

научный рецензируемый журнал



ВЛИЯНИЕ БЛИЗОСТИ КОРОТКОЗАМЫКАТЕЛЯ К ИССЛЕДУЕМОМУ ОБРАЗЦУ НА ИЗМЕРЕНИЕ МАТЕРИАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ В КВАЗИ-ТЕМ ПРИБЛИЖЕНИИ В ПОЛОСКОВОЙ ЛИНИИ Иванов П.А., Петров Д.А., Розанов К.Н.

2023 август - сентябрь

Nº 4 (6)

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук

Журнал основан в 2022 году

Выпуск № 4 (6)

Современная электродинамика

научный рецензируемый журнал

Под редакцией академика РАН А.Н. Лагарькова

Москва, 2023

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук

ISSN 2949-0553

Современная электродинамика Научный рецензируемый журнал. Издаётся с октября 2022 года. Выходит один раз в два месяца.

№ 4 (6)

август - сентябрь 2023

Главный редактор академик РАН А.Н.Лагарьков

Редакционная коллегия: к.т.н. Н.П. Балабуха, к.т.н. К.М. Басков, д.ф.-м.н. А.П. Виноградов, д.ф.м.н. А.А. Дорофеенко, д.ф.-м.н. В.Н. Кисель, к.ф.-м.н. К.И. Кугель, д.ф.-м.н. А.М. Мерзликин, д.ф.-м.н. А.А. Пухов, д.ф.-м.н. А.Л. Рахманов, д.ф.-м.н. А.В. Рожков, д.ф.-м.н. К.Н. Розанов, к.т.н. И.А. Рыжиков, д.ф.-м.н. А.К. Сарычев, к.ф.-м.н. В.С. Солосин

Адрес редакции:

125412, г. Москва, ул. Ижорская, д.13, стр. 6 тел., факс 8 (495) 484-26-33 эл.почта electrodynamics@mail.ru Зав. редакцией Е.В. Зеневич Компьютерная вёрстка: Е.В. Зеневич

Свидетельство о регистрации Эл № ФС77-83666 от 26.07.2022 г.

Подписано в печать 16.10.2023. Тираж 30 экз.

© ИТПЭ РАН, 2023

Содержание номера

1	Теоретическая электродинамика	4
	Климов В.В.	
	УПРАВЛЕНИЕ ОТРАЖЕНИЕМ И ПРОХОЖДЕНИЕМ СВЕТА С ПО-	
	МОЩЬЮ АКТИВНОЙ ПЛАЗМОННОЙ МЕТАПОВЕРХНОСТИ	4
2	Вопросы экспериментальной электродинамики	20
	Иванов П.А., Петров Д.А., Розанов К.Н.	
	ВЛИЯНИЕ БЛИЗОСТИ КОРОТКОЗАМЫКАТЕЛЯ К ИССЛЕДУЕМО-	
	МУ ОБРАЗЦУ НА ИЗМЕРЕНИЕ МАТЕРИАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ	
	В КВАЗИ-ТЕМ ПРИБЛИЖЕНИИ В ПОЛОСКОВОЙ ЛИНИИ	20
3	Вычислительная электродинамика	30
	Гильмутдинов Р.В., Меньших Н.Л., Солосин В.С., Фёдоров С.А.	
	ФОРМИРОВАНИЕ ДИАГРАММЫ НАПРАВЛЕННОСТИ ШИРОКО-	
	ПОЛОСНОЙ АНТЕННЫ ДЛЯ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ЕЕ В КАЧЕСТВЕ	
	ОБЛУЧАТЕЛЯ	30
4	Методические заметки	38
	Vinogradov A.P., Dorofeenko A.V.	
	QUASISTATIC (LOCALIZED) PLASMONS: FROM LANGMUIR TO	
	FERRELL	38
	Виноградов А.П., Лисянский А.А.	
	КОММЕНТАРИЙ К СТАТЬЕ А. СМЕКАЛЯ «К КВАНТОВОЙ ТЕО-	
	РИИ РАССЕЯНИЯ»	50

УПРАВЛЕНИЕ ОТРАЖЕНИЕМ И ПРОХОЖДЕНИЕМ СВЕТА С ПОМОЩЬЮ АКТИВНОЙ ПЛАЗМОННОЙ МЕТАПОВЕРХНОСТИ

Климов В.В. *¹

¹ ФГБУН Физический институт им П.Н. Лебедева Российской академии наук, Москва, Россия

Статья поступила в редакцию 25.08.2023 Одобрена после рецензирования 13.09.2023 Принята к публикации 02.10.2023

Аннотация

Предложен новый подход к созданию метаповерхностей на основе комбинации пассивных и активных мета-атомов. Исследованы оптические свойства таких метаповерхностей. Показано, что при определенном выборе параметров метаповерхности при изменении мощности накачки возможно эффективное переключение между полным прохождением и полным отражением света.

Ключевые слова: активные метаповерхности, мета-атомы, плазмоника, РТ симметрия, исключительные точки

EDN AAARHA

doi: 10.24412/2949-0553-2023-46-4-19

Введение

В настоящее время активно исследуются метаповерхности, то есть поверхности, образованные наночастицами, которые обладают резонансными свойствами и которые часто называются мета-атомами и мета-молекулами. Метаповерхности имеют особые свойства, и предполагается, что они могут быть полезными для создания новых устройств управления световыми потоками [1, 2], а также для создания нанобиосенсоров [3, 4]. Среди метаповерхностей особое место занимают активные метаповерхности, то есть такие метаповерхности, свойства которых могут произвольно изменяться во времени и в пространстве. Обычно в качестве управляющих параметров рассматривают изменение геометрических параметров или агрегатного состояния наночастиц [5–13].

В настоящей работе мы представим новый подход, который заключается в оптическом управлении поглощением в мета-молекулах с помощью внешнего оптического поля. Эта цель достигается путем использования мета-молекул, которые состоят из пассивных и активных наночастиц.

Под активными наночастицами в данной работе мы понимаем плазмонные наночастицы, покрытые слоем активных молекул красителя, квантовых точек или центров окраски. Аналогичные активные наночастицы уже использовались для демонстрации плазмонного спазера (лазера) [14]. Пассивные наночастицы имеют аналогичную структуру, но без молекул красителя.

Эффективная диэлектрическая проницаемость активной компоненты наночастицы (например, оболочки) вблизи резонанса поля с активными молекулами может быть приближенно описана выражением [15, с. 111],

$$\varepsilon_{shell} = \varepsilon_{shell,0} + \delta \varepsilon_{gain} \delta \varepsilon_{gain} = -iC_0 \frac{|\mu_{21}|^2 \tau_p n_0}{\hbar},$$
(1)

где $\varepsilon_{shell,0}$ - диэлектрическая проницаемость без активных молекул красителя, n_0 - инверсия населенности, определяемая интенсивностью накачки, C_0 - концентрация активных молекул, μ_{21} - недиагональный матричный элемент оператора дипольного момента молекулы красителя, τ_p - время релаксации поляризации.

^{*}Автор, ответственный за переписку: Василий Васильевич Климов, klimov256@gmail.com

При малой интенсивности накачки или в ее отсутствие инверсия n_0 отрицательна, и диэлектрическая проницаемость (1) соответствует поглощающей среде. При достаточно большой интенсивности накачки инверсия населенности n_0 становится положительной, а среда становится усиливающей. Геометрия предлагаемой метаповерхности показана на рис. 1.

В данной работе оптические свойства конкретных активных метаповерхностей (см. рис. 1) описываются путем самосогласованного суммирования вкладов от излучений отдельных мета-молекул, которые аппроксимируются точечными диполями. Диэлектрическая проницаемость мета-атомов считается существующей и заданной. Предполагается также, что метаповерхность находится в вакууме.



Рисунок 1 – Геометрия метаповерхности, состоящей из мета-молекул из двух мета-атомов. Синий цвет соответствует мета-атому с потерями, в то время как красный цвет соответствует активному мета-атому, который может компенсировать потери в первой частице. *Р*-период решетки

Оптические свойства мета-молекулы, состоящей из активного и пассивного мета-атомов

Так как размеры плазмонных мета-атомов малы по сравнению с длиной волны, то их можно описывать точечными диполями. В случае плазмонного мета-атома с активной или пассивной оболочкой (см. рис. 2) его дипольная поляризуемость имеет вид [16]:

$$\alpha = R_{shell}^3 \frac{(\varepsilon_{shell} - 1) (\varepsilon_C + 2\varepsilon_{shell}) + \beta (\varepsilon_C - \varepsilon_{shell}) (1 + 2\varepsilon_{shell})}{(\varepsilon_{shell} + 2) (\varepsilon_C + 2\varepsilon_{shell}) + 2\beta (\varepsilon_{shell} - 1) (\varepsilon_C - \varepsilon_{shell})}; \beta = \left(\frac{R_C}{R_{shell}}\right)^3 < 1.$$
(2)

Легко видеть, что поляризуемость (2) всегда можно представить в виде

$$\alpha = R^3 \frac{\varepsilon_C - q}{\varepsilon_C + p},\tag{3}$$

где R, p, q - некоторые константы, зависящие от параметров оболочки:

$$q = \varepsilon_{shell} \frac{2\varepsilon_{shell}(1-\beta)-2-\beta}{(1+2\beta)\varepsilon_{shell}+\beta-1},$$

$$p = 2\varepsilon_{shell} \frac{\varepsilon_{shell}(1-\beta)+\beta+2}{\varepsilon_{shell}(2\beta+1)+2(1-\beta)},$$

$$R^{3} = R^{3}_{shell} \frac{(1+2\beta)\varepsilon_{shell}+\beta-1}{\varepsilon_{shell}(2\beta+1)+2(1-\beta)}.$$
(4)

Например, в частном случае $R_{shell}/R_C = 1.1$ и $\varepsilon_{shell} = 2.1 - 0.5i$ (усиливающая среда) имеем

$$\alpha = (0.96R_{shell})^3 \frac{(\varepsilon_C - 0.11i) - 0.7}{(\varepsilon_C - 0.14i) + 2.4} = (0.96R_{shell})^3 \frac{(\varepsilon_C' + (\varepsilon_C'' - 0.11)i) - 0.7}{(\varepsilon_C' + (\varepsilon_C'' - 0.14)i) + 2.4},\tag{5}$$



Рисунок 2 – Геометрия плазмонной наночастицы с оболочкой

где ε'_C и $\varepsilon''_C > 0$ - действительная и мнимая части диэлектрической проницаемости плазмонного ядра.

Из (5) хорошо видно, что активная оболочка приводит к эффективному уменьшению потерь в наночастице.

Для конкретности в дальнейшем мы будем использовать для поляризуемостей активного и пассивного мета-атомов выражения

$$\tilde{\alpha}_1 = R_0^3 \frac{\varepsilon_1 - 1}{\varepsilon_1 + 2}, \qquad \tilde{\alpha}_2 = R_0^3 \frac{\varepsilon_2 - 1}{\varepsilon_2 + 2},\tag{6}$$

которые совпадают с поляризуемостями однородных сферических наночастиц радиуса R_0 с проницаемостями ε_1 , ε_2 . Рассмотрение других значений параметров p, q в (3) проводится аналогично.

Геометрия одной мета-молекулы, состоящей из двух сферических мета-атомов с поляризуемостями (6) показана на рис. 3.



Рисунок 3 – Геометрия мета-молекулы, из множества которых сделана наша метаповерхность. Каждый метаатом – это сферическая частица радиуса $R_0 \ll \lambda$ с диэлектрической проницаемостью ε_1 или ε_2 соответственно

Общая теория оптических свойств мета-молекулы из двух сферических наночастиц известна как для частиц произвольного размера [17], так и для наночастиц, где можно пренебречь запаздыванием [18–21]. Для плазмонных наночастиц естественным спектральным параметром является не частота, а диэлектрическая проницаемость, и поэтому в дальнейшем мы будем искать такие значения диэлектрической проницаемости, при которой в мета-атоме, мета-молекуле или мета-поверхности возникают резонансы или другие особенности. Резонансные частоты можно затем найти, если использовать тот или иной закон дисперсии. Например, в случае закона дисперсии Друде

$$\varepsilon\left(\omega\right) = 1 - \frac{\omega_{plasmon}^2}{\omega^2},\tag{7}$$

зная резонансную диэлектрическую проницаемость, можно найти и резонансную частоту:

$$\omega = \frac{\omega_{plasmon}}{\sqrt{1 - \varepsilon\left(\omega\right)}}.$$
(8)

На рис. 4 показаны зависимости резонансных значений диэлектрической проницаемости метамолекулы, показанной на рис. 3, в отсутствие потерь от расстояния между мета-атомами [18, 19]. Для вычисления этой зависимости использовалась бисферическая система координат, в которой переменные разделяются, а удовлетворение граничных условий на поверхности сфер приводит к бесконечной системе линейных по ε однородных уравнений, нетривиальное решение которой возможно только при выполнении этих дисперсионных уравнений.



Рисунок 4 – Закон дисперсии диэлектрических проницаемостей мета-молекулы в зависимости от расстояния между двумя сферическими наночастцами в пренебрежении запаздыванием (a) m = 0 (осесимметричные

колебания) и (b) m = 1 (колебания перпендикулярные оси). В нижней части графиков на расстояниях $R_{12}/2R_0 < 1.2$ видно возникновение новых мод (М-моды), что свидетельствует о переходе в режим сильного взаимодействия между мета-атомами. Красные линии - это дипольные колебания, зеленые - квадрупольные и т.д. [18–20]

Как видно из рис. 4, при больших расстояниях между мета-атомами $R_{12}/(2R_0) > 2$ взаимодействие между ними очень мало, и в спектре присутствуют только продольные (L - моды) и поперечные (P - моды) колебания с диэлектрическими проницаемостями, близкими к резонансным проницаемостям изолированных мета-атомов

$$\varepsilon_n\left(\omega\right) = -\frac{n+1}{n},\tag{9}$$

где n определяет мультипольность плазмонных колебаний изолированной сферической частицы [18–20].

Сильное взаимодействие между дипольными модами и модами более высокой мультипольности изолированных мета-атомов возникает на расстояниях $R_{12}/2R_0 < 1.2$, где пространственная структура мод сильно меняется и даже возникают новые моды (M - моды). Поэтому для корректности мы будем далее рассматривать случай $R_{12}/2R_0 = 1.2$, когда приближение мета-атомов точечными диполями еще корректно.

Дипольные моменты мета-атомов в мета-молекуле с учетом их квазистатического дипольного взаимодействия и внешнего однородного поля **E**₀ можно описать системой уравнений:

$$\mathbf{d}_{1} = \tilde{\alpha}_{1} \left(\mathbf{E}_{0} + \mathbf{E}_{2} \left(\mathbf{r}_{1} \right) \right) = \tilde{\alpha}_{1} \left(\mathbf{E}_{0} + \overset{\leftrightarrow}{G}^{0} \left(\mathbf{r}_{1} - \mathbf{r}_{2} \right) \mathbf{d}_{2} \right);$$

$$\mathbf{d}_{2} = \tilde{\alpha}_{2} \left(\mathbf{E}_{0} + \mathbf{E}_{1} \left(\mathbf{r}_{2} \right) \right) = \tilde{\alpha}_{2} \left(\mathbf{E}_{0} + \overset{\leftrightarrow}{G}^{0} \left(\mathbf{r}_{1} - \mathbf{r}_{2} \right) \mathbf{d}_{1} \right),$$

(10)

где

$$G^{0}_{\mu\nu}(\mathbf{R}) = -\frac{\delta_{\mu\nu}}{|\mathbf{R}|^{3}} + 3\frac{\mathbf{R}_{\mu}\mathbf{R}_{\nu}}{|\mathbf{R}|^{5}}, \mu, \nu = 1, 2, 3$$
(11)

- квазистатическая функция Грина дипольного источника и **E**₀ - внешнее поле.

Решая уравнения (10), можем найти дипольный момент мета-молекулы при различных ориентациях внешнего поля:

$$\mathbf{d}_{tot,z} = \mathbf{d}_{1.z} + \mathbf{d}_{2,z} = \frac{\left(\tilde{\alpha}_1 + \tilde{\alpha}_2 + \frac{4\tilde{\alpha}_1\tilde{\alpha}_2}{R_{12}^3}\right)}{\left(1 - \frac{4\tilde{\alpha}_1\tilde{\alpha}_2}{R_{12}^6}\right)} \mathbf{E}_{0z},\tag{12}$$

$$\mathbf{d}_{tot,x} = \mathbf{d}_{1,x} + \mathbf{d}_{2,x} = \frac{\left(\tilde{\alpha}_1 + \tilde{\alpha}_2 - \frac{2\tilde{\alpha}_1\tilde{\alpha}_2}{R_{12}^3}\right)}{\left(1 - \frac{\tilde{\alpha}_1\tilde{\alpha}_2}{R_{12}^6}\right)} \mathbf{E}_{0x}.$$
(13)

Исходя из (12) и (13), поляризуемости мета-молекулы можем представить в виде тензора с диагональными компонентами [21]:

$$\alpha_{xx}^{M} = \alpha_{yy}^{M} = \frac{R_{0}^{3}\xi^{3} \left(\alpha_{1}\xi^{3} + \alpha_{2}\xi^{3} - \alpha_{1}2\alpha_{2}\right)}{\xi^{6} - \alpha_{1}\alpha_{2}},\tag{14}$$

$$\alpha_{zz}^{M} = \frac{R_0^3 \xi^3 \left(\alpha_1 \xi^3 + \alpha_2 \xi^3 + 4\alpha_1 \alpha_2\right)}{\xi^6 - 4\alpha_1 \alpha_2},\tag{15}$$

где $\xi = R_{12}/R_0 > 2$, α_1 и α_2 – дипольные поляризуемости изолированных мета-атомов без фактора R_0^3 , то есть

$$\alpha_1 = \frac{\varepsilon_1 - 1}{\varepsilon_1 + 2}, \alpha_2 = \frac{\varepsilon_2 - 1}{\varepsilon_2 + 2}.$$
(16)

Учет вклада более высоких мультиполей в поляризуемость мета-молекулы также возможен [18–22], но в данной работе для получения наглядных аналитических результатов мы ограничимся случаем слабого взаимодействия $R_{12}/R_0 \geq 2.4$, когда высшими мультиполями можно пренебречь.

Собственные колебания в изолированной мета-молекуле возникают в случае, когда знаменатель в (14) или (15) обращаются в нуль, то есть когда

$$\xi^{6} - \beta^{2} \alpha_{1} \alpha_{2} = 0 \Rightarrow (\varepsilon_{1} + 2) (\varepsilon_{2} + 2) \xi^{6} = \beta^{2} (\varepsilon_{1} - 1) (\varepsilon_{2} - 1).$$

$$(17)$$

Параметр $\beta = -1$ соответствует собственным колебаниям с дипольным моментом, перпендикулярным оси мета-молекул (оси х и у на рис. 1), в то время как $\beta = 2$ соответствует собственным колебаниям с дипольным моментом, параллельным оси мета-молекул (ось z на рис. 1).

В дальнейшем мы будем выделять два случая рассмотрения мета-молекулы. Первый случай – это мета-молекулы с РТ (parity-time) симметрией [22]. Этот случай реализуется, когда

$$\varepsilon(x, y, z) = \varepsilon^*(x, y, -z), \qquad (18)$$

или в нашем случае:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon' + i\varepsilon'', \quad \varepsilon_2 = \varepsilon' - i\varepsilon''.$$
 (19)

Здесь * обозначает комплексное сопряжение. Этот случай более интересен с теоретической точки зрения, так как позволяет найти особые (exceptional) собственные колебания системы.

Второй случай мета-молекул, который мы будем рассматривать, – это несимметричные системы, в которых одна частица имеет фиксированную мнимую часть диэлектрической проницаемости, в то время как мнимая часть другой может изменяться по величине и по знаку посредством оптической накачки (см. (1)). Этот более общий случай более адекватно описывает возможные экспериментальные реализации данного подхода.

В первом случае $\varepsilon_1'' = -\varepsilon_2'' = \varepsilon''$ и дисперсионное уравнение (17), связывающее между собой действительную и мнимые части проницаемостей активной и пассивной наночастицы, принимает вид:

$$\Delta = \beta^2 \left(\left(\varepsilon' - 1\right)^2 + \varepsilon''^2 \right) - \xi^6 \left(\left(\varepsilon' + 2\right)^2 + \varepsilon''^2 \right) = 0.$$
⁽²⁰⁾

Весьма важно, что в этом случае дисперсионное уравнение является четной функцией мнимой части диэлектрической функции $\varepsilon''.$

Уравнение (20) определяет дисперсионную связь между ε' и ε'' . С геометрической точки зрения это решение описывается окружностью

$$\left(\varepsilon' - \varepsilon'^*\right)^2 + \varepsilon''^2 = r^{*2} \tag{21}$$

с центром в точке

$$\varepsilon'^{*} = -\left(2\xi^{6} + \beta^{2}\right) / \left(\xi^{6} - \beta^{2}\right)$$
(22)

и радиусом

$$a^* = 3\xi^3 |\beta| / (\xi^6 - \beta^2).$$
 (23)

Такие РТ симметричные решения уравнения (20) существуют при $\varepsilon'' < \varepsilon''_{max} = r^*$ и соответствуют незатухающим электромагнитным колебаниям, несмотря на присутствие потерь и усиления в метамолекуле.

В несимметричном случа
е $\varepsilon_1''\neq -\varepsilon_2''$ дисперсионное уравнение (20) имеет нетривиальные решения при выполнении условий

$$\varepsilon_1'' \times \varepsilon_2'' = -\frac{9\beta^2 \xi^6}{(\xi^6 - \beta^2)^2}, \quad \varepsilon' = \varepsilon'^* = -\frac{2\xi^6 + \beta^2}{\xi^6 - \beta^2}.$$
 (24)

Решение дисперсионного уравнения (17) в произвольном случае показано на рис. 5:



Рисунок 5 – Решение дисперсионного уравнения (17) для $\xi = R_{12}/R_0 = 2.4$. Красные и синие кривые соответствуют поперечным ($\beta = -1$) или продольным ($\beta = 2$) колебаниям, соответственно. Черные точки обозначают исключительные (exceptional) точки, в которых происходит смена режима собственных колебаний

Замкнутые круги на рис. 5 соответствуют РТ симметричному решению (21), в то время как гиперболы, лежащие в плоскости, перпендикулярной плоскости кругов, соответствую решению (24). Черные точки обозначают исключительные (exceptional) точки, в которых происходит смена режима собственных колебаний. Это решение обобщает решение, найденное для двухмерного случая [23].

Еще раз подчеркнем, что при рассматриваемых нами параметрах при описании оптических свойств мета-молекулы можно пренебречь модами более высокой мультипольности по сравнению с дипольными. Для подтверждения этого факта на рис. 6 показаны решения дисперсионного уравнения для РТ симметричной системы из двух сферических наночастиц конечного размера с учетом всех мультиполей [21].

Из этого рисунка хорошо видно, что при рассматриваемых нами параметрах $(R_{12}/2R_0 \ge 1.2)$ можно пренебречь модами более высокой мультипольности. При меньших расстояниях между сферическими наночастицами $(R_{12}/2R_0 < 1.18)$ моды начинают сливаться, и для описания оптических свойств мета-молекул на таких расстояниях требуется учет мультиполей более высоких порядков.

Эффективная поляризуемость мета-молекулы в метаповерхности

Образующие метаповерхность мета-молекулы взаимодействуют между собой и поэтому выражения для поляризуемостей (14) и (15) должны быть модифицированы. Для наглядности мы вычислим эффективные поляризуемости мета-молекул в случае нормального падения света на метаповерхность.



Рисунок 6 – Решение дисперсионного уравнения для РТ симметричной системы из двух сферических наночастиц конечного размера с учетом всех мультиполей в плоскости $\varepsilon_1'' = -\varepsilon_2'' = \text{Im}\varepsilon$ (эта плоскость показана на рис. 5) для различных расстояний между частицами $R_{12}/(2R_0)$. Красные кружочки показывают исключительные точки. Красный квадрат показывает область слабого влияния высших мультиполей на дипольные моды, $R_{12}/2R_0 \ge 1.2$, $Re\varepsilon \approx -2$. В этой области дисперсионные кривые являются кругами, как и на рис. 5

В случае симметричной квадратной решетки с периодом P для дипольных моментов метамолекул, которые считаются точечными, можно написать самосогласованные уравнения, аналогичные уравнениям (10),

$$p_y = \alpha_{yy}^M \left(E_{0y} + \sum_{i \neq j} G_{yy} \left(\mathbf{R}_{ij} \right) p_y \right), \qquad p_z = \alpha_{zz}^M \left(E_{0z} + \sum_{i \neq j} G_{zz} \left(\mathbf{R}_{ij} \right) p_z \right)$$
(25)

для поляризации падающего света вдоль ос
иyили zсоответственно. В (25)
 $\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$ - расстояния между узлами решетки,

$$G_{yy}\left(\mathbf{R}_{ij}\right) = G_{zz}\left(\mathbf{R}_{ij}\right) = G_{xx}\left(\mathbf{R}_{ij}\right) = G\left(\mathbf{R}_{ij}\right)$$

диагональные члены тензорной функции Грина уравнения Максвелла [24],

$$G_{\mu\nu}(\mathbf{R}) = \left[k_0^2 \left(\delta_{\mu\nu} - \mathbf{n}_{\mu}\mathbf{n}_{\nu}\right) + \left(3\mathbf{n}_{\mu}\mathbf{n}_{\nu} - \delta_{\mu\nu}\right)\frac{(1 - ik_0\mathbf{R})}{\mathbf{R}^2}\right]\frac{e^{ik_0\mathbf{R}}}{\mathbf{R}}, \, \mu, \nu = 1, 2, 3$$
(26)

и i, j - составные индексы, характеризующие положение мета-молекул в решетке, i = (m, n), j = (p, q).

Решение уравнений (25) имеет вид

$$p_y = \alpha_{yy}^{eff} E_{0y}, \quad p_z = \alpha_{zz}^{eff} E_{0z}, \tag{27}$$

где $\alpha_{yy}^{eff} \alpha_{zz}^{eff}$ - эффективные поляризуемости мета-молекулы с учетом их взаимодействия:

$$\alpha_{yy}^{eff} = \left(1/\alpha_{yy}^M - \aleph\right)^{-1}, \quad \alpha_{zz}^{eff} = \left(1/\alpha_{zz}^M - \aleph\right)^{-1},\tag{28}$$

где

$$\aleph = \sum_{i \neq j} G\left(\mathbf{R}_{ij}\right) = \frac{1}{2} \sum_{j \neq 0} \frac{e^{ik_0 \mathbf{R}_{j0}}}{\mathbf{R}_{j0}} \left(k_0^2 + 1/\mathbf{R}_{j0}^2 - ik_0/\mathbf{R}_{j0}\right).$$
(29)

При выводе (29) использован тот факт, что $\frac{y^2}{\mathbf{R}^2} = \frac{z^2}{\mathbf{R}^2} = \frac{1}{2}$ в случае суммирования по симметричной решетке.

Полагая в (29) $\mathbf{R}_{j0} = P\sqrt{m^2 + n^2} = P\tilde{R}$, получим

$$\alpha_{yy}^{eff} = \left(1/\alpha_{yy}^M - \tilde{\aleph}/P^3\right)^{-1}, \qquad \alpha_{zz}^{eff} = \left(1/\alpha_{zz}^M - \tilde{\aleph}/P^3\right)^{-1},\tag{30}$$

$$\tilde{\aleph} = \frac{1}{2} \sum_{m^2 + n^2 \neq 0} \frac{e^{ix\sqrt{m^2 + n^2}}}{\sqrt{m^2 + n^2}} \left(x^2 + 1/\left(m^2 + n^2\right) - ix/\sqrt{m^2 + n^2} \right),\tag{31}$$

где $x = k_0 P$ - размерный параметр решетки. Решеточные суммы (31) понимаются как предел, в котором потери в окружающем мета-поверхность пространстве стремятся к нулю, $k_0 = k_0 + i\delta$, $x = k_0 P + i\delta P, \delta \to 0$.

Для эффективного вычисления решеточной суммы (31) разделим ее на две части: одну с n = 0 и другую с $n \neq 0$ (см. рис. 7).



Рисунок 7 – Разбиение решеточной суммы на часть сn=0 (красные кружочки) и все остальное с $n\neq 0$ (черные кружочки)

В результате такого разбиения получим

$$\tilde{\aleph} = \frac{1}{2} \sum_{m \neq 0} \frac{e^{ix\sqrt{m^2}}}{\sqrt{m^2}} \left(x^2 + 1/(m^2) - ix/\sqrt{m^2} \right) + \frac{1}{2} \sum_{n \neq 0} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{ix\sqrt{m^2 + n^2}}}{\sqrt{m^2 + n^2}} \left(x^2 + 1/(m^2 + n^2) - ix/\sqrt{m^2 + n^2} \right) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{ixm}}{m} \left(x^2 + 1/m^2 - ix/m \right) + \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{ix\sqrt{m^2 + n^2}}}{\sqrt{m^2 + n^2}} \left(x^2 + 1/(m^2 + n^2) - ix/\sqrt{m^2 + n^2} \right) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{ixm}}{m} \left(x^2 + 1/m^2 - ix/m \right) + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{ixm}}{m} \left(x^2 - \frac{1}{n} \frac{\partial}{\partial n} \right) \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{ix\sqrt{m^2 + n^2}}}{\sqrt{m^2 + n^2}}.$$
(32)

Решеточные суммы с n = 0 выражаются в явном виде через полилогарифмическую функцию $Li_n(e^{ix})$. Для эффективного вычисления решеточных сумм с $n \neq 0$ целесообразно использовать преобразование (см. [25, стр. 489])

r

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{e^{ix\tilde{R}_{mn}}}{\tilde{R}_{mn}} = \left(i\pi H_0^{(1)}\left(x\,|n|\right) + 4\sum_{m=1}^{\infty} K_0\left(|n|\sqrt{(2\pi m)^2 - x^2}\right)\right).$$
(33)

Из (33) видно, что эта сумма убывает как $1/\sqrt{n}$ при стремлении n к бесконечности, что и приводит к конечности всех решеточных сумм. В результате решеточные суммы можно представить в виде:

$$\tilde{\aleph} = \aleph_1 + \aleph_2$$

$$\aleph_1 = i\pi x^2 \sum_{n=1}^{\infty} H_0^{(1)}(xn) + i\pi x \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} H_1^{(1)}(xn) +$$

$$4x^2 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} K_0(nx_m) + 4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \sum_{m=1}^{\infty} x_m K_1(nx_m)$$

$$\aleph_2 = x^2 Li_1(e^{ix}) - ix Li_2(e^{ix}) + Li_3(e^{ix}),$$
(34)

где $x = k_0 P$ - размерный параметр решетки, а $x_m = \sqrt{(2\pi m)^2 - x^2}$. Все суммы в (34) сходятся, наиболее проблемный член - это сумма $\sum_{n=1}^{\infty} H_0^{(1)}(xn)$. Учитывая, что асимптотика $H_0^{(1)}(z)$ при больших аргументах имеет вид

$$H_0^{(1)}(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^{i(z-\pi/4)},$$

можно показать, что и эта сумма сходится. Рис. 8 также показывает, что эта сумма сходится, хотя и медленно.



Рисунок 8 – Сходимость суммы $\sum_{n=1}^{\infty} H_0^{(1)}(xn)$ в зависимости от числа удержанных членов при $x = k_0 P = 1.75$. Красные точки- действительная часть суммы, синие точки - мнимая часть.

График зависимости $\tilde{\aleph} = \aleph_1 + \aleph_2$ от $x = k_0 P$ показан на рис. 9.

Из рис. 9 видно, что мнимая часть решеточной суммы $\tilde{\aleph}$ обращается в 0 в квазистатическом режиме ($x=k_0P=0$), где

$$\tilde{\aleph}(0) = \zeta(3) + \pi^2/3 + 8\pi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \sum_{m=1}^{\infty} mK_1(2\pi mn) \approx 4.51681,$$
(35)

а также в случа
е $x=k_0 P=3.07$

$$\tilde{\aleph}(3.07) = -15.98.$$
 (36)



Рисунок 9 – График зависимости решеточной суммы $\tilde{\aleph} = \aleph_1 + \aleph_2$ от размерного параметра решетки $k_0 P$. Красная кривая – действительная часть $\tilde{\aleph}$, синяя кривая- мнимая часть $\tilde{\aleph}$

В РТ симметричном случае мета-молеку
л $\varepsilon_1''=-\varepsilon_2''=\varepsilon''$ и в случае действительной решеточной суммы
 $\tilde\aleph$ дисперсионные кривые снова имеют вид окружностей

$$\left(\varepsilon' - \varepsilon'_{EP}\right)^2 + \varepsilon''^2 = \varepsilon''_{EP}^2 \tag{37}$$

с центром в точке

$$\varepsilon_{EP}' = -\frac{\beta^2 + 2\xi^6 + \tilde{G}\xi^3 \left(2\beta - \xi^3\right)}{\left(\xi^3 + \beta\right) \left(\left(1 - 2\tilde{G}\right)\xi^3 - \beta\right)}$$
(38)

и с радиусом

$$\varepsilon_{EP}^{\prime\prime} = \frac{3\xi^3 \left(\beta + \tilde{G}\xi^3\right)}{\left(\xi^3 + \beta\right) \left(\left(1 - 2\tilde{G}\right)\xi^3 - \beta\right)},\tag{39}$$

которые уже зависят и от решеточных сумм $\tilde{G} = \psi \tilde{\aleph}(x) = \left(\frac{R_0}{P}\right)^3 \tilde{\aleph}(x)$. Если условие РТ симметрии не выполняется, но решеточная сумма остается действительной, то

$$\varepsilon' = \varepsilon'_{EP}, \varepsilon''_1 \times \varepsilon''_2 = -\varepsilon''^2_{EP}.$$
(40)

Если же решеточная сумма принимает комплексные значения $\tilde{G} = \tilde{G}' + i\tilde{G}''$ (это, как правило, так и есть), то дисперсионные кривые имеют всего две ветви, симметричные относительно оси $\varepsilon_1'' = \varepsilon_2''$ и начинающиеся из точки

$$\varepsilon_1'' = \varepsilon_2'' = 0; \varepsilon' = \frac{\beta - 2\xi^3}{\beta + \xi^3} \tag{41}$$

или из точки

$$\varepsilon_1'' = \varepsilon_2'' = -\frac{6G''\xi^6}{4\tilde{G}''^2\xi^6 + (\beta - \xi^3 + 2\tilde{G}'\xi^3)^2};$$

$$\varepsilon' = \frac{\left(\beta - \xi^3 + 2\tilde{G}'\xi^3\right)\left(\beta + 2\xi^3 + 2\tilde{G}'\xi^3\right) + 4\tilde{G}''^2\xi^6}{4\tilde{G}''^2\xi^6 + (\beta - \xi^3 + 2\tilde{G}'\xi^3)^2}.$$
(42)

Законы дисперсии в квазистатическом случае $k_0P = 0$ и в случае решетки с размерными параметрами $k_0P = 0.58, k_0P = 1.57, k_0P = 2.5$ и $k_0P = 3.07$ показаны на рис. 10, 11.

Из рис. 10, 11 видно, что исключительная точка появляется не только для одиночной метамолекулы и в квазистатическом режиме, но также и в случае $k_0P = 3.07$, то есть в случае достаточно редкой решетки, когда нет потерь на излучение.



Рисунок 10 – Закон дисперсии диэлектрических проницаемостей для изолированного димера $k_0P = \infty$ (красный цвет), для решетки в квазистатическом режиме $k_0P = 0$ (синий цвет) и для решетки в режиме с запаздыванием $k_0P = 0.58$ (черный), $k_0P = 1.57$ (сиреневый), $k_0P = 2.5$ (желтый), $k_0P = 3.07$ (зеленый) (продольная ориентация поля). Черные точки обозначают исключительные (exceptional) точки, в которых происходит смена режима собственных колебаний. Для наглядности показаны различные проекции трехмерных кривых



Рисунок 11 – Закон дисперсии диэлектрических проницаемостей для изолированного димера $k_0P = \infty$ (красный цвет), для решетки в квазистатическом режиме $k_0P = 0$ (синий цвет) и для решетки в режиме с запаздыванием $k_0P = 0.58$ (черный), $k_0P = 1.57$ (сиреневый), $k_0P = 2.5$ (желтый), $k_0P = 3.07$ (зеленый) (поперечная ориентация поля). Черные точки обозначают исключительные (exceptional) точки, в которых происходит смена режима собственных колебаний. Для наглядности показаны различные проекции трехмерных кривых

Отражение и прохождение света при нормальном падении света на активную метаповерхность

Рассмотрим сначала случай, когда поляризация света направлена вдоль оси z, то есть вдоль оси мета-молекулы:

$$\mathbf{E}_{in} = (0,0,1)E_0 e^{-ik_0 x}.$$
(43)

В этом случае падающий поток энергии равен

$$S_{in,x} = \frac{c}{8\pi} E_0^2,$$
(44)

а каждая мета-молекула из-за симметрии решетки согласно (27) приобретает один и тот же дипольный момент:

$$p_z = \alpha_{zz}^{eff} E_0. \tag{45}$$

Вектор Герца поля, излучаемого решеткой таких диполей, имеет вид

$$\Pi_z = p_z \sum_{m,n} \frac{\exp\left(ik_0 \left|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{mn}\right|\right)}{\left|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{mn}\right|}.$$
(46)

Для нахождения поля от решетки диполей воспользуемся тождеством Вейля [26, с. 65 - 75]:

$$\frac{\exp(ik_0r)}{r} = \frac{i}{2\pi} \iint dk_y dk_z \frac{\exp(ik_z z + ik_y y + ik_x |x|)}{k_x}$$

$$k_x = \sqrt{k_0^2 - k_z^2 - k_y^2}; \operatorname{Re}k_x > 0; \operatorname{Im}k_x > 0$$
(47)

и формулой суммирования Пуассона [27, с. 170, (36)]

$$\sum_{m} \exp\left(ik_z Pm\right) = 2\pi \sum_{m} \delta\left(k_z P - 2\pi m\right).$$
(48)

В результате вместо (46) получим

$$\Pi_{z} = \frac{ip_{z}2\pi}{P^{2}} \sum_{m.n} \frac{\exp(ik_{z,n}x + ik_{y,m}y + ik_{x,mn}|x|)}{k_{x,mn}}$$

$$k_{x,mn} = \sqrt{k_{0}^{2} - k_{y,m}^{2} - k_{z,n}^{2}}, k_{y,m} = \frac{2\pi m}{P}, k_{z,n} = \frac{2\pi n}{P}.$$
(49)

При $k_0 P < 2\pi$ (это соответствует режиму метаматериалов, а не режиму дифракционной решетки) все члены с $m, n \neq 0$ экспоненциально затухают при удалении от метаповерхности (эванесцентные волны), и дальнее поле описывается только одним членом с m, n = 0:

$$\Pi_{z} = p_{z} \sum_{m,n} \frac{\exp\left(ik_{0} \left|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{mn}\right|\right)}{\left|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{mn}\right|} = \frac{ip_{z}2\pi}{P^{2}} \frac{\exp\left(ik_{0} \left|x\right|\right)}{k_{0}}.$$
(50)

Соответственно, поле, излучаемое мета-молекулами, имеет вид:

$$E_z = k_0^2 \Pi_z = \frac{i \alpha_{zz}^{eff} E_0 k_0 2\pi}{P^2} \exp\left(ik_0 |x|\right).$$
(51)

Для отраженного и проходящего потоков энергии и коэффициентов отражения и прохождения соответственно имеем:

$$S_{\mathrm{R},x} = \frac{c\pi}{2P^4} \left| \alpha_{zz}^{eff} \right|^2 E_0^2 k_0^2$$

$$S_{T,x} = \frac{cE_0^2}{8\pi} \left| 1 + \frac{2i\pi k_0 \alpha_{zz}^{eff}}{P^2} \right|^2,$$

$$R = \frac{S_{R,x}}{S_{in,x}} = \frac{4\pi^2 k_0^2}{P^4} \left| \alpha_z^{eff} \right|^2$$

$$T = \frac{S_{T,x}}{S_{in,x}} = \left| 1 + \frac{2i\pi k_0 \alpha_z^{eff}}{P^2} \right|^2.$$
(52)
(52)
(52)

Для поперечной поляризации имеем аналогичные выражения, в которых надо заменить поляризуемости $\alpha_{zz}^{eff} \rightarrow \alpha_{yy}^{eff}$.

Выражения (53) имеют полюс при выполнении решения дисперсионного уравнения (см рис. 10, 11). С физической точки зрения это означает возникновение генерации, что не очень интересно применительно к управлению входящими пучками света.

С практической точки зрения более интересным представляется нахождение условий, при которых малое изменение накачки, то есть мнимой части диэлектрической проницаемости активного мета-атома, приводит к существенному изменению коэффициентов отражения и преломления.

Для демонстрации такой возможности на рис. 12 показаны зависимости коэффициентов отражения и прохождения в зависимости от мнимой части диэлектрической проницаемости активного мета-атома и периода решетки.



Рисунок 12 – Зависимость коэффициента отражения R (красная кривая) и прохождения T (синяя кривая) света через активную метаповерхность от мнимой части диэлектрической проницаемости активного мета-атома ε''_{Gain} и от периода P. Нормальное падение света. У пассивного мета-атома $\varepsilon'' = 0.3$. Поляризация поперек оси мета-молекулы a) $k_0P = 0.1$, $\varepsilon' = -2.02605$, b) $k_0P = 0.58$, $\varepsilon' = -2.02605$, c) $k_0P = 1.268$, $\varepsilon' = -2.02605$, d) $k_0P = 1.75$, $\varepsilon' = -1.97$

Из этого рисунка видно, что при маленьком периоде решетки $(k_0P = 0.1)$ при изменении мнимой части показателя преломления активной частицы всего на 0.005 полное отражение сменяется на полное пропускание, что подтверждает перспективность предлагаемого подхода. При увеличении периода зависимость становится менее острой, но, тем не менее, хорошо выраженной.

Заключение

Таким образом, в настоящей работе предложен и теоретически обоснован новый подход к управлению плазмонными метаповерхностями с помощью управления потерями в мета-атомах.

В данной работе для получения простых аналитических результатов был рассмотрен случай мета-атомов в виде сферических частиц одинакового радиуса с одинаковой действительной частью проницаемости. Обобщение на менее симметричный случай можно провести в полной аналогии с подходом, изложенным в работе, а возникающие при этом дополнительные управляющие параметры позволят провести дополнительную оптимизацию процесса управления отражением и прохождением света через метаповерхность.

Можно также более точно описать радиационные потери изолированной мета-молекулы [28, 29],

но эту малую поправку целесообразно учитывать только при подготовке конкретного эксперимента.

Финансирование работы

Автор выражает благодарность Российскому Научному Фонду (грант № 23-42-00049) за финансовую поддержку данной работы.

Благодарности

Автор выражает благодарность А. П. Виноградову за полезные дискуссии, которые способствовали улучшению данной работы.

Список литературы

- Ремнев М.А. Метаповерхности: новый взгляд на уравнения Максвелла и новые методы управления светом / М.А. Ремнев, В.В. Климов // УФН. -2018. - Т.188. - С.169 – 205.
- [2] Klimov V.V. Manipulation of polarization and spatial properties of light beams with chiral metafilms / V.V. Klimov [и др.] // Optics Express. - 2016. - Т.24. - С. 6172.
- [3] Klimov V.V. Fano resonances in a photonic crystal covered with a perforated gold film and its application to bio-sensing / V.V. Klimov [и др.] // J. Phys. D: Appl. Phys. 2017. T.50. C.285101.
- [4] Rodionov S.A. Refractive index sensor based on all-dielectric gradient metasurface / S. A. Rodionov, M. A. Remnev, V. V. Klimov// Sensing and Bio-Sensing Research. 2019. T. 22. C.100263.
- [5] Liang Y. Coupling of nanoantennas in loss-gain environment for application in active tunable metasurfaces / Y. Liang // Phys. Rev. B. - 2021. - T. 103. - C.045419.
- [6] Ota Y. Active topological photonics / Y. Ota [и др.] // Nanophotonics. 2020. Т.9. № 3. С. 547-567.
- [7] Kang L. Recent Progress in Active Optical Metasurfaces / L. Kang, R. P. Jenkins, D. H. Werner // Advanced Optical Materials. - 2019. - T. 7. - C. 1801813.
- [8] Active tuning of all-dielectric metasurfaces / J.Sautter [и др.] //ACS nano.-2015. Т.9. № 4. С. 4308 4315.
- [9] Ultrafast active plasmonics / К. F., MacDonald [и др.] // Nature Photonics. 2009. Т.3. №1. С. 55 58.
- [10] Ultrafast all-optical tuning of direct-gap semiconductor metasurfaces/ М. R. Shcherbakov [и др.] // Nature communications. - 2017. - Т. 8. - № 1. - С. 1 - 6.
- [11] Nonlinear anisotropic dielectric metasurfaces for ultrafast nanophotonics /G. Della Valle [и др.]// ACS Photonics. 2017. T. 4. № 9. C. 2129-2136.
- [12] Shaltout A. M. Spatiotemporal light control with active metasurfaces /A. M. Shaltout, V.M. Shalaev, M. L. Brongersma // Science. 2019. T. 364. C 648.
- [13] Li, Aobo, Active Metasurfaces and Their Applications 2018 Thesis UC San Diego, https:// escholarship.org/uc/item/90w0c0dk
- [14] Noginov M.A. Demonstration of a spaser-based nanolaser / M.A. Noginov [и др.] // Nature. 2009. Т. 460. № 7259. С. 1110 1112.
- [15] A. E. Siegman, Lasers (University Science Books, 1986).
- [16] Bohren C.F. Absorption and Scattering of Light by Small Particles/ C.F. Bohren and D.R. Huffman//John Wiley & Sons, 2008.- 544 pages.
- [17] Иванов Е.А. Дифракция электромагнитных волн на двух телах. Минск: Наука и техника, 1968.
- [18] Климов В. Наноплазмоника, Физматлит (2-ое исправленное издание) 2010. М.: Наука. 480 с.
- [19] Klimov V.V. Plasmonic Atoms and Plasmonic molecules /V.V. Klimov and D.V. Guzatov // Applied Physics A. - 2007. - T. 89. - C. 305 - 314.
- [20] Klimov V.V. Strongly localized plasmon oscillations in a cluster of two metallic nanospheres /V.V. Klimov and D.V. Guzatov // Phys. Rev. B. 2007. T. 75. C. 024303.
- [21] Klimov V. Entanglement of bright and dark modes in parity-time-symmetric plasmonic nanoantennas / V. Klimov, A. Lupu // Phys. Rev. B. - 2019. - T. 100. - C.245434.

- [22] Зябловский А. А. РТ-симметрия в оптике/ А. А. Зябловский А. А. [и др.] // УФН. 2014. Т. 184. С. 1177–1198.
- [23] Klimov V. V. Loss compensation symmetry in dimers made of gain and lossy plasmonic nanoparticles /V.V. Klimov [и др.] // Laser Physics Letters. - 2018. - Т. 15. - С. 035901.
- [24] Jackson J. D. Classical Electrodynamics- 2nd Edition. Wiley, 1975.
- [25] Collin R. Field Theory of Guided Waves. IEEE Press, Piscataway, NJ, 1990.
- [26] Chew, W. C. Waves and Fields in Inhomogeneous Media. New York: Van Nostrand Reinhold. 1990. -608 pages.
- [27] Владимиров В. С. Уравнения математической физики. М.: Наука. Главная редакция физикоматематической литературы, 1981. — 512 с.
- [28] Meier M. Enhanced fields on large metal particles: dynamic depolarization/ M. Meier, A.Wokaun // Opt. Lett. - 1983. – T. 8. - C. 581.
- [29] Wokaun A. Radiation Damping in Surface-Enhanced Raman Scattering /A. Wokaun, J.P. Gordon, P.F. Liao // Phys. Rev. Lett. - 1982. - T. 48. - C. 957.

CONTROL OF LIGHT REFLECTION AND TRANSMISSION USING AN ACTIVE PLASMON METASURFACE

Klimov V.V. *1

¹ P.N. Lebedev Physical Institute, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

* klimov256@gmail.com

Abstract

A new approach to the creation of meta-surfaces based on a combination of passive and active meta-atoms is proposed. The optical properties of such meta-surfaces have been studied. It is shown that with a certain choice of meta-surface parameters and changing the pump power, effective switching between complete transmission and total reflection of light is possible.

Key words: active meta-surfaces, meta-atoms, plasmonics, PT symmetry, exceptional points

ВЛИЯНИЕ БЛИЗОСТИ КОРОТКОЗАМЫКАТЕЛЯ К ИССЛЕДУЕМОМУ ОБРАЗЦУ НА ИЗМЕРЕНИЕ МАТЕРИАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ В КВАЗИ-ТЕМ ПРИБЛИЖЕНИИ В ПОЛОСКОВОЙ ЛИНИИ

Иванов П.А. * ¹, Петров Д.А.¹, Розанов К.Н.¹

¹ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук, Москва, Россия

> Статья поступила в редакцию 13.09.2023 Одобрена после рецензирования 19.09.2023 Принята к публикации 02.10.2023

Аннотация

Численно и экспериментально исследовано влияние близости расположения образца к короткозамыкателю на результат измерения магнитной и диэлектрической проницаемостей в однопортовой полосковой измерительной ячейке в сравнении с измерениями в двухпортовой полосковой ячейке. Методом Монте-Карло и численным расчетом методом конечных элементов произведено сравнение погрешности разных методов измерения. Показано, что метод измерения на основе закороченной однопортовой полосковой ячейки способен обеспечить широкополосные измерения с высокой точностью только магнитной проницаемости. Измерение же диэлектрической проницаемости с высокой точностью возможно только в узком диапазоне частот. Двухпортовая линия, с другой стороны, позволяет проводить широкополосные измерения с высокой точностью обоих материальных параметров.

Ключевые слова: полосковая линия передачи, СВЧ измерения, измерение магнитной проницаемости, измерение диэлектрической проницаемости, квази-ТЕМ приближение

EDN AQITKT

doi: 10.24412/2949-0553-2023-46-20-29

Введение

В настоящее время наиболее популярными методами широкополосных измерений диэлектрических и магнитных свойств материалов являются коаксиальный метод и квазиоптический метод [1]. Однако эти методы не являются универсальными. Существенным ограничением коаксиального метода является необходимость изготовления образца специальной формы и высокая чувствительность точности измерения диэлектрической проницаемости к любым воздушным зазорам. Использование квазиоптического метода требует больших по размеру образцов для низкочастотных измерений.

Эти ограничения можно обойти использованием полосковых линий передачи, где небольшой образец частично заполняет поперечное сечение полосковой измерительной ячейки. Стандартным подходом полоскового метода является использование одномодового квази-TEM приближения, при котором отличием распространяющейся внутри измерительной ячейки электромагнитной волны от TEM-волны пренебрегают [2–10]. Существуют также методы, которые учитывают гибридную природу распространяющихся мод в полосковой линии и выходят за рамки квази-TEM приближения [11–13]. Однако из-за их большой сложности они не получили широкого распространения.

При использовании стандартного квази-TEM приближения возникает сложность в определении границ применимости этого приближения. Для проведения достоверных измерений необходимо знать, как влияет степень отклонения распространяющейся в измерительной ячейке электромагнитной волны от TEM-моды и при каких условиях это отклонение становится существенным и доминирующим источником погрешности измерения. Дополнительная сложность возникает по причине того, что

^{*}Автор, ответственный за переписку: Павел Алексеевич Иванов, p.ivanov.a@mail.ru

граница применимости квази-TEM приближения зависит не только от конфигурации, размера и геометрии самой измерительной ячейки, но и от размера и материала образца [6]. Поэтому оценка границы применимости квази-TEM приближения только частотой возникновения высших мод в пустой измерительной ячейке является недостаточной.

Распространены как однопортовые [2–7], так и двухпортовые [8–10] методы измерения на основе полосковых линий передачи. Методы на основе однопортовой короткозамкнутой полосковой ячейки чаще всего применяют для измерения магнитной проницаемости тонких пленочных материалов. В общем случае, получение второго материального параметра (диэлектрической проницаемости) осуществляется применением ряда подходов [2, 14], которые можно разделить на две категории. Первая категория включает подходы, основанные на априорной информации, в которых диэлектрическая проницаемость определяется приближенно на основе известных данных о диэлектрических свойствах всех компонентов измерительной системы, которые не учитываются калибровочными процедурами. Такие подходы имеет низкую точность и предполагают слабую зависимость результата измерения магнитной проницаемости от диэлектрической проницаемости образца. Вторая категория включает подходы, основанные на двух независимых измерениях коэффициента отражения, получаемых путем внесения изменений в измерительную конфигурацию, таких как измерение исследуемого образца в двух разных положениях, измерение образцов разной длины, введение дополнительного образца с известными свойствами или приложение внешнего постоянного магнитного поля для насыщения образца.

Если исследуемые образцы представляют собой композитные материалы, включая метаматериалы, чья толщина существенно больше, чем у обычных пленок, и измерение которых возможно только при частичном заполнении измерительной ячейки, то определение корректного способа измерения таких образцов в одномодовом приближении остается актуальным.

В работе проведено исследование влияния близости расположения образца к короткозамыкателю на измерение магнитной и диэлектрической проницаемостей численными и экспериментальными методами. Показано, что метод измерения на основе закороченной однопортовой полосковой ячейки может обеспечить широкополосные измерения с высокой точностью только магнитной проницаемости. Измерение же диэлектрической проницаемости с высокой точностью возможно только в узком диапазоне частот. Двухпортовая линия, с другой стороны, позволяет проводить широкополосные измерения с высокой точностью обоих материальных параметров.

Методы исследования

В настоящей работе были рассмотрены два типа методов измерения на основе однопортовой закороченной полосковой измерительной ячейки и на основе двухпортовой полосковой ячейки. Их внешний вид представлен на рисунке 1. Обе ячейки имеют одинаковые размеры поперечного сечения, соответствующие характеристическому импедансу 50 Ом. Ячейки имеют следующие размеры: ширина полоскового проводника (полоска) составляет 8,7 мм, толщина полоска – 1 мм, расстояние от полоска до экрана – 2 мм. Связь ячеек с коаксиальным портом векторного анализатора цепей осуществлена через коаксиально-полосковый переход.



Рисунок 1 – Вид однопортовой (слева) и двухпортовой (справа) полосковых ячеек. 1 – корокозамыкатель, 2 – полосок, 3 – порт, 4 – образец. В двухпортовой ячейке после калибровки короткозамыкатель снимается и вместо него устанавливается образец

Учет влияния неоднородностей измерительной ячейки, сосредоточенных в области коаксиальнополоскового перехода, был осуществлен применением калибровки по смещаемому эталону - короткозамыкателю [15], в качестве которого используется подвижная металлическая стенка. При этом в двухпортовой ячейке короткозамыкатель после калибровки снимается, а вместо него располагается образец.

В эксперименте измерения коэффициентов отражения и прохождения электромагнитной волны от исследуемых образцов внутри измерительных полосковых ячеек проведены при помощи векторного анализатора цепей (ВАЦ).

Результаты эксперимента сравниваются с численным моделированием методом конечных элементов. При моделировании измерительные полосковые ячейки были представлены в виде участков экранированных полосковых линий передачи с поперечными размерами, аналогичными ячейкам, используемым в эксперименте. Питание линии осуществлялось плоскими портами на границах участка линии, что позволило устранить влияние коаксиально-полоскового перехода. Такая модель позволяет получить высокую точность при использовании меньших вычислительных ресурсов. Сравнение результатов расчета в рассматриваемом частотном диапазоне полной модели открытой полосковой ячейки, питание которой осуществляется коаксиальными портами через коаксиально-полосковый переход, и более простой модели участка экранированной полосковой линии передачи с плоскими портами показало их пренебрежимо малое различие.

Для получения из результатов измерений магнитной $\mu = \mu' - i\mu''$ и диэлектрической $\varepsilon = \varepsilon' - i\varepsilon''$ проницаемостей необходимо знать два независимых S-параметра образца. В случае двухпортовой ячейки независимыми S-параметрами являются коэффициенты отражения и прохождения, и расчет μ и ε выполняется с использованием метода Николсона–Росса–Уира [16]. В однопортовой ячейке в качестве двух независимых параметров используются коэффициенты отражения при двух разных смещениях $d_{\rm B}$ образца относительно короткозамыкателя. Для повышения точности измерений образец в измерительных ячейках располагался вплотную к центральному полоску при помощи подкладки из пенопласта. Повышение точности достигается за счет того, что образец располагается в области наибольшей концентрации электромагнитного поля.

Входной импеданс $Z_{\rm BX}$ участка линии, заполненного образцом, расположенным со смещением от короткозамыкателя на расстояние $d_{\rm B}$, будет иметь вид:

$$Z_{\rm BX} = \sqrt{\frac{\mu_{\rm s}_{\rm de}_{\rm b}}{\varepsilon_{\rm s}_{\rm de}_{\rm d}}} \cdot \frac{th(2\pi i d_{\rm B}/\lambda) + \sqrt{\mu_{\rm s}_{\rm de}_{\rm d}/\varepsilon_{\rm s}_{\rm s}_{\rm de}_{\rm d}} th(2\pi i d\sqrt{\varepsilon_{\rm s}_{\rm s}_{\rm de}_{\rm d}}\mu_{\rm s}_{\rm de}_{\rm d}/\lambda)}{\sqrt{\mu_{\rm s}_{\rm de}_{\rm d}/\varepsilon_{\rm s}_{\rm s}_{\rm de}_{\rm d}} + th(2\pi i d_{\rm B}/\lambda)th(2\pi i d\sqrt{\varepsilon_{\rm s}_{\rm s}_{\rm de}_{\rm d}}\mu_{\rm s}_{\rm de}_{\rm d}/\lambda)},\tag{1}$$

где d – длина образца вдоль волнового вектора электромагнитной волны, $d_{\rm B}$ – расстояние от образца до короткозамыкателя, λ – длина электромагнитной волны. Эффективные магнитная $\mu_{\rm эфф}$ и диэлектрическая $\varepsilon_{\rm эф\phi}$ проницаемости характеризуют неоднородно заполненный участок линии, состоящий из материала образца и незаполненного воздушного пространства. Связь между коэффициентом отражения и входным импедансом участка измерительной ячейки с образцом $Z_{\rm вx}$, выражается в следующем виде:

$$R = \frac{Z_{\rm BX} - 1}{Z_{\rm BX} + 1}.$$
 (2)

Для учета неполного заполнения поперечного сечения линии образцом и установления связи между фактическими материальными параметрами образца (μ , ε) и эффективными параметрами участка линии ($\mu_{\rm эф\phi}$, $\varepsilon_{\rm эф\phi}$), был использован вариационный метод [17, 18]. Вариационный метод входит в группу квазистатических методов и позволяет выразить эффективную магнитную $\mu_{\rm эф\phi}$ и диэлектрическую $\varepsilon_{\rm эф\phi}$ проницаемости следующим образом:

$$\mu_{\mathbf{\vartheta}\Phi\Phi} = \frac{L}{L_0}, \qquad \varepsilon_{\mathbf{\vartheta}\Phi\Phi} = \frac{C}{C_0},\tag{3}$$

где L и C – удельная индуктивность и емкость заполненной линии, а L_0 и C_0 соответствуют пустой линии без образца. Значения L, L_0 и C, C_0 определялись при помощи выражения функции Грина для конкретной конфигурации линии. Значение фактической магнитной и диэлектрической проницаемостей вычисляется при помощи процедуры оптимизации.

Двумя основными источниками погрешности измерения материальных параметров полосковым методом при частичном заполнении являются погрешность измерения S-параметров образца и влияние продольных компонент электромагнитного поля в области расположения образца, наличие которых не учитывается при расчете магнитной и диэлектрической проницаемостей. Для оценки влияния погрешности измерения S-параметров был применен метод Монте-Карло. В качестве случайной величины была взята погрешность определения модуля S-параметров, максимум которого был ограничен значением - 60 дБ, что соответствует точности измерения ВАЦ. Максимальная погрешность измерения фазы принята равной 0,1 град. За результирующую погрешность материальных параметров принята максимальная погрешность из сформованного набора данных из 1000 случайных измерений, полученного использованием генератора псевдослучайных чисел.

Для оценки величины продольных компонент в области расположения были введены два численных интегральных параметра, характеризующих эффективную долю продольной компоненты электрического поля $(A_{\rm E})$ и магнитного поля $(A_{\rm H})$:

$$A_E = \frac{\int_{V_s} |E_l| dV}{\int_{V_s} \sqrt{|E_t|^2 + |E_l|^2} dV} \cdot 100\%, \qquad A_H = \frac{\int_{V_s} |H_l| dV}{\int_{V_s} \sqrt{|H_t|^2 + |H_l|^2} dV} \cdot 100\%, \tag{4}$$

где $|E_l|$, $|H_l|$ и $|E_t|$, $|H_t|$ – амплитуды продольной и поперечной составляющих электрического и магнитного полей, а V_s – объем образца.

Результаты и их обсуждение

Для исследования был использован образец композитного материала размером 70x10x0,4 мм. В качестве контрольных данных выступали результаты измерений в коаксиальной ячейке методом Николсона–Росса–Уира, которые считаются достаточно точными. Частотные зависимости диэлектрической и магнитной проницаемостей исследуемого образца композитного материала, измеренные в коаксиальной ячейке, представлены на рисунке 2.



Рисунок 2 – Частотные зависимости комплексных диэлектрической и магнитной проницаемостей исследуемого образца композитного материала, измеренные в коаксиальной ячейке. Синие кривые относятся к диэлектрической проницаемости, значения которой отложены на левой вертикальной оси. Красные кривые относятся к магнитной проницаемости, значения которой отложены на правой вертикальной оси

На рисунке 3 представлены экспериментальные результаты измерения магнитной и диэлектрической проницаемости исследуемого образца композитного материала в однопортовой и двухпортовой полосковой ячейках в виде погрешности относительно контрольных данных коаксиального измерения $(\left|\frac{\Delta\varepsilon}{\varepsilon}\right|, \left|\frac{\Delta\mu}{\mu}\right|).$

Для исключения взаимного влияния погрешностей измерения материальных параметров при использовании однопортовой ячейки была проведена отдельная оценка погрешности для каждого параметра. Для этого из коэффициента отражения образца, находящегося на определенном расстоянии от короткозамыкателя $d_{\rm B}$, по формулам (1) и (2) были вычислены диэлектрическая и магнитная проницаемости по отдельности путем подстановки точного значения второго материального параметра, известного из контрольных данных. Такой подход позволяет определить минимальную погрешность измерения каждого материального параметра для каждого положения образца в измерительной ячейке. Полученные погрешность позволяют судить о том, какие два независимых измерения обеспечивают наибольшую точность измерения. Для однопортовой ячейки представлены результаты измерения в трех положения образца: вплотную к K3 ($d_{\rm B} = 0$ мм), на расстоянии 5 мм от K3 ($d_{\rm B} = 5$ мм) и на расстоянии 10 мм от K3 ($d_{\rm B} = 10$ мм).

Результаты численного моделирования методом конечных элементов процесса измерения магнитной и диэлектрической проницаемости исследуемого образца композитного материала в однопортовой



Рисунок 3 – Частотные зависимости погрешности измерения комплексных диэлектрической и магнитной проницаемостей исследуемого образца композитного материала в однопортовой и двухпортовой полосковых ячейках, полученные в эксперименте

и двухпортовой полосковой ячейках представлены на рисунке 4. В численных расчетах за фактические значения материальных параметров образца приняты результаты коаксиальных измерений.



Рисунок 4 – Частотные зависимости погрешности измерения комплексных диэлектрической и магнитной проницаемостей исследуемого образца композитного материала в однопортовой и двухпортовой полосковых ячейках, полученные при помощи численного моделирования методом конечных элементов

Результаты эксперимента и численного моделирования имеют схожие уровни погрешностей измерения, это позволило проводить дальнейший анализ электромагнитных волн, распространяющихся внутри измерительной ячейки, численными методами. Некоторое различие между экспериментом и моделированием во многом связано с погрешностью определения геометрических размеров измерительной ячейки и образца, а также неточностью позиционирования образца внутри ячейки.

Для оценки степени влияния продольных компонент электромагнитной волны на результаты измерений был выполнен расчет параметров A_H и A_E для исследуемого образца композитного материала

(рисунок 5).

Из рисунка 5 видно, что максимальное значение эффективной доли продольных компонент электрического поля наблюдается при расположении образца вплотную к КЗ. При удалении образца от КЗ эффективная доля продольных компонент электрического поля снижается и достигает минимума в предельном случае двухпортовой ячейки, где значение меньше максимума на порядок. Эффективная доля продольных компонент магнитного поля в низкочастотной области во всех случаях имеет одинаково низкое значение. При переходе к высокочастотной области наблюдается небольшое увеличение величины A_H с увеличением смещения образца от КЗ, что выражается в уменьшении верхней частоты измерительного диапазона с низким уровнем продольных компонент магнитного поля. Увеличение эффективной доли продольных компонент в высокочастотной области объясняется повышением вклада высших мод.



Рисунок 5 – Частотная зависимость параметров A_H и A_E для исследуемого образца композитного материала при расположении в однопортовой ячейке при разном смещении от КЗ и в двухпортовой ячейке

Стоит отметить, что параметры A_E и A_H зависят от материала образца и его размеров [19]. При уменьшении толщины образца или уменьшении его диэлектрической или магнитной проницаемости значения параметров A_E и A_H снижаются.

Для разделения вклада продольных компонент электромагнитных полей и погрешности измерения S-параметров в общую погрешность измерения материальных параметров был проведен анализ с использованием метода Монте-Карло. На рисунке 6 представлены результаты расчета погрешности определения материальных параметров исследуемого образца, полученные методом Монте-Карло.



Рисунок 6 – Погрешность измерения комплексных диэлектрической и магнитной проницаемостей тестового композита, рассчитанная методом Монте-Карло

Из рисунка 6 видно, что метод измерения в однопортовой полосковой ячейке имеет очень высокую

погрешность определения диэлектрической проницаемости на низких частотах. Эта погрешность зависит от величины сдвига образца от КЗ. Длина используемой в работе однопортовой ячейки не позволяет проводить измерения с существенно большим сдвигом для достижения большей точности на низких частотах. Существует также ограничение, связанное с необходимостью соблюдения расстояния от коаксиально-полоскового перехода при размещении образца, что нужно для устранения влияния затухающих высших мод от перехода.

Так как вблизи K3 расположен минимум электрического поля и максимум магнитного поля, то для получения высокой точности измерения диэлектрической проницаемости образец должен располагаться на расстоянии от K3, близком к $\lambda(2n-1)/4$ при $n=1,2,\ldots$, что соответствует положению максимумов электрического поля. Максимумы магнитного поля расположены на $\lambda(n-1)/2$ при $n=1,2,\ldots$, поэтому погрешность определения магнитной проницаемости в однопортовой ячейке на низких частотах при расположении образца около K3 минимальна.

Таким образом, закороченная ячейка может обеспечить широкополосные точные измерения только магнитной проницаемости по причине того, что в ней фиксировано только положение максимума магнитного поля на короткозамыкателе. Положение же максимумов электрического поля зависит от частоты, поэтому измерение диэлектрической проницаемости с достаточной точностью возможно только в узкой полосе частот.

Двухпортовая ячейка не имеет локализованных максимумов электромагнитной волны, положение которых зависит от частоты, поэтому при любом положении образца внутри ячейки она позволяет проводить измерения с высокой точностью как магнитной проницаемости, так и диэлектрической проницаемости.

Полученные результаты позволяют сделать несколько выводов. На низких частотах погрешность измерения материальных параметров в основном определяется погрешностью измерения S-параметров. С увеличением частоты уменьшается вклад от погрешности S-параметров и увеличивается вклад продольных компонент электромагнитного поля в области образца.

Расположение образца близко к короткозамыкателю приводит к возникновению большой продольной компоненты электрического поля в области расположения образца, которая уменьшается при удалении образца и достигает минимума в двухпортовой линии (рисунок 5). Сопоставляя результаты, представленные на рисунках 4, 5 и 6, можно сделать вывод, что погрешность от продольных компонент сильнее влияет на погрешность определения мнимой части материальных параметров, чем на погрешность измерения действительной части.



Рисунок 7 – Погрешность определения магнитной проницаемости исследуемого образца композитного материала в методе измерения, где используется только один коэффициент отражения образца, расположенного вплотную к K3. Расчет произведен методом Монте-Карло

Если измерение диэлектрической проницаемости не требуется, а интересует только магнитная проницаемость, то закороченная однопортовая ячейка с прижатым вплотную к K3 образцом может обеспечить большую точность измерения магнитной проницаемости по сравнению с двухпортовой ячейкой. Это справедливо, если эффективная диэлектрическая проницаемость образца $\varepsilon_{\rm эфф}$ имеет значение, близкое к единице, что выполняется в случаях очень тонких образцов по сравнению с зазором в ячейке между полоском и экраном. Это может быть также справедливо, если диэлектрическая проницаемость образца была определена другими методами, и возможно использовать ее значение при измерении магнитной проницаемости в однопортовой полосковой ячейке.

Методом Монте-Карло была рассчитана погрешность определения магнитной проницаемости исследуемого образца композитного материала в методе измерения, где используется только один

коэффициент отражения образца, расположенного вплотную к КЗ (рисунок 7). Проведено сравнение результата подстановки диэлектрической проницаемости, равной единице, и подстановки точного значения диэлектрической проницаемости. Значение действительной части эффективной диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{эф\phi}$ рассматриваемого образца находится в пределах от 1.7 до 1.8 в выбранном частотном диапазоне.

Из рисунка 7 видно, что пренебрежение диэлектрической проницаемостью при измерении рассматриваемого образца композитного материала приводит к резкому повышению погрешности с увеличением частоты. Это подтверждает необходимость точного определения диэлектрической проницаемости образцов, толщина которых сравнима с величиной зазора измерительной ячейки.

Заключение

В работе было исследовано влияние близости короткозамыкателя к исследуемому образцу на результат измерения материальных параметров в полосковой ячейке. Проведено сравнение методов измерения на основе двухпортовой и однопортовой закороченной ячеек. Показано, что влияние на точность измерения диэлектрической проницаемости погрешности измерения S-параметров образца существенно больше в однопортовом методе из-за локализованного минимума электрического поля вблизи короткозамыкателя. Кроме того, при неполном заполнении поперечного сечения измерительной полосковой ячейки исследуемым образцом близость образца к короткозамыкателю существенно увеличивает степень влияния продольных компонент электрического поля, что является дополнительным источником погрешности измерения диэлектрической проницаемости вблизи короткозамыкателя.

На низких частотах доминирующий вклад в результирующую погрешность измерения несет погрешность измерения S-параметров образца как для однопортового, так и для двухпортового методов. С увеличением частоты уменьшается влияние погрешности измерения S-параметров и увеличивается вклад ошибки, связанной с наличием продольных компонент электромагнитного поля в области расположения образца.

Было показано, что метод измерения на основе закороченной однопортовой полосковой ячейки может обеспечить широкополосные измерения с высокой точностью только магнитной проницаемости, диэлектрическая же проницаемость может быть определена с высокой точностью только в узкой полосе частот. Двухпортовая линия, с другой стороны, позволяет проводить широкополосные измерения с высокой точностью обоих материальных параметров.

Если нет необходимости в измерении диэлектрической проницаемости и интерес представляет только магнитная проницаемость, то использование закороченной однопортовой ячейки с прижатым вплотную к КЗ образцом, может обеспечить большую точность измерения магнитной проницаемости по сравнению с двухпортовой ячейкой. Это верно в случае очень тонких образцов по сравнению с зазором в ячейке между полоском и экраном. Также это справедливо, если значение диэлектрической проницаемости образца уже известно из других методов и может быть использовано при измерении магнитной проницаемости в однопортовой полосковой ячейке.

Финансирование

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №21-19-00138, https:// rscf.ru/project/21-19-00138/.

Список литературы

- Kassem H., Vigneras V., Lunet G. Characterization techniques for materials' properties measurement // Microwave and Millimeter Wave Technologies From Photonic Bandgap Devices to Antenna and Applications. – IntechOpen, 2010.
- [2] Sebastian T., Clavijo S. A., Diaz R. E. Improved accuracy thin film permeability extraction for a microstrip permeameter //Journal of Applied Physics. – 2013. – V. 113. – №. 3.
- [3] D Pain, M Ledieu, O Acher. et al. An improved permeameter for thin film measurements up to 6 GHz // J. Appl. Phys. – 1999. – V. 85. – №. 8. – P. 5151-5153.
- [4] Starostenko S. N., Rozanov K. N., Osipov A. V. A broadband method to measure magnetic spectra of thin films //Journal of Applied Physics. – 2008. – V. 103. – №. 7.

- [5] Wu Y., Tang ZX., Xu Y. et al. Measure the complex permeability of ferromagnetic thin films: Comparison shorted microstrip method with microstrip transmission method //Progress in electromagnetics research letters. - 2009. - V. 11. - P. 173-181.
- [6] Lepetit T., Neige J., Adenot-Engelvin AL. et al. Accurate characterization of both thin and thick magnetic films using a shorted microstrip //IEEE Transactions on Magnetics. – 2014. – V. 50. – №. 9. – P. 1-10.
- [7] Yousefi L., Attia H., Ramahi O. M. Broadband experimental characterization of artificial magnetic materials based on a microstrip line method //Progress In Electromagnetics Research. – 2009. – V. 90. – P. 1-13.
- [8] Fessant A., Gieraltowski J., Loaec J. et al. Influence of in-plane anisotropy and eddy currents on the frequency spectra of the complex permeability of amorphous CoZr thin films // IEEE Trans. Magn. – 1993. – V. 29. – №. 1. – P. 82-87.
- [9] Gomez S., Queffelec P., Chevalier A. et al. Asymmetrical stripline based method for retrieving the electromagnetic properties of metamaterials //Journal of Applied Physics. 2013. V. 113. №. 2.
- [10] Quéffélec P., Mallégol S., LeFloc'h M. Automatic measurement of complex tensorial permeability of magnetized materials in a wide microwave frequency range //IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. – 2002. – V. 50. – №. 9. – P. 2128-2134.
- [11] Lezaca J. E., Quéffélec P., Chevalier A. Broadband permeability measurement method for ferrites at any magnetization state: direct problem //International Journal of Microwave and Wireless Technologies. – 2011. – V. 3. – №. 3. – P. 289-294.
- [12] Chevalier A., Cortes J., Lezaca J. et al. Broadband permeability measurement method for ferrites at any magnetization state: Experimental results //Journal of Applied Physics. – 2013. – V. 114. – №. 17.
- [13] Quéffélec P., Gelin P. Influence of higher order modes on the measurements of complex permittivity and permeability of materials using a microstrip discontinuity //IEEE transactions on microwave theory and techniques. – 1996. – V. 44. – №. 6. – P. 816-824.
- [14] Baker-Jarvis J. Transmission/reflection and short-circuit line methods for measuring permittivity and permeability //Nasa Sti/recon Technical Report N. – 1992. – V. 93. – P. 12084.
- [15] Hanson G. W., Grimm J. M., Nyquist D. P. An improved de-embedding technique for the measurement of the complex constitutive parameters of materials using a stripline field applicator //IEEE transactions on instrumentation and measurement. – 1993. – V. 42. – №. 3. – P. 740-745.
- [16] Nicolson A. M., Ross G. F. Measurement of the intrinsic properties of materials by time-domain techniques //IEEE Transactions on instrumentation and measurement. – 1970. – V. 19. – №. 4. – P. 377-382.
- [17] Bhat B., Koul S. K. Unified approach to solve a class of strip and microstrip-like transmission lines //IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. – 1982. – V. 30. – №. 5. – P. 679-686.
- [18] Koul S. K., Bhat B. Propagation parameters of coupled microstrip-like transmission lines for millimeterwave applications //IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. – 1981. – V. 29. – №. 12. – P. 1364-1370.
- [19] Ivanov P., Bobrovskii S., Rozanov K. et al. Using a Single-Mode Approximation to Measure Magnetic Permeability in Strip Transmission Lines //Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. – 2022. – V. 86. – №. 5. – P. 574-578.

INFLUENCE OF PROXIMITY OF THE SHORT-CIRCUITED WALL TO THE SAMPLE UNDER STUDY ON MEASUREMENT OF MATERIAL PARAMETERS IN QUASI-TEM APPROXIMATION IN A STRIPLINE

Ivanov P.A.^{*1}, Petrov D.A.¹, Rozanov K.N.¹

¹ Institute for Theoretical and Applied Electromagnetics of RAS, Moscow, Russia * p.ivanov.a@mail.ru

Abstract

Influence of proximity of the sample to the short-circuit wall in the measurement of permeability and permittivity in a single-port stripline measurement cell has been numerically and experimentally investigated, in comparison to measurements in a dual-port stripline measurement cell. The comparison of the accuracy of different measurement methods was carried out using the Monte Carlo method and numerical finite element analysis. It is demonstrated that the measurement method based on the shorted single-port stripline measurement cell is capable of providing broadband measurements with high accuracy only for permeability. Accurate measurement of dielectric permittivity, on the other hand, is possible only within a narrow frequency range. In contrast, the dual-port line allows for broadband measurements with high accuracy for both material parameters.

Key words: strip transmission lines, microwave measurements, permeability measurement, permittivity measurement, quasi-TEM approximation

ФОРМИРОВАНИЕ ДИАГРАММЫ НАПРАВЛЕННОСТИ ШИРОКОПОЛОСНОЙ АНТЕННЫ ДЛЯ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ЕЕ В КАЧЕСТВЕ ОБЛУЧАТЕЛЯ

Гильмутдинов Р.В. *¹, Меньших Н.Л.¹, Солосин В.С.¹, Фёдоров С.А.¹

¹ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук, Москва, Россия

> Статья поступила в редакцию 15.09.2023 Одобрена после рецензирования 26.09.2023 Принята к публикации 02.10.2023

Аннотация

В данной работе представлены варианты модернизации широкополосной антенны Satimo SH2000 путем изменения формы конькового перехода, применения боковых стенок и установки фазового корректора в виде рассеивающей линзы. Была создана компьютерная модель исходной антенны. Экспериментально подтверждено, что разработанная электродинамическая модель антенны позволяет получить характеристики излучения с достаточной точностью. Методом интегральных уравнений в программном пакете FEKO было исследовано влияние типов модификаций антенны на форму диаграммы направленности. Проведено сравнение полученных в результате модификации антенны диаграмм направленности с соответствующими диаграммами исходной антенны в полосе частот. Рассмотрено три модификации антенны. Использование фазового корректора расширяет диаграмму направленности в Е-плоскости. Установлено, что применение небольших дополнительных стенок в модификации Н-стенки позволяет в Н-плоскости сузить диаграмму направленности. Расширяющийся коньковый переход способствует также расширению диаграммы направленности в Е-плоскости и позволяет уменьшить асимметрию формы диаграммы направленности в главных плоскостях. Показано, что модернизация антенны позволяет создать более стабильную по форме и размерам диаграмму направленности в полосе частот с коэффициентом перекрытия больше двух. Полученная форма диаграммы направленности позволяет рассмотреть модернизированную антенну в качестве облучателя коллиматора.

Ключевые слова: антенна Вивальди, FEKO, облучатель, фазовый корректор, диаграмма направленности

EDN BBLGEU

doi:10.24412/2949-0553-2023-46-30-37

Введение

Важнейшей характеристикой радиофизического измерительного стенда является неравномерность распределения амплитуды и фазы поля в рабочей зоне. Компактные полигоны обеспечивают более высокую точность измерения [1] характеристик рассеяния объектов и параметров излучения антенн в заданной полосе частот по сравнению с другими измерительными стендами. Использование коллимирующего устройства в виде зеркала или линзы позволяет получить во всем рабочем диапазоне частот постоянную по своим размерам область пространства, в которой распространяется квазиплоская волна. Одним из факторов, влияющих на неравномерность распределения поля в рабочей зоне, является диаграмма направленности (ДН) облучателя [2].

Основные требования [2] к облучателям следующие: ширина ДН должна слабо зависеть от частоты, ДН должна иметь почти постоянный уровень в определенном секторе углов и быстро спадать к краям коллиматора.

Наиболее распространенными облучателями коллиматора являются рупорные антенны [1,3]. Данный вид облучателей имеет ряд недостатков, в частности, для них характерно сужение ДН с

^{*}Автор, ответственный за переписку: Гильмутдинов Руслан Валерьевич, psevduch777@gmail.com

ростом частоты. В литературе [1,4] описаны различные способы устранения этих недостатков. Почти постоянная ширина ДН облучателя в полосе частот может быть достигнута за счет использования фланца [5] или гофрированного рупора [6]. Для обеспечения более резкого спада амплитуды поля на краях зеркала коллиматора предложено использовать специальные поглощающие насадки для рупора [7]. Это способствует заметному уменьшению уровней бокового излучения. В качестве облучателя также рассматривался рупор с изломом образующей [8,9]. Данный рупор имеет область с почти одинаковой амплитудой поля в полосе частот 20 % от центральной частоты.

В последнее время особое внимание уделяется применению аддитивных технологий при модернизации характеристик облучателей. С помощью технологии 3D-печати была изготовлена линза с градиентным показателем преломления [10]. Использование такой линзы позволило существенно увеличить излучаемую мощность антенны в главном лепестке. В дальнейшем [11] была исследована возможность интегрирования градиентной диэлектрической вставки непосредственно в облучатель, представляющий собой прямоугольный волновод. Показано, что применение диэлектрической вставки позволяет снизить уровень боковых лепестков.

При измерении различных характеристик рассеяния объектов, таких как эффективная площадь рассеяния (ЭПР), в зависимости от типа стенда важно иметь облучатель с заданной ДН. Например, в конической камере [12] источник излучения устанавливается в вершину расширяющийся части безэховой камеры (БЭК), потому большое значение имеет только ДН в главном лепестке. Особое внимание в последнее время уделяется проблематике использования рупорных антенн, применяемых при проведении измерений в компактных полигонах [9,13], или при исследовании свойств материалов, таких как коэффициент отражения, на бистатическом стенде [14].

Целью настоящей работы является исследование способов модификации широкополосной антенны для получения более стабильной ширины ДН по частоте в главных плоскостях облучателя.

Постановка задачи

В качестве исходной модели облучателя рассматривается антенна с коньковым переходом типа Satimo SH2000. Данная антенна в широкой полосе частот (8-18 ГГц) имеет почти постоянный коэффициент усиления и, следовательно, устойчивую от частоты диаграмму направленности, что позволяет рассмотреть ее в качестве облучателя коллиматорного комплекса. Однако в Е-плоскости диаграмма не полностью удовлетворяет требованиям, предъявляемым к облучателям коллиматора, и нуждается в модификации.

Для расчета ДН антенны и ее модификаций была создана модель антенны с использованием пакета для электродинамического моделирования FEKO. Расчет ДН проводился методом моментов. Использовалась неравномерная сетка с характерным шагом $\lambda/12$.

Для проверки корректности электродинамической модели антенны были проведены численные расчеты и экспериментальные измерения ДН. На рис. 1 представлены рассчитанные и измеренные сечения ДН в главных плоскостях на частоте 16 ГГц. Результаты численного расчета и эксперимента находятся в соответствии друг с другом, кривые не имеют серьезных различий. (Результаты численного расчета и эксперимента отличаются на 0,2 дБ, и это указывает на точность расчетов для выбранной электродинамической модели антенны)



Рисунок 1 – ДН антенны в исходном виде, частота 16 ГГц

На рис. 2 изображены сечения ДН антенны Satimo SH2000 в главных плоскостях для пяти частот. Можно отметить наличие так называемой «полочки» в диапазоне 8 – 12,5 ГГц – сектор углов с

примерно постоянным значением ДН, а также слабое спадание ДН к 30 градусам в Н-плоскости. В Е-плоскости ДН в диапазоне частот 15-18 ГГц имеет резкие спады в секторе углов до 15 градусов. С ростом частоты наблюдается сужение ДН. Можно отметить существенные различия в сечениях ДН в главных плоскостях.



Рисунок 2 – Расчетные ДН антенны в исходном виде

Наличие «полочки» в ДН в полосе частот является преимуществом для облучателя. Однако для облучателя, как правило, требуется примерно одинаковая форма ДН в главных плоскостях. Существенная разница в форме ДН для Е- и Н- плоскостей является серьезным недостатком облучателя и фактором, из-за которого его применение малоэффективно.

Добавляя металлические или диэлектрические элементы в конструкцию антенны, можно существенно менять ее ДН. В данной работе представлены разработанные виды модификаций исследуемой широкополосной антенны, позволяющие изменить ДН в заданной полосе частот.

Значения ДН различных модификаций сравнивались между собой и с результатами расчетов ДН антенны в исходном виде.



Исследование модификаций

Рисунок 3 – Виды модификаций антенны

Для устранения недостатков, указанных выше, предлагается использовать следующие модификации. На рис. 3 изображены виды модификаций антенны. На рис. За показана модификация "Рассеиватель", представляющая собой рассеивающую эллиптическую линзу с радиусами кривизны в Е-плоскости 100 мм, Н-плоскости 250 мм, выполненную из пенопласта с диэлектрической проницаемостью 1,1. Эллиптические линзы [15] активно применяются при модернизации антенно-фидерных устройств. В нашем случае линза вогнутая, с разными радиусами кривизны. Данная модификация призвана расширить ДН антенны в Е-плоскости за счет существенного замедления волны, распространяющейся вдоль Е-стенок антенны. При этом ожидается, что линза начнет оказывать заметное влияние на ДН в высокочастотной части рабочего диапазона, в которой у прототипа происходит заметное сужение диаграммы.

Модификация "H-стенки" (рис. 3b) способствует нивелированию полочки в области низких частот. Боковые металлические вставки [16] увеличивают размер апертуры, тем самым сужая ДН в H-плоскости. В нашем случае высота стенок равна 15 % от высоты антенны. Известно, что обычный рупор имеет равную ширину диаграммы в главных плоскостях при соответствующих соотношениях сторон.

Модификация "Расширитель" позволит устранить негативные последствия модификаций "Рассеиватель" и "Н-стенки", а также уменьшить асимметрию ДН в главных плоскостях. В данной модификации толщина конькового перехода линейно растет от резонатора до апертуры антенны. Утолщение конькового перехода происходит за счет добавления металлических клиновидных вставок (рис. 3с) с углом расширения клина равным 5 градусов.

На рис. 4 изображена ДН антенны Satimo SH2000 и её модификации "Рассеиватель" в главных плоскостях. В Н-плоскости в области низких частот наблюдается переход ДН из "полочки" в воронкообразную форму. Можно отметить уширение ДН в обеих плоскостях и сохранение асимметрии ДН.



Рисунок 4 – Сечения ДН Satimo SH2000 (Сплошная) и модификации "Рассеиватель" (пунктирная)

На рис. 5 изображена ДН антенны Satimo SH2000 и её модификации "Н-стенки" в главных плоскостях. В Н-плоскости наблюдается резкое сужение ДН куполообразной формы в диапазоне 8-12.5 ГГц. В области высоких частот незначительное уширение ДН. В Е-плоскости ДН незначительно сузилась, наблюдается небольшое уменьшение асимметрии.



Рисунок 5 - Сечения ДН Satimo SH2000 (Сплошная) и модификации "Н-стенка" (пунктирная)

На рис. 6 изображена ДН антенны Satimo SH2000 и её модификации "Расширитель" в главных плоскостях. В Н-плоскости наблюдается незначительное сужение ДН и повышение уровня значений полочки в диапазоне 8-12,5 ГГц, вследствие чего уменьшается асимметричность ДН. В Е-плоскости ДН стала шире во всем исследуемом диапазоне.

Пока изменения в ДН можно считать малыми, допустимо предполагать, что объединение моди-



Рисунок 6 – Сечения ДН Satimo SH2000 (Сплошная) и модификации "Расширитель" (пунктирная)

фикаций позволит дополнить преимущества описанных выше модификаций. Рассмотрим объединение данных модификаций с целью синтеза их преимуществ. На рис. 7 представлена модификация "Объединение", представляющая собой интеграцию модификаций, рассмотренных выше.



Рисунок 7 – Модификация "Объединение"

На рис. 8 показаны ДН антенны Satimo SH2000, и её модификации "Объединение" в главных плоскостях. В Н-плоскости уровень полочки стал выше. Форма ДН во всем исследуемом диапазоне частот стала куполообразной. В области углов до 15 градусов ДН стала шире, а вне этой области наблюдается резкое спадание. В Е-плоскости ДН стала шире во всем частотном диапазоне. Наблюдается незначительная асимметрия.

Заключение

Проведено исследование модификации широкополосной антенны для формирования у нее специальной формы ДН. Рассмотрены три модификации антенны, которые позволяют получить определенные изменения ДН антенны. Использование рассеивающей линзы расширяет ДН в Е-плоскости. Наличие небольших дополнительных стенок в модификации "Н-стенки" позволяет в Н-плоскости сузить ДН. Расширяющийся коньковый переход способствует расширению ДН в Е-плоскости.

Показано, что использованием всех рассмотренных модификаций вместе можно сформировать ДН, приемлемую для использования данной антенны в качестве облучателя коллиматора. При этом полученная ДН имеет более стабильную форму и размеры в главных плоскостях в полосе частот с коэффициентом перекрытия 2,25, чем у исходной широкополосной антенны.



Рисунок 8 – Сечения ДН Satimo SH 2000 (Сплошная) и модификации "Объединение" (пунктирная)

Список литературы

- [1] Компактные полигоны для измерений характеристик рассеяния объектов. / Балабуха Н.П., Зубов А.С., Солосин В.С. М.: Наука, 2007. 266 с.
- [2] Radar cross section. / Knott E.F., Shaeffer J.F., Tuley M.T Boston: SciTech Publishing, 1993, second edition - 477 p.
- [3] Антенны УКВ. / Айзенберг Г.З., Ямпольский В.Г., Терешин О.Н. М.: «Связь», 1977. Ч. 1 383 с.
- [4] Modern antenna design. / Milligan T. 2nd ed. Wiley: New Jersey, 2005. 614 p.
- [5] Brachat P. Sectorial pattern synthesis with primary feeds // IEEE Trans. on Anten. and Prop. 1994. -T. 42 (4). - p. 484-491.
- [6] Olver A.D., Xiang J. Design of profiled corrugated horns. // IEEE Trans. on Anten. and Prop. 1988. T. 36 (7). - p. 936-940.
- [7] Ерухимович Ю.А., Тимофеева А.А. Комбинированные рупорные облучатели для зеркальных антенн // - Труды НИИР. - 1979. - № 1.
- [8] Глазман Я. Д., Коршунова Н. В., Тимофеева А. А. Улучшение осевой симметрии главного лепестка и снижение уровня бокового излучения рупорных антенн. // Труды НИИР. - 1990. - № 3.
- [9] Балабуха Н.П., Меньших Н.Л., Солосин В.С. Расфазированный рупорный облучатель с изломом образующей и со скосом апертуры для коллиматора МАК-5М. Журнал Радиоэлектроники. 2016.
 №6. http://jre.cplire.ru/jre/jun16/5/text.html
- [10] Hoel K. V., Kristoffersen S. Characterization of variable density 3D printed materials for broadband GRIN lenses // 2017 IEEE International Symposium on Antennas and Propagation & USNC/URSI National Radio Science Meeting. - 2017. - p. 2643-2644. doi:10.1109/APUSNCURSINRSM.2017.8073364.
- [11] Hoel K.V., Ignatenko M., Kristoffersen S., Lier E., Filipovic D. S. 3-D Printed Monolithic GRIN Dielectric-Loaded Double-Ridged Horn Antennas // IEEE Transactions on Antennas and Propagation. – 2020. - T. 68 (1). - p. 533-539. doi:10.1109/TAP.2019.2938563.
- [12] Balabuha N. P., Menshikh N. L., Sakhno A. D., Shapkina N. E. Mathematical Simulating of Electromagnetic Field in the Quiet Zone of Pyramidal and Conical Tapered Anechoic Chambers: Comparison of Results // 2021 Photonics & Electromagnetics Research Symposium (PIERS), Hangzhou, China. – 2021. - p. 2552-2561. doi:10.1109/PIERS53385.2021.9694914.
- [13] Miyata K. A 12 GHz-band planar waveguide array antenna for compact range application-a preliminary study // IEEE Transactions on Antennas and Propagation. -1996. - T. 44 (4). - p. 588-589. doi:10.1109/8.489312.
- [14] Menshikh N. L., Fedorov S. A., Gilmutdinov R. V. Application of Antenna Lens System for Measurement of Bistatic Parameters of Materials // 2022 International Conference on Information, Control, and Communication Technologies (ICCT). – 2022. - p. 1-4. doi:10.1109/ICCT56057.2022.9976617.
- [15] Piksa, Petr & Zvanovec, Stanislav & Cerny, Petr. Elliptic and Hyperbolic Dielectric Lens Antennas in mm-Waves // -Radioengineering. -2011. – T. 20. – p. 270-275.
- [16] Wang C., Li E., Zhang Y. Guo G. Ridged Horn Antenna With Adjustable Metallic Grid Sidewalls and Cross-Shaped Back Cavity // IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters. – 2016. – T. 5. - p. 1221-1225. doi:10.1109/LAWP.2015.2502578.

FORMATION OF THE RADIATION PATTERN OF A BROADBAND ANTENNA FOR USING IT AS IRRADIATOR

Gilmutdinov R.V.*1, Menshikh N.L.1, Solosin V.S.1, Fedorov S.A.1

¹ Institute for Theoretical and Applied Electromagnetics of RAS, Moscow, Russia * psevduch777@gmail.com

Abstract

In this paper options for upgrading the Satimo SH2000 broadband antenna by changing the shape of the ridge transition, using side walls and installing a phase corrector in the form of a diverging lens are presented. A computer model of the original antenna was created. It was experimentally confirmed that the developed electrodynamic model of the antenna makes it possible to obtain radiation characteristics with sufficient accuracy. Using the method of integral equations in the FEKO software package, the influence of types of antenna modifications on the shape of the radiation pattern was studied. A comparison was made of the radiation patterns obtained as a result of modifying the antenna with the corresponding patterns of the original antenna in the frequency band. Three modifications of the antenna are considered. The use of a phase corrector expands the radiation pattern in the E-plane. The use of small additional walls in the H-wall modification makes it possible to narrow the radiation pattern in the H-plane. The expanding ridge transition also contributes to the expansion of the radiation pattern in the E-plane, and makes it possible to reduce the asymmetry of the shape of the radiation pattern in the main planes. It is shown that upgrading the antenna makes it possible to create a radiation pattern that is more stable in shape and size in a frequency band with an overlap coefficient of more than two. The resulting shape of the radiation pattern allows us to consider the modernized antenna as a collimator irradiator.

Key words: antenna Vivaldi, FEKO, irradiator, phase corrector, radiation pattern

QUASISTATIC (LOCALIZED) PLASMONS: FROM LANGMUIR TO FERRELL

Vinogradov A.P. * ^{1,2}, Dorofeenko A.V.^{1,2}

¹Institute for Theoretical and Applied Electromagnetics RAS, Moscow, Russia ²Dukhov Research Institute of Automatics (VNIIA), Moscow, Russia

> Received: 21.09.2023 Accepted: 29.09.2023 Published: 02.10.2023

Abstract

We review main results in electrostatic aspects of plasmonics. Although many applications of plasmonics require full-wave approach, plasmon resonance has an electrostatic nature. In this paper we focused on fundamentals of plasmonics, which are easier understood in the electrostatic approximation. We also touch upon a history of first insights in resonances in subwavelength electromagnetic systems.

Keywords: plasmonics, localized plasmons, plasmon resonance, electrostatic approximation

EDN BSZZDA

doi:10.24412/2949-0553-2023-46-38-49

1. Introduction

Recently electrodynamics of media with negative values of permittivity and/or permeability has attracted huge interest in the literature [1-13]. Basic phenomena in this field, such as, e.g., SERS [6, 14-20], SPASER, STM [21], and numerous effects observed in metamaterials [1-13], are related to plasmon resonances. All these phenomena can be united by a single term—plasmonics.

A characteristic feature of plasmonics, which singles it out from ordinary optics and electrodynamics, is that main phenomena in plasmonics occur on scales that are much smaller than the wavelength of light in vacuum. This endows plasmonics with many features of near-field optics and makes it to be in great demand for modern technologies.

Since the "stage", on which events in plasmonics take place, is small, plasmonics is akin to physics of magnetostatic waves [14, 15, 22] with the only difference that magnetostatic phenomena occur in the microwave range, while plasmonic events are observed in optics. As well as in the description of magnetostatic waves, the majority of phenomena of plasmonics can be treated in terms of the quasistatic approach. This is related to the fact that the spatial derivatives in Maxwell's equations greatly exceed the time derivatives, which, therefore, can be neglected.

In this paper, we review plasmonic systems, which may be considered in quasistatic approximation.

2. The frequency of plasmon resonance

The term "plasmon" has appeared in plasma physics to describe longitudinal collective oscillations of electrons (Langmuir waves¹) in plasmas. On average, plasma is quasineutral, this means that the mean local charge equals zero. Assume that, at a certain moment of time, a fluctuation in the charge distribution arose; namely, all particles of like charges in a plane layer with cross section ABCD (see Fig. 1), e.g., electrons, are spontaneously displaced in the same direction by distance x. As a result of this spontaneous charge separation, a plane capacitor is formed, inside of which homogeneous electric field E = enx, appeared, where e is the electron charge, and n is the electron density. This field will act on a single uncompensated electron

^{*}a-vinogr@yandex.ru

¹The term "plasma" itself has been introduced by Irving Langmuir [23]

with force $F = eE = e^2 nx$, so that the equation of motion of such an electron has the form

$$\ddot{x} = -\frac{e}{m}E = -\frac{e^2n}{m}x.$$
(1)

The solution to this equation is a harmonic oscillation with a frequency $\omega_p = \sqrt{e^2 n/m}$, which is referred to as the plasma frequency.



Fig. 1 – Charge separation as a result of plasmon oscillations

If the fluctuation has the shape of a sphere rather than of a layer, the field inside of the fluctuation region will also be homogeneous. Indeed, uncompensated negative charges in the examined fluctuation will shift outside from the surface of the initial volume by the distance $\delta x = x \cos \varphi$ (R and φ are the spherical coordinates fixed to the center of the fluctuation); as a result, on the surface of the surface charge $\delta \sigma = nex \cos \varphi$ appears. Mathematically, this problem is equivalent to the problem on the field inside a dielectric sphere with the polarization P = nex. As is well known [24], the field E inside of this sphere is given by $4\pi P/3$. Substituting this field $E = 4\pi enx/3$ into Eq. (1), we arrive at the equation governing motion of an oscillator with the frequency equal to

$$\omega_{sp} = \sqrt{\frac{e^2 n}{3m}} = \omega_p / \sqrt{3}.$$

For the fluctuation having the shape of an ellipsoid, the field in it as a result of the charge separation will be $n_i P$, where i = x, y, z coincides with one of the principal axes of the ellipsoid, while n_i is the depolarization factor [25]. Correspondingly, the resonant frequency will be given by $\omega_{ep\alpha} = \omega_p \sqrt{n_{\alpha}}$. Note that $n_x + n_y + n_z = 1$ [25]. For a circular cylinder whose axis is directed along the x coordinate, we have

$$n_x = 0, \ n_y = n_z = 1/2, \text{ and } \omega_{cp} = \omega_p / \sqrt{2}.$$

3. Description of the plasmon resonance in terms of the permittivity

In order to describe plasmon oscillations, microscopic description methods have been developed, which take into account quantum effects, and so on [18, 19]. However, in view of the collective character of oscillations, the description of plasmons in terms of the permittivity is often employed. In this chapter, we restrict ourselves precisely to this approach. To estimate the permittivity, we consider plasma in the free-electron approximation [1, 6, 21]. In other words, we will assume that the field generates the current $\mathbf{J} = ne\boldsymbol{\nu}$, where $\boldsymbol{\nu}$ is the average velocity of electrons. Microscopic Maxwell's equations are reduced to the wave equation

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\varepsilon \mu}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} - \frac{4\pi \mu}{c^2} n e \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\nu}.$$
 (2)

According to Newton's second law, $m\dot{\nu} = -e\mathbf{E}$. This finally yields the following closed equation for the electric field:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} + \frac{4\pi\mu}{c^2} \frac{ne^2}{m} \mathbf{E}.$$
(3)

For its solution in the form of plane wave exp $(-i\omega t + i\mathbf{kr})$, we obtain the dispersion equation

$$k^{2} = \frac{\omega^{2}}{c^{2}} \left(1 - \frac{\omega_{p}^{2}}{\omega^{2}} \right), \tag{4}$$

which yields the following expression for the permittivity of the plasma:

$$\varepsilon\left(\omega\right) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}.\tag{5}$$

The condition $\omega = \omega_p$ of excitation of the volume Langmuir oscillations (see Eq. (1)) looks now as $\varepsilon_{res} = \varepsilon (\omega) = 0$. We note that this condition is unambiguously related to the geometry of the problem defined by plane wave. In the case of a spherical geometry, plasmon oscillations are excited at the frequency $\omega = \omega_p/3$, i.e., at resonant value of permittivity $\varepsilon_{res} = -2$. In the case of an ellipsoid,

$$\varepsilon_{res} = -(1/n_{\alpha}+1);$$

in particular, for a cylinder, $\varepsilon_{res} = -1$. Note that, in all these cases, the dipole moment *d* induced by external field *E* as well as polarizability $\alpha = P/(EV)$ become infinite. Here *V* is the particle volume. In particular, for a sphere that consists of a material with ε_{int} and is placed into a medium with ε_{ext} , we have

$$\alpha = \frac{3}{4\pi} V \frac{\varepsilon_{\text{int}} - \varepsilon_{ext}}{\varepsilon_{\text{int}} + 2\varepsilon_{ext}}.$$
(6)

In other words, at resonant values of permittivity a zero field can cause a finite response of a plasmonic particle. This means that plasmon oscillations are nonzero eigensolutions of the Maxwell equations—plasmons that exist in the absence of an external field.

It is worth emphasizing that the values of permittivity at which the plasmon resonance is observed are independent of the particular form of the frequency dispersion. Thus the resonance can be observed at resonant values of permittivity even in materials with a permittivity dispersion different from (5). The frequency of the plasmon resonance, more exactly, the negative value of the permittivity at which it is observed, is determined by the geometry of the problem. Indeed, the equation div $(\varepsilon \mathbf{E}) = 0$ for plane waves $E \sim \exp(-i\omega t + i\mathbf{kr})$, which define the planar geometry, is reduced to the following equation

$$\varepsilon\left(\omega\right)\mathbf{kE}=0.\tag{7}$$

At $\varepsilon(\omega) \neq 0$ the solution is a transverse travelling wave, while, at $\varepsilon = 0$, the localized longitudinal oscillations of the electric field may appear. It is the case of the Langmuir resonance. It is evident that the curl of this field is zero and, therefore, the magnetic field is also zero. The latter fact means that the vector potential can be neglected and the electric field can be considered to be the gradient of the scalar potential.

4. Multipole resonances of a plasmonic particle

As we have seen, if the symmetry of the particle changes, the resonant value of the permittivity also changes. The same effect may be achieved by changing the symmetry of the field distribution. Even if the shape of the plasmonic particle is specified, the resonance can be observed at several values of the permittivity, corresponding to excitation of multipole plasmons, such as quadrupole, octupole, etc.

For simplicity, let us consider a spherical plasmonic particle. As is well known, in a homogeneous electric field only an electric dipole moment may be induced in the sphere. In order to excite a higher-order (multipole) moment the sphere should be placed in an inhomogeneous field. The inhomogeneity of the field can be caused by different reasons. For example, it can be created by a periodic inhomogeneity in the space of an incident plane wave, or by an inhomogeneity formed by neighboring inclusions in a composite material, or by some other inhomogeneity of the system, such as, e.g., corners, sharp edges, tips, and so on. In any case, the field of a plasmon is the solution of the Laplace equation that vanishes at infinity.

The problem on excitation of a small sphere by an inhomogeneous field of the form of $\varphi_0 = r^l Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ is reduced to solving the Laplace equation [2]

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial\varphi}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2\varphi}{\partial\varphi^2} = 0.$$
(8)

In order to find its solution, it is convenient to use the method of separation of variables. By substituting the solution in the form of $\varphi = R(r) \Theta(\vartheta) \Phi(\varphi)$ into (8), we arrive at the systems of equations

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R \right) - l(l+1)R = 0,$$

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin^2\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \Theta + l(l+1)\Theta = 0,$$

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + m\Phi = 0,$$
(9)

the solution of the first of them is given by

$$R\left(r\right) = Ar^{l} + \frac{B}{r^{l+1}}$$

while the solutions of the other two equations are Legendre polynomials $P_l^m(\cos \vartheta)$ and exponentials $\exp(\pm im\varphi)$. At $\theta = \pm \pi$, the second equation has finite solutions only at $l \ge |m|$ [3]. For the potentials inside and outside of the sphere, φ_{int} and φ_{ext} , respectively, the well-known expressions are obtained

$$\varphi_{int} = ar^{l}Y_{l,m}\left(\theta,\phi\right), \qquad |\varphi_{int}\left(r=0\right)| < \infty$$

$$\varphi_{ext} = r^{l}Y_{l,m}\left(\theta,\varphi\right) + br^{-(l+1)}Y_{l,m}\left(\theta,\phi\right), \qquad |\varphi_{ext}\left(r=\infty\right)| < \infty,$$
(10)

where $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ are the spherical functions:

$$Y_{l,m}(\theta,\varphi) = (-1)^{(m+|m|)/2} i^{l} \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2} P_{l}^{m}(\cos\vartheta) e^{im\varphi}.$$

In a sphere that is placed in an inhomogeneous field of the form of

$$\varphi_0 \sim r^l Y_{l,m} \left(\theta, \phi\right),$$

multipole moment a arises, which has a pole at

$$\varepsilon_{\rm int}^{(l)} = -\frac{l+1}{l}\varepsilon_{ext} \tag{11}$$

(problem 2.1). At l = 1, a dipole resonance occurs, and the field inside of the sphere is homogeneous (see [13, 26]). At l > 1, the field inside of the sphere is inhomogeneous. With an increase in the order of multipole l, the field inside of the sphere concentrates near the surface,

$$\varphi_{int} = ar^{l} Y_{l,m} \left(\theta, \phi \right),$$

and, in this respect, the solution can be called the surface plasmon. At $l \to \infty$, the spacing between poles $\varepsilon_{\text{int}}^{(l)}$ decreases. Moreover, this leads to the appearance of a point of condensation of poles at $\varepsilon_{\text{int}}^{(\infty)} = -\varepsilon_{\text{ext}} [3, 6, 11, 12, 14, 24-33].$

For a plasmonic sphere with permittivity (11), the excitation frequencies of corresponding resonances may be easily estimated as

$$\varepsilon_{int} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} = -\frac{l+1}{l} \varepsilon_{ext} \quad \Rightarrow \omega^2 = \frac{\omega_p^2}{\left[1 + (l+1)\,\varepsilon_{ext}/l\right]} \quad \xrightarrow[l \to \infty]{} \omega_{surf}^2 = \frac{\omega_p^2}{1 + \varepsilon_{ext}}.$$
 (12)

To solve the problem for dielectric cylinder we should consider cylindrical coordinates. The Laplace equation takes the form [15]

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} = 0.$$
(13)

Assuming that the field is perpendicular to the cylinder axis we can search for solution independent of z. Substituting into the Laplace equation the sought solution in the form of $\varphi = R(r) \Phi(\varphi)$, we arrive at the systems of equations

$$\frac{d}{dr}\left(r\frac{dR}{dr}\right) - \frac{m}{r}R = 0,$$

$$\frac{d^{2}\Phi}{d\omega^{2}} + m\Phi = 0.$$
(14)

The first of them has the solution $R(r) = Ar^m + \frac{B}{r^m}$, while the solution of the second equation is $\exp(\pm m\varphi)$. This yields the following well-known expressions for the potentials inside and outside of the sphere, φ_{int} and $\varphi_{ext} + \varphi_0$, respectively:

$$\varphi_{int} = ar^m \cos(m\varphi), \qquad |\varphi_{int} (r=0)| < \infty,$$

$$\varphi_{ext} = br^{-m} \cos(m\varphi), \quad |\varphi_{ext} (r=\infty)| < \infty.$$
(15)

In a cylinder placed in an external homogeneous field that is described by potential $\varphi_{ext} = \cos(m\varphi)$, a multipole moment appears, which has a pole at

$$\varepsilon_{int} = -\varepsilon_{ext},\tag{16}$$

(problem 2.2).

In other words, all the multipoles of the cylinder have resonance at one and the same value of the permittivity and one and the same frequency.

5. Plasmon resonance in a system of particles (plasmonic nanolens)

The plasmon resonance can be used to enhance the local field strength [17, 34]. Let us consider a scheme that has been proposed in [34]. In this work, a finite chain of metal nanospheres was examined. Let R_i denote the radius of the ith nanosphere and $d_{i,i+1}$ denote the spacing between the surfaces of the *i*th and (i + 1)-th nanospheres. Then, the system is constructed implying that the self-similarity takes place, i.e.,

$$R_{i+1} = \kappa R_i, \qquad d_{i,i+1} = \kappa d_{i+1,i+2} \quad i = 1, 2, \dots N,$$

where κ is a certain constant that is smaller than unity (see Fig. 2). At $\kappa \ll 1$, the local field of the *i*th nanosphere is only insignificantly perturbed by the field of the (i + 1)-th nanosphere. Due to the plasmon resonance, the local field near the largest nanosphere is enhanced compared to exciting field E_0 by a factor of Q, where $Q \sim \operatorname{Re}\varepsilon(\omega) / \operatorname{Im}\varepsilon(\omega)$ is the quality factor of the resonance, and $\varepsilon(\omega)$ is the relative permittivity of the metal of which nanospheres are made of, and ω is the frequency of the exciting field. The local field of the first, largest nanosphere can be considered to be homogeneous on the scale of the second nanosphere, and it can be treated as an external exciting field. Therefore, near the second nanosphere, the field will be enhanced Q^2 times. By continuing this construction, we find that, near the *n*-th nanosphere, the local field will be equal to $Q^n E_0 \gg E_0$. For example, for a really achievable value $Q \sim 10$ and *n* equal to three², we find that the local field near the smallest nanosphere is $E_n = 10^3 E_0$. If this nanolens is used in Raman spectroscopy, then, in accordance with the presented estimate, the Raman scattering will be enhanced by a factor of $(E/E_0)^4 \sim 10^{12}$ [18].

Really, it is necessary to take into account the mutual influence of nanospheres. This mutual influence manifests itself in that all the nanospheres are involved in the resultant oscillation, so that its frequency becomes different from the resonant frequency of an individual sphere. The main consequence is that the stronger enhancement is obtained for not-too-small , but, when a smaller nanosphere can rather strongly affect the field of a larger nanosphere. In this case, the greatest enhancement is achieved in between the smallest spheres.

 $^{^{2}}$ The size of the smallest nanosphere is restricted by the electron free path length in the metal; i.e., at optical frequencies, this radius should be chosen to be not smaller than 5 nm.



Fig. 2 – (a) Geometry of a nanolens consisting of three metal spheres with the radii R_1 , R_2 , and R_3 being equal to 45, 15, and 5 nm, respectively; the spacings d_{12} and d_{23} between the surfaces of the corresponding spheres are equal to 4.5 and 1.5 nm, respectively. (b) Enhancement coefficient of a local field in relation to the coordinate in the gap between the spheres. The figures were taken from [6, 19]

The efficiency of the proposed scheme was verified in the course of the numerical simulation using the multipole spectral expansion method [21], which is based on the spectral method in the differential form [1].

6. Spatial distribution of the field energy under plasmon resonance conditions

When studying complex systems that consist of several plasmonic particles, it is also necessary to take into account that, at plasmon resonance, the fraction of energy that is contained outside of a plasmonic particle, namely, in the dielectric, is always smaller than the fraction of energy that is concentrated inside of plasmonic particles [2].

Let us consider a limiting losseless case. In accordance with the Kramers–Kronig relations, the permittivity of a metal has the form [25]: $\varepsilon_M = \varepsilon_\infty - \omega_p^2/\omega^2$, where ε_∞ is the constant that does not depend on the frequency. Depending on the shape of a plasmonic particle or on the space distribution of a set of such particles, there is a frequency or the negative value of the permittivity of the metal, at which the plasmon resonance is observed; i.e., there is an eigensolution that differs from zero at a zero external field. A particular feature of this eigensolution is that the field tends to zero at infinity.

The following relation can be written:

$$\int_{\Omega} \varepsilon \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} dV = \int_{\Omega} \mathbf{D} \cdot \mathbf{E} dV = -\int_{\Omega} \mathbf{D} \cdot \vec{\nabla} \varphi dV$$
$$= -\int_{\Omega} \left[\nabla \cdot (\varphi \mathbf{D}) - \varphi \vec{\nabla} \cdot \mathbf{D} \right] dV = \oint_{S_{\Omega}} \varphi (\mathbf{D} \mathbf{n}) ds = 0$$
(17)

Then, by dividing the whole volume into a part that is occupied by the dielectric and a part that contains plasmonic particles and assuming that the permittivity distributions inside of these volumes are homogeneous, we obtain

$$\int_{\Omega_D} \varepsilon_D \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} dV = -\int_{\Omega_M} \varepsilon_M \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} dV.$$
(18)

The energy stored in the plasmonic particle has the form

$$U_M = \frac{1}{8\pi} \int_{\Omega_M} \frac{d\omega \varepsilon_M}{d\omega} \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} dV.$$
(19)

where

$$\frac{d\omega\varepsilon_M}{d\omega} = \frac{d\left[\omega\left(\varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right)\right]}{d\omega} = 2\varepsilon_\infty - \varepsilon_M > -\varepsilon_M,\tag{20}$$

that yields

$$U_M = \frac{2\varepsilon_\infty - \varepsilon_M}{8\pi} \int_{\Omega_M} \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} dV.$$
(21)

The energy stored inside of the dielectric is given by

$$U_D = \frac{1}{8\pi} \int_{\Omega_D} \varepsilon_D \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} dV = -\int_{\Omega_M} \varepsilon_M \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} dV.$$
(22)

For the ratio of these energies, we have

$$\frac{U_M}{U_D} = \frac{(2\varepsilon_\infty - \varepsilon_M) \int_{\Omega_M} \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} dV}{-\varepsilon_M \int_{\Omega_M} \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} dV} = \frac{(2\varepsilon_\infty - \varepsilon_M)}{-\varepsilon_M} > 1.$$
(23)

Assuming that the losses in the plasmonic particle are small and using (18), we can obtain the following estimate for the quality factor of the plasmon resonance, $Q = \frac{\omega(U_M + U_D)}{d(U_M + U_D)/dt}$:

$$Q = \omega \frac{\frac{d[\omega \operatorname{Re}\varepsilon_M(\omega)]}{d\omega} \int_{\Omega_M} \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} dV + \varepsilon_D(\omega) \int_{\Omega_D} \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} dV}{2\operatorname{Im}\varepsilon_M(\omega) \int_{\Omega_M} \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} dV} = \omega \frac{d\operatorname{Re}\varepsilon_M(\omega) / d\omega}{2\operatorname{Im}\varepsilon_M(\omega)},$$
(24)

An impression can be formed that, for the restricted system, the quality factor of the resonance does not depend on the particle shape or on the mutual arrangement of particles. However, the geometrical factor determines the frequency of the resonance, which, in turn, determines the value of ε_M in expression (24) for the quality factor.

To conclude we should emphasize that appearing singularities are related to overidealization of the problem. In the reality, losses are always present in the system, which shifts the frequency of the resonance to the complex domain. At real-valued frequencies, all quantities prove to be finite. Moreover, at low Joule losses, it is necessary to take into account losses for the emission of radiation. In this case, the quasistatic approximation is inapplicable (see [13, 26]), and it is necessary to solve the exact problem [11, 12].



Fig. 3 – Quality factor of the plasmon resonance of an ellipsoid of revolution in relation to the ratio of its axes a_z/a_x (a unit value of this ratio corresponds to a sphere). The material of the ellipsoid is silver

7. The Ferrell solution for a plasmon on a thin film

We note that the above-described enhancement of the field in the nanolens is a collective plasmon resonance in which the electromagnetic oscillation is localized not on a single inclusion [35, 36] but, rather, on a system of noncontacting particles. The manifestation of this phenomenon is most clearly pronounced upon consideration of a plasmonic composite—a dielectric matrix filled by inclusions with a negative permittivity. At certain concentrations, which depend on the magnitude of the negative permittivity, the effective permittivity of the composite has a pole [34] that is related to the excitation of a collective plasmon, which involves all particles and which is not restricted in the volume of the composite. It is clear that the external field at the resonant frequency should lead to the excitation of an infinitely large polarization, i.e., to the appearance of strong local fields.

Thus, we logically pass to the consideration of quasistatic problems for boundaryless objects. In essence, these solutions are transitional between localized and propagating plasmons.

In the late 1950s, works by Ritchie [37] and, later, by Ferrell [38] have been published in which energy losses of an electron beam in a metal foil were considered. It was shown that a part of losses is associated with the excitation of collective oscillations of electrons on the boundary surface of the metal film (see the discussion in [34]).

It turned out that, even in the planar geometry, the equation div ($\varepsilon \mathbf{E}$) = 0 can have solutions that are more complicated than the Langmuir plasmon solution (1). Following [38, 39] consider a metallic layer of thickness 2τ to be situated in the (x, y) plane. Then, it follows from the symmetry of the problem that two solutions should exist at a given value of τ , one of which is symmetric with respect to the plane z = 0, while the other solution is antisymmetric. Correspondingly, we will seek a solution of the equation div ($\varepsilon \operatorname{grad} \varphi$) = 0 inside of the layer in the form

$$\varphi_k = \cos\left(kx\right)\left(e^{kz} \pm e^{-kz}\right).$$

Using the condition that potential φ_k turns to zero at $|z| \to \infty$ and the continuity condition of the potential on the plate surface, we obtain the following expressions for the value of the potential outside of the plate:

$$\begin{aligned} \varphi_k^{z>\tau} &= \cos\left(kx\right) e^{-kz} (e^{k\tau} \pm e^{-k\tau}) e^{k\tau} \text{ at } z > \tau, \\ \varphi_k^{z<-\tau} &= \cos\left(kx\right) e^{kz} (e^{-k\tau} \pm e^{k\tau}) e^{k\tau} \text{ at } z < -\tau. \end{aligned}$$

In order to obtain the solution in the whole space, it is necessary to join the normal components of the electric induction, $\varepsilon \partial \varphi / \partial z$, at the boundaries. As a result, we obtain the eigenvalue and eigenfunction problem, which lies in finding a value of the permittivity at which a symmetric plasmon,

$$\varepsilon\left(\omega\right) = -\frac{\left(e^{k\tau} + e^{-k\tau}\right)}{\left(e^{k\tau} - e^{-k\tau}\right)},\tag{25}$$

and an antisymmetric plasmon,

$$\varepsilon(\omega) = -\frac{(e^{k\tau} - e^{-k\tau})}{(e^{k\tau} + e^{-k\tau})},\tag{26}$$

(see [12]) propagate (see problem 2.3). For the permittivity of the plasma $\varepsilon = 1 - \omega_p^2 / \omega^2$, the corresponding frequencies are given by

$$\omega = \omega_p \sqrt{\frac{1 \mp e^{-k\tau/2}}{2}}.$$
(27)

8. Field enhancement in an apertureless SNOM

The use of near fields in optical instruments makes it possible to overcome the Rayleigh resolution limit [40,41]. In particular, near fields that arise upon propagation of waves through small (subwavelength) holes are used in aperture schemes of scanning near-field optical microscopy (SNOM) [25,42]. In the majority of the schemes of this type, the light enters the system via a tapered optical fiber with a metal-sprayed coating. The resolution of the instrument is determined by the cross-section of the tapered end of the fiber. The subwavelength resolution can be achieved if the fiber end is an evanescent waveguide. In this case, the intensity of near fields in the SNOM aperture configuration is very low, which lowers the sensitivity of the method.

This drawback is eliminated in apertureless methods of SNOM, in which the incident electromagnetic wave excites a plasmon on the metal tip. The nanofocusing of plasmons on the tip end [?,40] makes it possible to create fields of high intensities in a small (subwavelength) region of space [43]. At a specially chosen geometry, the tip ensures the enhancement of the field intensity by a factor of up to 10^4 [44]. As a result of the scattering of the electric field of the plasmon by a sample under study, a far field arises the intensity of which (in some schemes, its phase as well) is registered and is used to retrieve the image of the sample. SNOM systems will make it possible to obtain images with a spatial resolution of about 20 nm [45].

The field on the tip end can be found analytically if the shape of the tip is approximated by a certain simple surface, e.g., by a paraboloid of revolution (a similar solution for a parabolic cylinder was presented in [46]). In this case, it is convenient to pass to the parabolic coordinate system [47]:

$$x = \sigma \tau \cos \varphi,$$

$$y = \sigma \tau \sin \varphi,$$

$$z = (\tau^2 - \sigma^2) / 2.$$
(28)

The surfaces of constant values of coordinates and are paraboloids of revolution, which are defined, respectively, as

$$z = (x^{2} + y^{2})/2\sigma^{2} - \sigma^{2}/2$$
(29)

and

$$z = -\left(x^2 + y^2\right)/2\tau^2 + \tau^2/2 \tag{30}$$

(see Fig. 4a).

The surface of the metal tip is one of paraboloids with a constant value of σ . It follows from (29) that the value of σ is connected with the radius of curvature of the tip end ρ_0 by a simple relationship $\sigma = \sqrt{\rho_0}$.



Fig. 4 – (a) Distribution of squared field modulus $|\nabla \Phi|^2$ in a plasmon wave on the tip end; (b) dispersion curve of a plasmon on a gold tip with a radius of the tip end of $\rho = 20$ nm

If the radius of curvature of the paraboloid is assumed to be much smaller than the wavelength, $k_0\rho_0 \ll 1$, the problem can be solved in the electrostatic approximation; i.e., the electric potential can be found from the Laplace equation $\Delta \Phi = 0$ taking into account that Φ and $\varepsilon \partial \Phi / \partial n$ are continuous on the tip surface and that Φ turns to zero at infinity.

In parabolic coordinates, the Laplace equation for axially symmetric solutions, which do not depend on azimuthal angle φ of the sought solution, takes the form

$$\frac{1}{\sigma}\frac{\partial}{\partial\sigma}\left(\sigma\frac{\partial\Phi}{\partial\sigma}\right) + \frac{1}{\tau}\frac{\partial}{\partial t}\left(\tau\frac{\partial\Phi}{\partial\tau}\right) = 0.$$
(31)

Then, we will separate variables $\Phi(\sigma, \tau) = S(\sigma) T(\tau)$ and denote the separation constant by $\kappa \left(\frac{1}{S} \frac{1}{\sigma} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\sigma \frac{\partial S}{\partial \sigma}\right) = \frac{1}{T} \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\tau \frac{\partial T}{\partial \tau}\right) = -\kappa$). As will be shown below, the choice $\kappa > 0$ ensures an exponential decrease of the solution along the line $\tau = \text{const}$, i.e., with increasing distance from the tip.

Function $T(\tau)$ is the solution of the zero-order Bessel equation. The solution that is bounded on the tip end has the form $T = J_0(\sqrt{\kappa}\tau)$. Function $S(\sigma)$ is the solution of the modified zero-order Bessel equation. Inside of the tip, the solution that is bounded at zero has the form $S(\sigma < \sqrt{\rho_0}) = I_0(\sqrt{\kappa}\sigma)$, whereas, outside of the tip, one should choose the solution that decreases at infinity, $S(\sigma > \sqrt{\rho_0}) = \alpha K_0(\sqrt{\kappa}\sigma)$. The unknown coefficient is determined from joining the conditions $S(\sqrt{\rho} - 0) = S(\sqrt{\rho} + 0)$ and $\varepsilon S'(\sqrt{\rho} - 0) = S'(\sqrt{\rho} + 0)$, which lead to the dispersion equation for $\kappa(\omega)$:

$$\varepsilon\left(\omega\right)\frac{I_{0}'\left(\sqrt{\kappa\rho}\right)}{I_{0}\left(\sqrt{\kappa\rho}\right)} = \frac{K_{0}'\left(\sqrt{\kappa\rho}\right)}{K_{0}\left(\sqrt{\kappa\rho}\right)}.$$
(32)

The corresponding dispersion curve is shown in Fig. 4b, while the field distribution is presented in Fig. 4a.

We note that, on the surface of the metal,

$$\sigma = \sqrt{\rho_0},$$

the solution has an oscillating character, as in the Ferrell problem. With increasing distance from the tip in the direction along the tip axis,

$$\tau = \sqrt{2z + \rho} \propto \sqrt{2z},$$

the potential takes the form

$$\Phi = I_0\left(\sqrt{\kappa\rho}\right) J_0\left(\sqrt{2\kappa\left(\rho+z\right)}\right) \propto \sin\left(\sqrt{2\kappa z}\right) / (2\kappa z)^{1/4}.$$

Therefore, the behavior of the field has an oscillating character. However, unlike the exponentially decreasing Ferrell solution, this solution decreases at infinity according to a power law, which is related to the change in the radius of curvature of the tip along the z axis. The concentrating (focusing) of the field on the tip end is called the nanofocusing effect.

The oscillating character of the solution can be described by introducing the local wavenumber $k = \partial \sqrt{2\kappa z}/\partial z = \sqrt{\kappa/2z}$. The electrostatic solution presented above is valid only in the range in which the wavenumber $k >> \omega/c$. Therefore, the electrostatic approach is applicable in the neighborhood of the tip: $k_0 z << \kappa/2k_0$.

In the literature, other shapes of the tip are also considered, which refer to various schemes of scanning tunneling microscopy (STM). Thus, in [48], the dispersion of plasmons excited between the tip in the shape of a hyperboloid and a metal plane was determined. As in the case considered above, plasmons have a continuous spectrum and the field concentration due to the tip effect.

STM schemes that operate with localized plasmons were also realized. Thus, in [38], the sample was "probed" by the field of a plasmon localized on a nanoparticle that is placed on the tip of an optical fiber. The plasmon is excited by a far field. The sensitivity and the resolution of this scheme are on the same order as those discussed above.

5. Conclusions

Thus, plasmonics has passed a long way from first notes of longitudinal plasma resonances to contemporary applications in microscopy and sensing. The main feature of plasmonics, resonance in subwavelength structures, is manifested in enhancement of Raman scattering (SERS), perspective plasmonic lines and interconnects. We hope that simplified electrostatic approach adopted here allowed deep understanding of plasmonics.

Список литературы

- [1] Gaponenko S. V. Introduction to nanophotonics. Cambridge University Press, 2010.
- [2] Schasfoort R. B., Tudos A. J. Handbook of surface plasmon resonance. Royal Society of Chemistry, 2008.
- [3] Park Q.-H. Optical antennas and plasmonics // Contemporary Physics. 2009. V. 50. N 2. P. 407-423.
- [4] Kiefer W., Schlücker S. Surface enhanced Raman spectroscopy: analytical, biophysical and life science applications. John Wiley & Sons, 2013.
- [5] Daghestani H. N., Day B. W. Theory and applications of surface plasmon resonance, resonant mirror, resonant waveguide grating, and dual polarization interferometry biosensors // Sensors. - 2010. - V. 10.
 - N 11. - P. 9630-9646.
- [6] Bozhevolnyi S. I. Plasmonic Nanoguides and Circuits. Singapore: Pan Stanford Publishing, 2009.
- [7] Schatz G. C., Van Duyne R. P. Electromagnetic Mechanism of Surface-Enhanced Spectroscopy // Handbook of vibrational spectroscopy / J. M. Chalmers P. R. G. – Chichester: John Wiley & Sons, 2002.
- [8] Pendry J., Martin-Moreno L., Garcia-Vidal F. Mimicking surface plasmons with structured surfaces // Science. - 2004. - V. 305. - N 5685. - P. 847-848.
- [9] Kneipp K., Moskovits M., Kneipp H. Surface-enhanced Raman scattering: physics and applications. Springer, 2006.
- [10] Rich R. L., Myszka D. G. Survey of the year 2005 commercial optical biosensor literature // Journal of Molecular Recognition. – 2006. – V. 19. – N 6. – P. 478-534.
- [11] Maier S. A. Plasmonics: Fundamentals and Applications. New York: Springer, 2007.
- [12] Agranovich V. M., Mills D. L. Surface Polaritons: Electromagnetic Waves at Surfaces and Interfaces. Amsterdam: North-Holland, 1982.

- [13] Novotny L., Hecht B. Principles of nano-optics. Cambridge: Cambridge University Press, 2012. 484 c.
- [14] Kawata S. Near-field optics and surface plasmon polaritons. Springer, 2001.
- [15] Shalaev V. M., Kawata S. Nanophotonics with surface plasmons. Elsevier, 2006.
- [16] Le Ru E., Etchegoin P. Principles of Surface-Enhanced Raman Spectroscopy: and related plasmonic effects. Elsevier, 2008.
- [17] Raether H. Excitation of plasmons and interband transitions by electrons. Berlin: Springer, 1980.
- [18] Wiederrecht G. Handbook of nanoscale optics and electronics. Academic Press, 2010.
- [19] Brongersma M. L., Kik P. G. Surface plasmon nanophotonics. Springer, 2007.
- [20] Klimov V. Nanoplasmonics. Singapore: Pan Stanford Publishing, 2014.
- [21] Andrews D. L., Gaburro Z. Frontiers in Surface Nanophotonics. New York: Springer, 2007. 168-168 c.
- [22] Cai W., Shalaev V. M. Optical Metamaterials: Fundamentals and Applications. Dordrecht: Springer, 2010.
- [23] Silin V., Fetisov E. Interpretation of the Electromagnetic Radiation from Electron Passage Through Metal Films // Physical review letters. – 1961. – V. 7. – N 10. – P. 374.
- [24] Tamm I. E. Fundamentals Of The Theory Of Electricity. Moscow: Mir Publishers, 1979. 504 c.
- [25] Landau L. D., Lifshitz E., Pitaevskii L. Electrodynamics of continuous media. Oxford: Elsevier, 2010.
- [26] Vashkovskii A. V., Stal'makhov V. S., Sharaevskii Y. P. Magnetostatic waves in microwave electronics. Saratov: SSU, 1993.
- [27] Lax B., Button K. J. Microwave ferrites and ferrimagnetics. New York: McGraw-Hill, 1962.
- [28] Kabos P., Stalmachov V. Magnetostatic waves and their application. Springer, 1994.
- [29] Dasgupta B. B., Beck D. E. Quantum-mechanical calculations of the surface plasmon dispersion for metals using the random phase approximation // Electromagnetic surface modes / Boardman A. D. – Chichester: John Wiley & Sons, 1982.
- [30] Kong J. A. Maxwell Equations. Cambridge: EMW Publishing, 2002.
- [31] Ginzburg V. L. The propagation of electromagnetic waves in plasmas. Oxford: Pergamon, 1960.
- [32] Kittel C., McEuen P. Introduction to solid state physics. New York: Wiley, 1996.
- [33] Hobson E. W. The Theory of spherical and ellipsoidal harmonics. Cambridge: Cambridge University Press, 1931.
- [34] Li K., Stockman M. I., Bergman D. J. Self-similar chain of metal nanospheres as an efficient nanolens // Physical Review Letters. – 2003. – V. 91. – N 22. – P. 227402.
- [35] Andrianov E. S., Pukhov A. A., Vinogradov A. P., Dorofeenko A. V., Lisyansky A. A. Spontaneous radiation of a two-level atom into multipole modes of aplasmonic nanoparticle // Photonics and Nanostructures – Fundamentals and Applications. – 2014. – V. 12. – P. 387-397.
- [36] Mathematical methods for physicists / Arfken G. B., Weber H. J. // Book Mathematical methods for physicists / EditorAAPT, 1999.
- [37] Stockman M. I. Nanofocusing of optical energy in tapered plasmonic waveguides // Physical review letters. - 2004. - V. 93. - N 13. - P. 137404.
- [38] Ferrell R. A. Predicted radiation of plasma oscillations in metal films // Physical Review. 1958. V. 111. - N 5. - P. 1214.
- [39] Li K., Stockman M. I., Bergman D. J. Enhanced second harmonic generation in a self-similar chain of metal nanospheres // Physical Review B. – 2005. – V. 72. – N 15. – P. 153401.
- [40] Bergman D. J., Stroud D. Physical properties of macroscopically inhomogeneous media // Solid state physics. – 1992. – V. 46. – P. 147-269.
- [41] Wang F., Shen Y. R. General properties of local plasmons in metal nanostructures // Physical review letters. - 2006. - V. 97. - N 20. - P. 206806.
- [42] Vaganov R. B., Katsenelenbaum B. Z. Fundamentals of the Diffraction Theory. Moscow: Nauka, 1982.
- [43] Luk'yanchuk B., Ternovsky V. Light scattering by a thin wire with a surface-plasmon resonance: Bifurcations of the Poynting vector field // Physical Review B. - 2006. - V. 73. - N 23. - P. 235432.

- [44] Tribelsky M. I., Luk'yanchuk B. S. Anomalous light scattering by small particles // Physical review letters. - 2006. - V. 97. - N 26. - P. 263902.
- [45] Meier M., Wokaun A. Enhanced fields on large metal particles: dynamic depolarization // Optics Letters. - 1983. - V. 8. - N 11. - P. 581-583.
- [46] Eguiluz A., Maradudin A. A. Electrostatic edge modes along a parabolic wedge // Physical Review B. 1976. – V. 14. – N 12. – P. 5526.
- [47] Bergman D. J. The dielectric constant of a composite material—a problem in classical physics // Physics Reports. – 1978. – V. 43. – N 9. – P. 377-407.
- [48] Ritchie R. Plasma losses by fast electrons in thin films // Physical Review. 1957. V. 106. N 5. P. 874.

КВАЗИСТАТИЧЕСКИЕ (ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ) ПЛАЗМОНЫ: ОТ ЛЭНГМЮРА ДО ФЕРРЕЛЯ

Виноградов А.П.^{1,2*}, Дорофеенко А.В.^{1,2},

¹ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук, Москва, Россия ² ВНИИА им Н.Л. Духова, Москва, Россия

* a-vinogr@yandex.ru

Аннотация

Проведен обзор основных результатов по электростатическим аспектам плазмоники. Хотя многие применения плазмоники требуют электродинамического подхода, плазмонный резонанс имеет электростатическую природу. В этой статье мы сосредоточились на основах плазмоники, которые легче понять в электростатическом приближении. Мы также затрагиваем историю первых представлений в области резонансов в субволновых электромагнитных системах.

Ключевые слова: плазмоника, локализованные плазмоны, плазмонный резонанс, электростатическое приближение

КОММЕНТАРИЙ К СТАТЬЕ А. СМЕКАЛЯ «К КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ»

Виноградов А.П. *¹, Лисянский А.А.²

¹ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук, Москва, Россия ² Куинс-колледж, Городской университет Нью-Йорка, Нью-Йорк, США

> Статья поступила в редакцию 20.09.2023 Одобрена после рецензирования 29.09.2023 Принята к публикации 02.10.2023

Аннотация

Работа Смекаля часто рассматривается как предпосылка к открытию комбинационного рассеяния. В данной заметке показано, что, хотя Смекаль одним из первых рассмотрел неупругое рассеяние фотонов, рассмотренный им механизм неупругости никак не связан с внутримолекулярной динамикой ядер молекулы и явлением комбинационного рассеяния. Механизм, рассмотренный Смекалем, связан с возможностью изменения состояния электронной подсистемы. Более того, исследованное им явление, в отличие от комбинационного рассеяния, можно наблюдать и при рассеянии света на атомах. Основное внимание в Статье Смекаля уделено вопросу об отдаче при испускании фотона. Учет изменения кинетической энергии молекулы приводит к дополнительной неупругости рассеяния и позволяет получить поправки к известной формуле рассеяния Крамерса и Гейзенберга. В качестве приложения предлагается перевод статьи Смекаля на русский и английский языки.

Ключевые слова: неупругое рассеяние, отдача при излучении фотона, закон сохранения энергии и импульса

EDN BRFAUF

doi: 10.24412/2949-0553-2023-46-50-57

Прежде всего, читая статью Смекаля (Adolf Smekal, Zur Quantentheorie der Dispersion, Naturwissenschaften II (1923), 873–875, doi:10.1007/BF01576902), нужно помнить, что она написана на заре квантовой механики, и в ней отражены многие моменты квантовой механики, дискутируемые в то время.

В своей статье Смекаль [1] обобщил работу Комптона [2] на задачу о рассеянии фотона на молекуле при учете изменения не только ее кинетической, но и внутренней энергии. Изменения внутренней энергии Смекаль предполагал квантованными, связывая их с переходами между собственными состояниями электронной подсистемы молекулы. Смекаль ввел понятие о «поступательных квантовых переходах», при которых происходит неупругое рассеяние света. Эти переходы возникают при освещении атома или молекулы монохроматическим электромагнитным полем любой частоты ν . Предполагается, что изначально атом или молекула находятся в своем *m*-ом электронном квантовом состоянии с энергией E_m и обладают начальной поступательной скоростью v_i . По Смекалю, при «поступательном квантовом переходе» существует определенная вероятность в единицу времени $C_{m,v}^{m,v'}$ перейти молекуле под действием падающего излучения из *m*-го в *n*-е электронное квантовое состояние, изменив свою скорость поступательного движения как по величине, так и по направлению, на окончательную скорость v_f . При этом испускается излучение частоты ν' . Начальное и конечное состояния должны быть связаны законом сохранения энергии и импульса.

В предположении о бесконечной массе молекулы следует ожидать, что скорость молекулы не меняется, а точнее, с точностью до Доплеровского смещения, что молекула покоится, и предсказываемое неупругое рассеяние Смекаля должно описываться формулой Крамерса и Гейзенберга [3] (см. также [4]), квантовомеханический вывод этой формулы был предложен в работах [5–7]. Применение формулы Крамерса и Гейзенберга к системе, обладающей как дискретным, так и непрерывным спектром, предпо-

^{*}Автор, ответственный за переписку: Алексей Петрович Виноградов, a-vinogr@yandex.ru

лагает суммирование по дискретному диапазону и интегрирование по непрерывному диапазону. Эффект Смекаля сводится, таким образом, к переходу молекулы при рассеянии на ней фотона с некоторой вероятностью в иное возбужденное электронное состояние¹. Однако в таком приближении не учитывается закон сохранения импульса. Точное описание акта рассеяния, когда в результате получается фотон с измененной частотой и атом в измененном состоянии, должно учитывать отдачу, испытываемую атомом (молекулой) при излучении фотона. Попытке это учесть и посвящена работа Смекаля.

В случае же комбинационного (несмекаловского) рассеяния молекулы предполагаются раманактивными: у них отсутствуют соответствующие ИК переходы на частотах, наблюдаемых при комбинационном рассеянии. Неупругость связывается с возбуждением вибронов, квазичастиц колебаний одной из связей атомов в молекуле. Природа этих колебаний чисто квантовая, так как стабильное состояние атомов в молекуле связано с взаимодействием подсистемы электронов с подсистемой ядер. Так что виброны в некотором смысле описывают коллективные колебания всех ядер в молекуле, взаимодействующих между собой через электронную подсистему. Центральную роль при этом играет квантовомеханический характер этого взаимодействия. В классическом случае равновесное состояние этих двух подсистем невозможно.

Заметим, что при смекаловском неупругом рассеянии, во-первых, предлагаемый эффект должен наблюдаться не только при рассеянии на молекуле, но и на атоме [10], во-вторых, смекаловский сдвиг при рассеянии на невозбужденном атоме имеет только красное смещение, в отличие от комбинационного рассеяния, когда наблюдаются и красное (стоксовский сигнал), и синее (анти-стоксовский сигнал) смещения, причем величины этих сдвигов по модулю совпадают.

При комбинационном рассеянии вопрос об отдаче, конечно, существует, но он не описывается столь простым подходом, как развиваемый в работе Смекаля. Так как импульс отдачи излученного фотона может привести не только к изменению скорости всей молекулы, но и к возбуждению колебаний других связей между атомами. Обычно при рассмотрении комбинационного рассеяния этими эффектами полностью пренебрегают.

С этой точки зрения работа Смекаля имеет независимую ценность, так как она поставила очень интересный вопрос о роли отдачи при излучении. Ясного ответа на этот вопрос нет и на сегодняшний день.

Цитирование статьи Смекаля как якобы предсказывающей комбинационное рассеяние [10–16], по всей видимости, связано с недооценкой важности результатов работы Рамана. Ссылки, связывающие статью Смекаля с эффектом Рамана, концентрировали внимание на открытии Раманом неупругого рассеяния света. Однако природа этого неупругого рассеяния по Смекалю определялась квантовыми переходами электронной подсистемы и отдачей при излучении, в то время как при комбинационном рассеянии она связывается с модуляцией этих состояний вибрациями связи атомов в молекуле. Отмеченные Смекалем явления относятся, скорее, к доплеровскому смещению и флюоресценции.

Список литературы

- Smekal A., Zur Quantentheorie der Dispersion // Naturwissenschaften. 1923. T. II, S. 873–875 doi:10.1007/BF01576902
- [2] Compton A. H., A Quantum Theory of the Scattering of X-rays by Light Elements// The Physical Review. – 1923. V. – 21, – P. 483- 502; Debye P., Zerstreuung von Röntgenstrahlen und Quantentheorie // – Physikalische Zeitschrift. – 1923. – B. 24. – S. 161-166.
- [3] Kramers H. A. and Heisenberg W., Uber die Streuing von Strahlung durch atome Zeitschrift für Physik. - 1925. – B. 31, – S. 681-708.
- [4] Фабелинский И.Л., Комбинационному рассеянию света 70 лет // Успехи Физических Наук. 1998. Т. 168, С. 1342- 1359.
- [5] Dirac P. A. M., The quantum theory of dispersion // Proc. Roy. Soc. 1927. V. 114A, P. 710 728.
- [6] Schrödinger E., Quantisirubg als Eigenwertpoblem // Annalen der Physik. 1926. B. 81, S. 109-139.
- Klein O., Elektrodynamik und Wellenmechanik vom Standpunkt des Korrespondenzprinzips // Zeitschrift für Physik, - 1927. - B. 41, S.- 407 - 422.
- [8] G. Placzek, Zur Theorie des Ramaneffekts // Zeitschrift für Physik. 1929. B.- 35, S. 585-594.

¹Из этих рассуждений Смекаля можно допустить, что процесс рассеяния можно рассматривать как следующие друг за другом независимые процессы поглощения и испускания. Однако Плачек [8] и Вейскопф [9] на основании рассмотрения статистического равновесия и на основании теории Дирака показали, что это не так.

- [9] Weisskopf V., Zur Theorie der Resonanzfluoreszenz // Annalen der Physik. 1931. B. 9. S. 23-66.
- [10] Podolsky B. and Rojansky V., On the theory of the Smekal-Raman, effect in hydrogen-like atoms // Physical Review. 1929. - V 34, - P. 1367 - 1372.
- [11] Rajinder Singh and Falk Riess, The 1930 Nobel prize for physics: a close decision? // Notes & Records of the Royal Society Lond. - 2002. V.- 55, P.- 267-283 (doi:10.1098/rsnr.2001.0143)
- [12] Фабелинский И.Л., Открытие комбинационного рассеяния света в России и Индии // Успехи физических наук. 2003.– Т. 173. С. 1137- 1143.
- [13] K. W. F. Kohlrausch. Der Smekal-Raman Effect. Berlin Springer, 1931. 392 p.
- [14] Кольрауш К. Спектры комбинационного рассеяния, Москва ИЛ 1952, 466 стр.
- [15] Long D. A., Early history of the Raman effect // International Reviews in Physical Chemistry, 1988. -V. 7:4, P. - 317-349, doi:10.1080/01442358809353216
- [16] Infrared and Raman Spectroscopy ed. Bernhard. Weinheim Schrader VHH Verlagsgeselschaft, 1995, 786 p.

Приложение 1

А. Смекаль. К квантовой теории рассеяния света (перев. на русский язык А.П. Виноградов)

К. Г. Дарвин недавно опубликовал исследование по квантовой теории рассеяния света (Nature 110, 841, 1922; Proc. Nat. Acad. Amer. 9, 26, 1923; Nature 111, 771,1923), которая, на первый взгляд оставляет весьма положительное впечатление, несмотря на некоторые нерешенные проблемы.

Для его рассуждений является существенным предположение о справедливости волновой теории в свободном вакууме. Он считает молекулы газа (атомы), находящиеся под воздействием излучения, покоящимися и допускает, что они, с некоторой вероятностью, способны испускать вторичные сферические волны, частоты которых соответствуют квантовым спектральным частотам молекул (атомов). Независимо от точности определения некоторых деталей описанной картины, можно прийти к соотношениям, описывающим рассеяние, в которые, и это является существенным продвижением вперед, входят квантовые частоты молекулярных частиц вместо классических электромагнитно-механических собственных частот частицы.

Независимо от Дарвина, автор этих строк уже давно делал похожие попытки построить соотношения указанного типа (Wien. Anz. 1922, s. 79; Naturwissenschaften 11, 411, 1923); но результаты этих попыток показались ему бесполезными по причинам, которые Дарвин не считает очень серьезными, а именно, указанным Дарвином способом невозможно обеспечить стационарный баланс энергии между излучением и веществом. Впрочем то, что стационарный баланс энергии между излучением и веществом нельзя обеспечить указанным выше подходом, понимал и сам Дарвин. Цель настоящей статьи состоит в том, чтобы пролить свет на этот вопрос, а также рассмотреть более подробно вопросы волновой теории и предложить разумные перспективы для решения возникших трудностей.

1. Что касается волновой теории, то широко распространено мнение, что так как она справедлива для вакуума между квантовыми атомами, то в связи с этим элементарные процессы излучения можно считать периодическими. Проблематичность утверждения о периодичности поля состоит в том, что, по сути, оно относится только к вакууму и поэтому остается экспериментально неконтролируемым (мы не можем экспериментально определить, что происходит внутри атома), принцип соответствия Бора, похоже, также ничего не говорит в пользу этого утверждения. Для того, чтобы это понять, нужно только представить, что в Максвелл-Лорентцевской электродинамике периодичность излучаемой волны обусловлена периодичностью колебательного движения электронов, которые специально предполагаются квазиупруго связанными с атомом так, чтобы частота колебаний стала энергозависимой. Именно частота этих колебаний является основным параметром волны, а не длина волны, с которой связана периодичность, наблюдаемая в вакууме, и которая становится важной только благодаря скорости распространения света. Элементарный процесс излучения в квантовой теории Бора может быть первоначально охарактеризован только величиной, имеющей размерность Гц и именуемой «частотой», а не «длиной волны». Однако, поскольку это число принципиально отличается от механических частот, характеризующих периодическое или квазипериодическое внутреннее движение электронов в атоме, из периодичности этого движения уже нельзя сделать вывод, что испускаемое излучение тоже периодическое. Если теперь осуществить переход к пределу «длинных» волн, то из принципа соответствия следует, что «частотное» число, входящее в условие Бора, должно асимптотически сходиться к

частоте механических колебаний внутреннего движения рассматриваемой атомной системы. Однако вывод о периодичности последнего с периодичностью радиационного процесса остается в принципе недоказанным.

2. Известный вывод Эйнштейном закона излучения Планка справедлив только для атомной системы, находящейся в энергетическом равновесии с излучением, и только для покоящихся молекул или атомов, и, если на них воздействует исключительно монохроматическое излучение, на их собственных спектральных частотах. Легко видеть, что допущения, введенные Эйнштейном, являются единственно возможными, если мы ограничимся рамками вывода Эйнштейна, в которых аппроксимация действующих, но до сих пор неизвестных причинных законов с помощью вероятностных предположений считается достаточной. Но тогда из вывода Эйнштейна также следует, что любое влияние излучения любой частоты, вызывающее рассеяние, в случае покоящихся молекул обязательно должно приводить к противоречию со вторым законом термодинамики макроскопического излучения. С учетом этого результата нам кажется, что, даже независимо от каких-либо возражений об использовании волновой теории, вышеупомянутым дарвиновским и всем подобным им соотношениям для рассеяния вынесен приговор. Приведенное выше утверждение о том, что в прежних попытках Дарвина и автора не удавалось обеспечить нерушимость энергетического баланса между излучением и веществом, теперь следует распространить и на то, что такой баланс в принципе невозможен при покоящихся атомах и молекулах.

3. Кажется, что вопрос квантовой теории о рассеяния света продвигается в очень конкретном направлении: без учета поступательного движения не существует радиационного равновесия! Важность этого утверждения применительно к чисто тепловым воздействиям на облучаемое вещество (сама тема теплового излучения в последнее время вышла из моды!), вероятно, не требует дополнительных пояснений. Такой же вывод можно было бы сделать, хотя и менее кратко, следуя хорошо известному соображению Эйнштейна о сохранении импульса; так как хорошо понятно, что необходимо учитывать влияние поступательного движения даже при расчете частот спектральных линий. Т.о. сделанное выше утверждение сохраняется и здесь, но в менее прозрачном виде.

4. Строго говоря, вывод Эйнштейном закона излучения Планка относится только к полю излучения, в котором представлены только спектральные частоты того типа атомов и молекул, которые используются в настоящее время; все другие частоты, на которых должно также происходить рассеяние, исключаются сами собой, что, например, обеспечивается частотными условиями Бора. Из эйнштейновского закона рассеяния, который можно считать эмпирически заданным на любой частоте, следует, что при каждом элементарном процессе излучения или поглощения количество энергии $h\nu$ и направленного импульса $h\nu/c$ должны играть ту же роль, что и при излучении спектральных частот линии. Поскольку из описания Эйнштейна это сразу не следует, необходимо подчеркнуть, что существование такого направленного импульса, возникающего при взаимодействии излучения с веществом, можно вывести, кроме его абсолютной величины, уже из закона смещения Вина, т.е. это не требует квантово-теоретического рассмотрения. Из закона излучения, который для этой цели можно считать эмпирически заданным для любых частот дисперсии, следует, что абсолютные величины $h\nu$ и $h\nu/c$ должны играть ту же из закона смещения Вина, т.е. это не требует квантово-теоретического рассмотрения. Из закона излучения, который для этой цели можно считать эмпирически заданным для любых частот дисперсии, следует, что абсолютные величины $h\nu$ и $h\nu/c$ должны играть такую же роль при взаимодействии излучения с веществом, как и при излучении спектральных линий.

5. Это открытие позволяет сделать вывод о возникновении под действием монохроматического излучения квантовых переходов нового типа, которые для простоты в дальнейшем могут называться «поступательными квантовыми переходами». Для каждого атома или молекулы, находящихся в своем m-м квантовом состоянии с энергией E_m и обладающих поступательной скоростью v, произвольно ориентированной относительно направления падения света частоты ν , существует определенная вероятность в единицу времени $C_{m,v}^{n,v'}$ перейти атому под действием излучения любой частоты из m-го в n-е квантовое состояние и изменить свою скорость поступательного движения на v' как по направлению, так и по величине, и испустить при этом вторичное излучение частоты ν' .

Считая, что законы сохранения энергии и импульса для такого процесса в точности выполняются, легко увидеть, что отдача $h\nu'/c$, связанная с испусканием вторичного излучения частоты ν' , будет иметь иное направление, чем отдача $h\nu/c$, возникающая при «поглощении» первичного излучения частоты ν . Если пренебречь релятивистскими поправками и считать массу молекулы постоянной и равной M, то закон сохранения энергии означает, что

$$\frac{M\nu^2}{2} + E_m + h\nu = \frac{M{\nu'}^2}{2} + E_n + h\nu'$$

Частота ν' может быть как больше, так и меньше ν . Нетрудно убедиться, что такие «поступательные квантовые переходы» не могут нарушить радиационное равновесие, если для каждого такого процесса предполагать еще и существование обратного. Учитывая возможное изменение направления излучения, вызванного этими процессами, в случае m = n нужно предполагать упругое рассеяние, а в случае $m \neq n$ можно говорить о неупругом. Последние процессы, очевидно, превращаются в реальное поглощение или испускание $h\nu$ при облучении (Эйнштейн), если $\nu' = 0$ или $\nu = 0$:

$$\frac{Mv^2}{2} + E_m + hv = \frac{Mv'^2}{2} + E_n \qquad (E_n > E_m)$$
$$\frac{Mv^2}{2} + E_m + hv = \frac{Mv'^2}{2} + E_n + hv' \qquad (E_n < E_m).$$

Если пренебречь трансляционными членами, которые, как показал Шредингер, приводят к эффекту Доплера, то эти отношения становятся просто идентичными частотному условию Бора. Как видно из тесной связи между рассеянием и дисперсией, можно ожидать, что можно будет прийти к новому выводу закона излучения Планка и к квантово-теоретической интерпретации рассеяния путем соответствующей интерпретации величин $C_{m,\nu}^{n,\nu'}$.

Без дальнейших вычислений можно также увидеть, что равновесные значения отдельных величин, помимо некоторых средних значений величин $C_{m,\nu}^{n,\nu'}$, могут зависеть лишь от разностей энергий, характеризуемых критическими спектральными частотами молекул; тогда включение в описание рассеяния последних, а не каких-то механических частот колебаний, представляется с самого начала в какой-то степени ясным, как того требует экспериментальный опыт.

Автор хотел бы оставить за собой право вернуться к этим и некоторым другим вопросам в связи с самыми последними соображениями Ладернбурга и Райхе (von Ladernburg und Reiche Natiurwissenschaften 11, 584, 1923) а затем надеется, что сможет дать в другом месте некоторые дополнительные подробности о выводе самой теории рассеяния.

6. Выше принято положение о том, что явления рассеяния могут быть, по существу, поняты только на основе балансов энергии и импульса, не считая, конечно, обязательного использования классической теории в приближении «длинных» волн. Если это окажется осуществимо в указанном смысле, то будет показано, что, в отличие от экспериментов, упомянутых в начале, понятия волновой теории и, в частности, вопрос о распространении света здесь не играют никакой роли. Серьезной поддержкой таких надежд являются результаты по рассеянию достаточно коротковолновых рентгеновских лучей, в частности обнаруженное здесь снижение частоты вторичного излучения, рассеянного вбок; и весьма успешные теории этого явления А. Х. Комптона (Phys. Rev. 21, 483, 1923) и П. Дебая (Phys. ZS. 24, 161, 1923) вытекают непосредственно из изложенных выше подходов для очень больших значений ν и ν' . Несомненно и то, что предполагаемым использованием законов сохранения энергии и импульса в дальнейшем нельзя будет ограничиться. Представляется, что всякое изменение направления светового луча будет связано с процессами, весьма сходными по своей природе с описанными выше «поступательными квантовыми переходами».

Формальное применение рассуждений Эйнштейна об импульсах приводит, в принципе, к изменению частоты или к ослаблению света при каждом процессе отражения, преломлении и дифракции, следствием чего стало более конкретное, независимое от рассмотренных выше вопросов, высказывание У. Дуэйн (Proc. Nat. Acad. Amer. 9, 158, 1923). Более внимательное рассмотрение показывает, что полученные в результате отклонения от классической волновой теории могут быть легко интерферометрически измерены. Однако, возможно, еще далеко до того, как осуществятся такие надежды на будущее, которые во многом были бы пригодны для разрушения догмы о незаменимости волновых соображений в оптике отражения и интерференции.

Приложение 2

Smekal A. On the quantum theory ща light scattering (translation into English A. A. Lisyansky)

C. G. Darwin has recently (Nature 110, 841, 1922; Proc. Nat. Acad. Amer. 9, 26, 1923; Nature 111, 771, 1923) published a study on quantum theory of dispersion, which leaves a very good impression at first glance, despite some difficulties.

For his reasoning, it is essential to assume the validity of the wave theory in free space. He considers the gas molecules (atoms) under the influence of radiation to be at rest and supposes that they can emit secondary spherical waves with a certain probability, the frequencies of which correspond to the quantum spectral frequencies of molecules (atoms). Regardless of the accuracy of some details of the described picture, one can obtain relationships describing scattering, in which, and this is a significant progress, instead of classical electromagnetic-mechanical eigenfrequencies, quantum frequencies of molecular particles are included.

Independently of Darwin, the author of this note has long been making similar attempts to construct

relationships of the specified type; but the results of these attempts seemed useless to him for reasons that Darwin does not consider as very serious, namely, it is impossible to ensure a stationary energy balance between radiation and matter using the method used by Darwin. However, the fact that the above approach cannot ensure a stationary energy balance between radiation and matter was understood by Darwin himself. The purpose of this article is to shed light on this issue, as well as to consider the wave theory in more detail and to offer reasonable prospects for solving the difficulties that have arisen.

1. As far as the wave theory is concerned, there is a widespread opinion that one can safely regard the wave theory as valid for the vacuum, outside of the quantum atoms and, in connection with this, can regard the elementary radiation processes as periodic. The problematic nature of the assertion about the periodicity of the field is that, in essence, it refers only to the vacuum and, therefore, remains experimentally uncontrolled (we cannot experimentally determine what happens inside the atom); Bohr's Correspondence Principle also seems to say nothing in favor of this assertion. In order to see this, one only needs to imagine that in Maxwell-Lorentzian electrodynamics the periodicity of the emitted wave is caused by the periodicity of the oscillatory motion of electrons, which are specifically assumed to be quasi-elastically coupled to the atom, so that the oscillation frequency becomes energy-dependent. It is the frequency of these oscillations that is the fundamental parameter of the wave, but the wavelength, which only becomes important through the speed of the light propagation. In Bohr's quantum theory, the elementary radiation process can initially be characterized only by a quantity with the dimension of Hz and called "frequency," not "wavelength." However, since this quantity fundamentally differs from the mechanical frequencies that characterize the periodic or quasi-periodic internal motion of electrons in an atom, the periodicity of this motion cannot be used to conclude that the emitted radiation is also periodic. If we now make the transition to the "long" wave limit, then from the correspondence principle, it follows that the "frequency" quantity entering into the Bohr condition must asymptotically converge to the frequency of the mechanical oscillations of the internal motion of the considered atomic system. The inference from the periodicity of the latter to that of the radiation process remains, in principle, unfeasible.

2. The well-known derivation of Planck's radiation law by Einstein is valid only for a molecular system in thermal equilibrium with radiation; moreover, the molecules or atoms must be in rest and exposed to exclusively monochromatic radiation at their own eigenfrequencies. One can see that the assumptions used by Einstein are the only possible ones if we limit ourselves to the framework of Einstein's derivation, in which the approximation of the acting, but still unknown causal laws, by means of probabilistic assumptions is considered sufficient. But then Einstein's derivation also states that any influencing of radiation of any frequency, causing scattering on molecules at rest, must necessarily lead to a contradiction with the second law of macroscopic radiation thermodynamics. In view of this result, it seems to us that even despite any objections based on the use of the wave theory, the above-mentioned Darwinian and all similar dispersion theories of scattering are doomed. The statement that in previous attempts by Darwin and the author, one cannot ensure that the energy balance between radiation and matter should now be extended to the fact that such a balance is, in principle, impossible if atoms and molecules are at rest. stationary.

3. Based on this fact, the question of the quantum theory of light scattering seems to be moving in a very specific direction: radiation equilibrium does not exist unless the translational motion is taken into account! The importance of this statement with regard to the purely thermal effects on irradiated substance (the actual subject of heat radiation has recently gone out of fashion!) probably requires no additional explanation. The same conclusion could be drawn, albeit less briefly, following the well-known Einstein's consideration of momentum conservation; it is well-understood that the influence of translational motion must be considered even in calculating spectral line frequencies. Thus, the above statement is also valid here, but in a less transparent form.

4. Strictly speaking, Einstein's derivation of Planck's radiation law refers only to a radiation field in which no other than the spectral frequencies of the type of atoms or molecules used are represented; all other frequencies, which must give rise to scattering processes, are excluded by themselves by the derivation, which e.g. provides by Bohr's frequency conditions. For the frequencies mentioned first, Einstein shows that with every elementary emission or absorption process in which the amount of energy $h\nu$ is converted according to the frequency, the conversion of directed momentum $h\nu/c$ is also linked. Since the following is not immediately apparent from Einstein's description, it should be emphasized that the existence of such a directed momentum occurring in the interaction between radiation and matter can already be deduced from Wien's displacement law, apart from its absolute size, i.e. not as quantum theoretical conclusion needs to be considered.

5. This discovery allows us to conclude about the occurrence of a new type of quantum transitions under the action of monochromatic radiation, which, for simplicity, can be further called "translational quantum transitions."

For each atom or molecule, in its *m*-th quantum state with energy E_m and having a translation velocity v, arbitrarily oriented against the direction of incidence of the light, there exists a certain probability per unit of time $C_{m,v}^{n,v'}$ to transition from the m-th to the n-th quantum state under the action of radiation of any frequency, changing its translational velocity to v', both in direction and in magnitude, and at the same time emitting secondary radiation of frequency ν' . Assuming that the laws of energy and momentum conservation are exactly fulfilled for such a process, it is easy to see that the recoil $h\nu'/c$ associated with the emission of secondary radiation of frequency ν . If we neglect relativistic corrections and assume the mass of the molecule to be constant and equal to M, then the law of conservation of energy means that

$$\frac{M\nu^2}{2} + E_m + h\nu = \frac{M{\nu'}^2}{2} + E_n + h\nu.'$$

The frequency ν' can be either greater or smaller than ν . It is not difficult to see that such "translational quantum transitions" cannot violate the radiative equilibrium if the existence of the reverse process is assumed for each such process. Taking into account the possible change in the direction of radiation caused by these processes, in the case of m = n, one has to assume that scattering is elastic, and in the case of $m \neq n$, it is inelastic. The latter processes, obviously, turn into real absorption or emission $h\nu$ under irradiation (Einstein) if $\nu' = 0$ or $\nu = 0$:

$$\frac{Mv^2}{2} + E_m + hv = \frac{Mv'^2}{2} + E_n \qquad (E_n > E_m)$$
$$\frac{Mv^2}{2} + E_m + hv = \frac{Mv'^2}{2} + E_n + hv' \qquad (E_n < E_m).$$

namely, if one neglects the translation terms, which, as Schrödinger has shown, result in the Doppler effect, then these relations become simply identical to Bohr's frequency condition. As can be seen from the close connection between scattering and dispersion, one can expect to be able to arrive at a new derivation of Planck's radiation law and a quantum-theoretical interpretation of the scattering by the corresponding interpretation of the quantities, in addition to some averaged quantity values, can only depend on the differences in energies characterized by the critical spectral frequencies of molecules; then the inclusion of the latter, rather than some mechanical oscillation frequencies, in the description of scattering seems to some extent to be clear from the outset, as required by experimental experience. The author would like to reserve the right to come back to these and some other questions in connection with the most recent considerations by Ladernburg and Reiche and then hopes to be able to give elsewhere some more details about the derivation of the scattering theory itself in another place.

6. In the above, it is assumed that scattering phenomena can essentially be understood only based on energy and momentum balances, not counting, of course, the obligatory use of classical theory in the "long" wave approximation. If this proves feasible in the sense indicated, it can be shown that, in contrast to the experiments mentioned at the beginning, the concepts of wave theory and, particularly, the question of the propagation of light play no role here. Serious support for such hopes is provided by the results of scattering of sufficiently short-wavelength X-rays, in particular the decrease in frequency of the secondary radiation scattered sideways that was discovered here, and the very successful theories of this phenomenon by A. H. Compton (Phys. Rev. 21, 483, 1923) and P. Debye (Phys. ZS. 24, 161, 1923) follow directly from the above approaches for very large values of ν and ν' . It is also undoubtedly the case that the proposed use of energy and momentum conservation laws cannot be limited in the future. It seems that any change in the direction of a light beam is associated with processes that are very similar in nature to the "translational quantum transitions" described above.

The formal application of Einstein's reasoning about momenta leads, in principle, to a change in frequency or to a weakening of light in each process of reflection, refraction, and diffraction, as a result of which a more specific statement, independent of the issues discussed above, was made by W. Duane (Proc. Nat. Acad. Amer. 9, 158, 1923). A more careful consideration shows that the resulting deviations from classical wave theory can be easily interferometrically measured. However, it may still be far from the time when such hopes for the future will be realized, which would be largely useful for destroying the dogma of the indispensability of wave considerations in the optics of reflection and interference.

COMMENT ON THE PAPER «ZUR QUANTENTHEORIE DER DISPERSION» BY A. SMECAL

Vinogradov A.P.^{*1}, Lisyansky A.A.²

¹ Institute for Theoretical and Applied Electromagnetics of RAS, Moscow, Russia
² 3Department of Physics, Queens College of the City University of New York, Flushing, New York 11367, USA and The Graduate Center of the City University of New York, New York, New York 10016, USA

* a-vinogr@yandex.ru

Abstract

The Smekal's work is often seen as a background for the discovery of Raman scattering. The present note shows that although Smekal was one of the first to consider inelastic scattering of photons but the mechanism of inelasticity considered by Smecal is in no way related to either the intramolecular dynamics of the molecular nuclei nor the phenomenon of Raman scattering. The mechanism considered by Smekal is associated with the possibility of changing the state of the electronic subsystem during scattering. Moreover, the phenomenon studied by Smecal, in contrast to Raman scattering, can also be observed when light is scattered by usual atoms. The main focus of Smekal's article is on the issue of recoil during photon emission. Taking into account the change in the kinetic energy of the molecule leads to additional inelasticity of scattering and makes it possible to obtain corrections to the well-known scattering formula by Kramers and Heisenberg. The translation of Smekal's article into Russian and English is offered as an appendix.

Key words: Raman scattering, inelasting scayyering, recoil during photon emission