронні властивості нанокомпозитних структур

Начальник відділу 1620



І.М.Сиворотка

## ДОДАТОК Б. Список публікацій здобувача за темою дисертації та відомості про апробацію результатів дисертації

### Статті у наукових фахових виданнях України

1. Fitio, V.M., Bendzyak, A.V., **Yaremchuk, I.Y.**, & Bobitski, Y.V. (2017). Wave equation solution for multilayer planar waveguides in a spatial frequency domain. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*, 20(4), 424–429. <https://doi.org/10.15407/spqeo20.04.424>. (Здобувачкою проведено розрахунок сталих поширення в планарному хвилеводі)
2. **Yaremchuk, I.Y.**, Fitio, V.M., & Bobitski, Y.V. (2017). Resonance phenomena in one-dimensional grating-based structures. *Semiconductor Physics Quantum Electronics & Optoelectronics*, 20(1), 85–90. <https://doi.org/10.15407/spqeo20.01.085>. (Здобувачкою проведено моделювання спектрів пропускання та відбивання в металевій ґратці та розподілу електромагнітного поля в ґратці).
3. **Яремчук І.Я.**, Петровська Г.А., Фітьо В.М., & Бобицький Я.В. (2017). Детальний аналіз елемента призмового сенсора, що працює на явищі поверхневого плазмонного резонансу. *Вісник Національного університету "Львівська політехніка". Серія "Радіоелектроніка та телекомунікації"*, 885, 97–102. <http://science.lpnu.ua/srt/all-volumes-and-issues>. (Здобувачкою проведено розрахунок спектральних характеристик сенсорного елемента на основі призми).
4. Петровська Г.А., **Яремчук І.Я.**, Мурвай І.М., Фітьо В.М., & Бобицький Я.В. (2017) Підсилення електромагнітного поля періодичними структурами для застосування у раманівській спектроскопії. *Вісник Національного університету "Львівська політехніка". Серія "Радіоелектроніка та телекомунікації"*, 885, 141–146 <http://science.lpnu.ua/srt/all-volumes-and-issues>. (Здобувачкою проведено моделювання розподілу електромагнітного поля в металевій ґратці).
5. **Yaremchuk, I.Y.**, Fitio, V.M., & Bobitski, Y.V. (2016). Enhanced optical transmission of the triple-layer resonant waveguide structure. *Semiconductor Physics Quantum Electronics & Optoelectronics*, 19(2), 156–161. doi: 10.15407/spqeo19.02.156. (Здобувачкою проведено моделювання залежності пропускання металеві ґратки, розміщеної між двома діелектричними шарами, від довжини хвилі).
6. **Яремчук, І.Я.**, Фітьо, В.М., & Бобицький, Я.В. (2016). Моделювання плазмонних властивостей нанокмпозитних матеріалів на основі алмазоподібної вуглецевої плівки та наночастинок срібла. *Вісник Національного університету "Львівська політехніка". Серія "Радіоелектроніка та телекомунікації"*, 849, 292–299. <http://science.lpnu.ua/srt/all-volumes-and-issues>. (Здобувачкою проведено розрахунок ефективної діелектричної проникності алмазоподібної вуглецевої плівки з диспергованими в неї наночастинками срібла в залежності від несферичності наночастинок та показника заломлення матриці).

7. Фітьо, В.М., **Яремчук, І.Я.**, Ромах, В.В., & Бобицький, Я.В. (2010). Резонанс поверхневих плазмонів та хвилеводних мод у призмових структурах. *Вісник Національного університету „Львівська політехніка”*. Електроніка, 681, 160–166. <http://ena.lp.edu.ua/handle/ntb/24074>. (Здобувачкою розраховано залежності відбивання призмових структур від кута падіння променя за умови виникнення плазмон-поляритонного та хвилеводного резонансів).

8. Фітьо, В., & **Яремчук, І.** (2010). Просвітлення ґраткою межі прозорий діелектрик-повітря. *Теоретична електротехніка*, 61, 180–187. [http://elit.lnu.edu.ua/pdf/61\\_23.pdf](http://elit.lnu.edu.ua/pdf/61_23.pdf). (Здобувачкою проведено моделювання спектрів відбивання прямокутних ґраток).

9. **Яремчук, І.Я.**, Фітьо, В.М., & Бобицький, Я.В. (2009). Модель інфрачервоних тонкоплівкових фільтрів на основі інтерференційного дзеркала. *Вісник Національного університету „Львівська політехніка”*. Електроніка, 646, 218–225. [http://vlp.com.ua/files/21\\_36.pdf](http://vlp.com.ua/files/21_36.pdf). (Здобувачкою детально описано методику розрахунку спектральних характеристик періодичних структур)

**Статті у наукових періодичних виданнях інших держав із напрямку, з якого підготовлена дисертація, включених до міжнародних наукометричних баз Scopus та Web of Science**

10. Fitio, V., **Yaremchuk, I.**, Vernyhor, O., & Bobitski, Y. (2018). Resonance of surface-localized plasmons in a system of periodically arranged gold and silver nanowires on a dielectric substrate. *Applied Nanoscience*, 8(5), 1015–1024. <https://doi.org/10.1007/s13204-018-0686-z>. (Здобувачкою проведено розрахунок спектральних характеристик срібних та золотих нанодротів, періодично розміщених на діелектричній підкладці).

11. **Yaremchuk, I.**, Petrovska, H., Fitio, V., & Bobitski, Y. (2017). Optimization and Fabrication of the Gold-Coated GaAs Diffraction Gratings for Surface Plasmon Resonance Sensors. *Optik-International Journal for Light and Electron Optics*, 158 535–540. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2017.12.148>. (Здобувачкою проведено моделювання спектрів відбивання металізованих синусоїдальних ґраток від кута падіння променя)

12. Meškinis, Š., Peckus, D., Vasiliauskas, A., Čiegis, A., Gudaitis, R., Tamulevičius, T., **Yaremchuk I.** & Tamulevičius, S. (2017). Photovoltaic Properties and Ultrafast Plasmon Relaxation Dynamics of Diamond-Like Carbon Nanocomposite Films with Embedded Ag Nanoparticles. *Nanoscale Research Letters*, 12(1), 288-1–288-10. <https://doi.org/10.1186/s11671-017-2065-1>. (Здобувачкою досліджено властивості алмазоподібної вуглецевої плівки з диспергованими в неї наночастинками срібла в залежності від концентрації наночастинок)

13. Meškinis, Š., **Yaremchuk, I.**, Grigaliūnas, V., Vasiliauskas, A., & Čiegis, A. (2016). Plasmonic Properties of Nanostructured Diamond Like Carbon/Silver Nanocomposite Films with Nanohole Arrays. *Materials Science*, 22(4), 467–471. <http://dx.doi.org/10.5755/j01.ms.22.4.13193>. (Здобувачкою проведено моделювання спектрів поглинання нанокмпозитної плівки з масивом наноотворів в залежності від періоду та діаметру наноотворів)

14. Meškinis, Š., Čiegis, A., Vasiliauskas, A., Šlapikas, K., Gudaitis, R., **Yaremchuk, I.**, Fitio, V., Bobitski, Ya. & Tamulevičius, S. (2016). Annealing effects on structure and optical properties of diamond-like carbon films containing silver. *Nanoscale Research Letters*, 11(1), 146-1–146-9. <https://doi.org/10.1186/s11671-016-1362-4>. (Здобувачкою проведено моделювання спектрів поглинання алмазоподібної вуглецевої плівки з диспергованими в неї наночастинками срібла в залежності від форми та розміру срібних нанокластерів, що утворилися в результаті відпалу)

15. Ivanov, S., Barylyak, A., Besaha, K., Bund, A., Bobitski, Y., Wojnarowska-Nowak, R., **Yaremchuk I.**, & Kus-Liškiewicz, M. (2016). Synthesis, characterization, and photocatalytic properties of sulfur-and carbon-codoped TiO<sub>2</sub> nanoparticles. *Nanoscale Research Letters*, 11(1), 140-1–140-12. <https://doi.org/10.1186/s11671-016-1353-5>. (Здобувачкою досліджено оптичні властивості наночастинок двоокису титану з сіркою)

16. **Yaremchuk, I.**, Meškinis, Š., Fitio, V., Bobitski, Y., Šlapikas, K., Čiegis, A., Balevičius Z., Selskis A. & Tamulevičius, S. (2015). Spectroellipsometric characterization and modeling of plasmonic diamond-like carbon nanocomposite films with embedded Ag nanoparticles. *Nanoscale Research Letters*, 10(1), 157-1–175-7. <https://doi.org/10.1186/s11671-015-0854-y>. (Здобувачкою розраховано ефективну діелектричну проникність алмазоподібної вуглецевої плівки з диспергованими в неї наночастинками срібла в залежності від форми та розміру наночастинок)

17. Fitio, V.M., **Yaremchuk, I.Y.**, Romakh, V.V., & Bobitski, Y.V. (2015). A solution of one-dimensional stationary Schrödinger equation by the Fourier transform. *ACES*, 30(5), 534–539. <http://www.aces-society.org/search.php?vol=30&no=5&type=2>. (Здобувачкою проведено розрахунок дискретних рівнів енергії одновимірного кристалу)

18. **Yaremchuk, I.**, Tamulevičienė, A., Tamulevičius, T., & Tamulevičius, S. (2014). Optical Properties of DLC-Ag Nanocomposite and Grating Structures on their Base. *Applied Mechanics and Materials*, 490, 53–57. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMM.490-491.53>. (Здобувачкою проведено моделювання спектрів відбивання алмазоподібної вуглецевої плівки з диспергованими в неї наночастинками срібла)

19. **Yaremchuk, I.**, Tamulevičienė, A., Tamulevičius, T., Šlapikas, K., Balevičius, Z., & Tamulevičius, S. (2014). Modeling of the plasmonic properties of DLC-Ag nanocomposite films. *Physica Status Solidi (a)*, 211(2), 329–335. <https://doi.org/10.1002/pssa.201330067>. (Здобувачкою розраховано ефективну діелектричну проникність алмазоподібної вуглецевої плівки з диспергованими в неї наночастинками срібла та проведено моделювання спектрів поглинання)

20. **Yaremchuk, I.**, Tamulevičius, T., Fitio, V., Gražulevičiūtė, I., Bobitski, Y., & Tamulevičius, S. (2013). Guide-mode resonance characteristics of periodic structure on base of diamond-like carbon film. *Optics Communications*, 301, 1-6. <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2013.03.032>. (Здобувачкою проведено моделювання спектрів відбивання алмазоподібної вуглецевої плівки від довжини хвилі за різних кутів падіння променя)

21. Fitio, V.M., **Yaremchuk, I.Y.**, & Bobitski, Y.V. (2013). Accuracy of coupled-wave analysis of relief diffraction gratings in optical range. *Telecommunications and Radio Engineering*, 72(8), 661–671. doi: 10.1615/TelecomRadEng.v72.i8.20. (Здобувачкою розраховано спектри пропускання металевих та діелектричних ґраток в залежності від кількості використаних зв'язаних хвиль)

22. **Yaremchuk, I.**, Tamulevičius, T., Fitio, V., Gražulevičiūtė, I., Bobitski, Y., & Tamulevičius, S. (2013). Numerical implementation of the S-matrix algorithm for modeling of relief diffraction gratings. *Journal of Modern Optics*, 60(20), 1781–1788. <https://doi.org/10.1080/09500340.2013.861032>. (Здобувачкою розроблено алгоритм розрахунку дифракційної ефективності періодичних структур)

23. **Yaremchuk, I.Y.**, Fitio, V.M., & Bobitski, Y.V. (2011). New design of interference band-pass infrared filter. *Opto-Electronics Review*, 19(2), 193–197. <https://doi.org/10.2478/s11772-011-0008-4>. (Здобувачкою розроблено алгоритм розрахунку багатопарової періодичної структури).

24. Fitio, V., **Yaremchuk, I.**, & Bobitski, Y. (2011). Optical excitation of surface plasmon polariton and waveguide modes resonances on prismatic structures. *Optica Applicata*, 41(4), 929–939. [http://direct.dbc.wroc.pl/Content/17198/OA\\_vol41\\_2011\\_4.pdf#page=135](http://direct.dbc.wroc.pl/Content/17198/OA_vol41_2011_4.pdf#page=135) (Здобувачкою проведено моделювання спектрів відбивання призмових структур в умовах хвилеводного та плазмон-поляритонного резонансів)

#### **Розділи у книгах та збірках наукових праць, виданих за кордоном, які включено в наукометричні бази Scopus та Web of Science**

25. Bulavinets, T., Yaremchuk, I., & Bobitski, Y. (2016). Modeling Optical Characteristics of Multilayer Nanoparticles of Different Sizes for Applications in Biomedicine. *Nanophysics, Nanophotonics, Surface Studies, and Applications. Springer Proceedings in Physics*, (vol 183, pp.101-115). Springer, Cham. [https://doi.org/10.1007/978-3-319-30737-4\\_9](https://doi.org/10.1007/978-3-319-30737-4_9) (Здобувачкою проведено моделювання перерізів поглинання та розсіювання двошарових наночастинок).

26. Fitio, V. M., Yaremchuk, I. Y., Romakh, V. V., & Bobitski, Y. V. (2017). Numerical Solution of One-Dimensional Stationary Schrödinger Equation in the Frequency Domain. *International Conference on Nanotechnology and Nanomaterials. Springer Proceedings in Physics*, (vol 195., pp. 3-17). Springer, Cham. [https://doi.org/10.1007/978-3-319-56422-7\\_1](https://doi.org/10.1007/978-3-319-56422-7_1) (Здобувачкою проведено розрахунок дискретних рівнів енергії в періодичній квантоворозмірній структурі).

#### **Статті в матеріалах конференцій, які індексовані у наукометричних базах Scopus та Web of Science**

27. Fitio, V., Vernygor, O., **Yaremchuk, I.**, & Bobitski, Y. (2018 February). Analytical approximations of the noble metals dielectric permittivity. *14th International Conference on Advanced Trends in Radioelectronics, Telecommunications and Computer Engineering (TCSET)*, (pp. 426-430). IEEE. (Здобувачкою проведено моделювання діелектричної проникності срібла, золота, міді та алюмінію за аналітичними виразами)

28. **Yaremchuk, I.**, Petrovska, H., Fitio, V., Bobitski, Y., Sheregii, E., & Wojnarowska-Nowak, R. (2017, May). Sensors element on base of the relief Au-coated GaAs grating. *IEEE First Ukraine Conference on Electrical and Computer Engineering (UKRCON)*, (pp. 709-712). IEEE. (Здобувачкою проведено моделювання спектральних характеристик ґратки на основі GaAs, покритої шаром золота).

29. **Yaremchuk, I.**, Fitio, V., Meškiniš, Š., Tamulevičius, S., & Bobitski, Y. (2017). Design of Thin Film Nanocomposite Grating Based Sensors. *Nano-Optics: Principles Enabling Basic Research and Applications* (pp. 565-566). Springer, Dordrecht. (Здобувачкою проведено моделювання спектральних характеристик сенсорних елементів на основі нанокмпозитного матеріалу).

30. **Yaremchuk, I.**, Petrovska, Bobitski Y., Sheregii E., Wojnarowska-Nowak R. (2017, May). Gold-coated polycarbonate grating-based substrates for Raman spectroscopy. *2017 IEEE First Ukraine Conference on Electrical and Computer Engineering (UKRCON)*, (pp. 717-720). IEEE. (Здобувачкою проведено моделювання спектральних характеристик полікарбонатної ґратки, покритої шаром золота)

31. Fitio, V., **Yaremchuk, I.**, Bendzyak, A., & Bobitski, Y. (2017, May). Application RCWA for studying plasmon resonance under diffraction by metal gratings. *IEEE First Ukraine Conference on Electrical and Computer Engineering (UKRCON)*, (pp. 667-670). IEEE. (Здобувачкою проведено розрахунок спектральних характеристик металевих ґраток за допомогою модифікованого асимптотично точного методу зв'язаних хвиль)

32. Fitio, V., **Yaremchuk, I.**, Bendzyak, A., & Bobitski, Y. (2017, April). Modified RCWA method for studying the resonance diffraction phenomena on metal gratings. *IEEE 37th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO)*, (pp. 170-174). IEEE. (Здобувачкою проведено порівняння спектральних характеристик металевих та діелектричних ґраток, розрахованих за допомогою модифікованого асимптотично точного методу зв'язаних хвиль)

33. **Yaremchuk, I.**, Petrovska, H., Karelko, I., Fitio, V., & Bobitski, Y. (2017, April). Optimization of the grating-based structures for the efficient SERS substrates. *IEEE 37th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO)*, (pp. 119-123). IEEE. (Здобувачкою проведено моделювання спектральних характеристик металізованих ґраток для SERS застосувань)

34. Petrovska, H. A., **Yaremchuk, I. Y.**, Fitio, V. M., Suriadova, O. D., & Bobitski, Y. V. (2016, September). Optimization metal-coated gratings for sensors applications. *IEEE 13th International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling (LFNM)*, (pp. 30-31). IEEE. (Здобувачкою проведено розрахунок спектральних характеристик прямокутних металізованих ґраток)

35. Bulavinets, T. O., **Yaremchuk, I. Y.**, Kotsko, A. Y., & Bobitski, Y. V. (2016, September). Modeling absorption and scattering cross sections of the multilayer nanoshells in the near infrared spectrum region. *IEEE 13th International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling (LFNM)*, (pp. 35-37). IEEE.



(Здобувачкою проведено розрахунок перерізів поглинання та розсіяння нанооболонок в залежності від геометричних параметрів)

36. **Yaremchuk, I.**, Fitio, V., & Bobitski, Y. (2016, February). Shape effect of silver nanoparticles on plasmon properties of DLC: Ag nanocomposites. *13th International Conference on Modern Problems of Radio Engineering, Telecommunications and Computer Science (TCSET)*, (pp. 392-394). IEEE. (Здобувачкою проведено дослідження впливу розміру і форми наночастинок та спектри поглинання нанокомпозитного матеріалу)

37. **Yaremchuk, I. Y.**, Mineckiy, P. S., Fitio, V. M., Bobitski, Y. V., & Lesyuk, R. I. (2015, April). Plasmon resonance of the silver nanoparticles with different shape. *IEEE 35th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO)*, (pp. 185-187). IEEE. (Здобувачкою проведено розрахунок перерізів поглинання та розсіювання металевими наночастинами різної форми).

38. **Yaremchuk, I.**, Tamulevicienė, A., Tamulevicius, T., Šlapikas, K., Andrulevicius, M., & Tamulevicius, S. (2015). Optical Properties Nanocomposite Composed of Ag Nanoparticles Embedded in a DLC Film. *Nano-Structures for Optics and Photonics. Series: NATO Science for Peace and Security Series B: Physics and Biophysics*. (pp. 565-566). Springer, Dordrecht. (Здобувачкою проведено розрахунок ефективної діелектричної проникності алмазоподібної вуглецевої плівки з диспергованими в неї наночастинками срібла)

39. Petrovska, H. A., Fitio, V. M., **Yaremchuk, I. Y.**, & Bobitski, Y. V. (2013). Properties of prismatic structures consisting dielectric waveguide. *IEEE 12th International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling (LFNM)*, (pp. 71-73). IEEE. (Здобувачкою проведено розрахунок спектрів відбивання)

40. **Yaremchuk, I.Y.**, Fitio, V.M., & Bobitski, Y.V. (2013). High transmission of light through metallic grating limited by dielectric layers. *IEEE 12th International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling (LFNM)*, (pp. 74-76). IEEE. (Здобувачкою проведено розрахунок спектрів пропускання)

41. **Yaremchuk, I.**, Fitio, V., & Bobitski, Y. (2012, May). Silver nanoparticles under plasmon resonance conditions. *28th International Conference on Microelectronics (MIEL), 2012* (pp. 297-300). IEEE. (Здобувачкою проведено розрахунок перерізів поглинання срібних наночастинок в залежності від їх радіусу)

42. Kurylo, P., & **Yaremchuk, I.** (2012, February). Optical properties of silver-silica nanoshells. *International Conference on Modern Problems of Radio Engineering Telecommunications and Computer Science (TCSET)*, (pp. 520-520). IEEE. (Здобувачкою проведено розрахунок перерізів поглинання нанооболонок в залежності від їх геометрії)

43. **Yaremchuk, I.**, Fitio, V., & Bobitski, Y. (2012, February). Waveguide-based resonance sensor design. *International Conference on Modern Problems of Radio Engineering Telecommunications and Computer Science (TCSET)*, (pp. 508-508). IEEE. (Здобувачкою проведено моделювання спектрів відбивання призмового сенсора в умовах хвилеводного резонансу)

44. Fitio, V.M., **Yaremchuk, I.Y.**, & Bobitski, Y.V. (2011, September). Optical properties of the Ag and Au nanowires gratings. *11th International Conference on*

*Laser and Fiber-Optical Networks Modeling (LFNM), 2011* (pp. 1-2). IEEE. (Здобувачкою проведено розрахунок спектрів поглинання срібних нанодротів, періодично розміщених на діелектричній підкладці)

**Праці, що опубліковані в збірниках тез доповідей міжнародних та  
всеукраїнських конференцій**

45. **Yaremchuk I.**, Fitio V., Andrela V., & Bobitski Ya. (2017, August) Influence of temperature on the surface-plasmon resonance sensor elements. *International research and practice conference: Nanotechnology and nanomaterials (NANO 2017)*, (p. 478). SME Burlaka, Kiev (Здобувачкою проведено дослідження впливу температури на параметри матеріалів призового сенсорного елемента)

46. Fitio, V.M., **Yaremchuk, I.Ya.**, Vernyhor, O.L., & Bobitski Ya.V. (2017, August) Plasmon resonance in the periodic square nanowires on dielectric substrates. *International research and practice conference: Nanotechnology and nanomaterials (NANO 2017)*, (p. 578). SME Burlaka, Kiev (Здобувачкою проведено моделювання спектрів поглинання золотих нанодротів, періодично розміщених на підкладці)

47. **Yaremchuk, I.** (2017, Серпень) Influence Of Temperature On The Sensitivity Surface-Plasmon Resonance Sensor. *IX-а Українсько-польська науково-практична конференція «Електроніка та інформаційні технології», (ЕЛІТ-2017)* (с. 249-250). Видавництво ЛНУ ім. І. Франка, Львів (Здобувачкою проведено дослідження впливу температури на параметри срібного тонкого шару в призмовому сенсорному елементі)

48. Bobitski, Ya., **Yaremchuk, I.**, Sheregii, E., & Wojnarowska-Nowak, R. (2016, September) Gold-Coated Gratings for SERS Applications. *7<sup>th</sup> International Conference on Advanced Optoelectronics and Lasers CAOL\*2016* (pp.46-47). Odessa, Ukraine (Здобувачкою проведено моделювання розподілу поля в металізованих ґратках)

49. **Яремчук, І.Я.** (2015, Серпень) Моделювання оптичних характеристик алмазоподібних вуглецевих плівок допованих сріблом. *VII-а Українсько-польська науково-практична конференція «Електроніка та інформаційні технології», (ЕЛІТ -2015)* (с. 208). Видавництво ЛНУ ім. І. Франка, Львів (Здобувачкою проведено моделювання спектрів поглинання алмазоподібних вуглецевих плівок з металевими нановключеннями)

50. Barylyak A., **Yaremchuk I.**, Wojnarowska R., Sheregii E., & Bobitski Ya. (2015, June) Characterization and plasmonic effect of Ag-TiO<sub>2</sub>:S nanocomposites. *Materials of scientific and technical conference “Laser technologies. Laser and their application”*, (pp. 125–127) Truskavets, Ukraine (Здобувачкою проведено дослідження оптичних характеристик наночастинок Ag-TiO<sub>2</sub>:S)

51. **Yaremchuk I.**, Fitio V., Volos V., & Bobitski Ya. (2015, August) Plasmon effects in DLC-Ag nanocomposite structures. *Proc. 17<sup>th</sup> International Conference School Advanced Materials and Technologies*, (pp. 52) Palanga, Lithuania (Здобувачкою визначено умови виникнення плазмонного резонансу в композитних матеріалах)

52. **Yaremchuk, I.**, Fitio, V., Meškinis, Š., Tamulevičius, S., & Bobitski, Ya. (2015, October). Thin-film nanocomposites grating based sensors. *International meeting Clusters and Nanostructured materials* (p. 138) Uzhhorod, Vodogray, Ukraine (Здобувачкою проведено моделювання спектральних характеристик ґратки на основі нанокмпозитного матеріалу)

53. **Yaremchuk, I.**, Fitio, V., Velska, K., & Bobitski, Ya. (2014, August) Effective dielectric permittivity of plasmonic nanocomposite materials. *Summer school and International research and practice conference: Nanotechnology and nanomaterials (NANO 2014)* (p. 316) Eurosvit, Lviv (Здобувачкою проведено розрахунок ефективної діелектричної проникності нанокмпозиту на основі срібних наночастинок)

54. Fitio, V., **Yaremchuk, I.Ya.**, Romakh, V.V., & Bobitski, Ya.V. (2014, August) One-dimensional Stationary Schrödinger Equation with the Fourier Transformation. *International Conference Nanomaterials: Applications and Properties* (pp. 02NAESF07-1 - 02NAESF07-2) Lviv, Ukraine. (Здобувачкою проведено розрахунок дискретних рівнів енергії в квантоворозмірній структурі)

55. **Yaremchuk, I.**, Tamulevičienė, A., Tamulevičius, T., Šlapikas, K., Andrulėvicius, & M., Tamulevičius, S. (2013, August) Optical absorption properties of the DLC-Ag nanocomposite films. *15<sup>th</sup> International Conference School Advanced Materials and Technologies* (p. 97) Palanga, Lithuania (Здобувачкою проведено розрахунок спектрів поглинання нанокмпозиту на основі срібних наночастинок)

56. **Yaremchuk, I.**, Tamulevičienė, A., Tamulevičius, T., Andrulėvicius, M., & Tamulevičius, S. (2013, November) Nanocomposite DLC-Ag based periodic structures for sensing applications. *International Conference NanotechItaly 2013* (p. 107). Venice, Italy. (Здобувачкою проведено моделювання оптичних характеристик періодичних структур на основі нанокмпозитного матеріалу)

57. Fitio, V., **Yaremchuk, I.**, & Bobitski, Ya. (2012, August) Interaction light with nanowires grating on dielectric substrate. *14<sup>th</sup> International Conference School Advanced Materials and Technologies* (p. 45) Palanga, Lithuania (Здобувачкою проведено розрахунок спектрів поглинання масиву золотих нанодротів)

58. **Yaremchuk, I.**, Fitio, V., Andrulėvicius, M., & Tamulevicius, S. (2012, August) Rigorous Coupled-Wave Analysis of Multilayered Grating Structures. *14<sup>th</sup> International Conference School Advanced Materials and Technologies* (p. 70) Palanga, Lithuania (Здобувачкою проведено моделювання дифракційної ефективності діелектричних та металевих ґраток)

59. **Yaremchuk, I.** (2012, October) Guided-mode resonant grating filters. *13<sup>th</sup> International Young Scientists Conference Optics and High Technology Material Science SPO 2012*, (p. 261) Kyiv, Ukraine (Здобувачкою проведено моделювання спектральних характеристик фільтра на основі ґратки)

60. Фітьо, В., **Яремчук, І.**, & Бобицький, Я. (2011, Вересень). Резонанс плазмонів в ґратках з нанодротоми з срібла та золота. *III Науково-практична конференція «Електроніка та інформаційні технології», (ЕЛІТ-2011)* (с.143) Видавництво ЛНУ ім. І. Франка, Львів (Здобувачкою проведено розрахунок спектрів поглинання масиву срібних нанодротів)

61. Atamanyuk, N.V. Fitio, V.M., **Yaremchuk, I.Y.**, & Bobitski, Ya.V. (2011, October) Waveguide resonance in a prism structure. *3<sup>th</sup> International Conference «Electronics and applied physics»* (pp. 47–48) Kyiv, Ukraine (Здобувачкою проведено розрахунок спектрів відбивання призмової структури)

62. **Yaremchuk, I.Ya.**, Fitio, V.M., & Bobitski, Ya.V. (2011, October) Metallic nanowires gratings under plasmon resonance condition. *12<sup>th</sup> International Young Scientists Conference Optics and High Technology Material Science SPO 2011* (p. 261) Kyiv, Ukraine. (Здобувачкою проведено дослідження умов виникнення плазмонного резонансу в масиві металевих нанодротів)

63. Fitio, V.M., **Yaremchuk, I.Ya.**, Bobitski, Ya.V. (2010, May) Resonance absorption of energy of waveguide modes in prismatic structure with metallic film and dielectrics layer. *8<sup>th</sup> International conference on Electronic Processes In Organic And Inorganic Materials*, (p. 148) Synyogora, Ukraine (Здобувачкою проведено моделювання спектральних характеристик призмової структури)

64. **Yaremchuk, I.Ya.**, Fitio, V.M., Bobitski, Ya.V. (2010, September) Surface Plasmon-polaritons and waveguide modes in prismatic structures. *10<sup>th</sup> International Conference on Laser and Fiber-Optical Networks Modeling LFNМ\*2010* (pp. 63-65) Sevastopol, Ukraine. (Здобувачкою проведено дослідження умов виникнення плазмон-поляритонного та хвилеводного резонансів в призмових структурах)

65. **Yaremchuk, I.** (2010, October) Refractive index sensitivity the prismatic structures. *11<sup>th</sup> International Young Scientists Conference Optics and High Technology Material Science SPO 2010* (p. 103) Kyiv, Ukraine (Здобувачкою проведено розрахунок спектрів відбивання призмових структур)