

УДК 535.13; 535.016; 537.862
УКПШ
№ держреєстрації 0121U113162
Інв. №

Національна академія наук України
Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є.Лашкарьова
Україна, 03028 м. Київ, проспект Науки 41, тел.: +380 44 525-40-20

ЗАТВЕРДЖУЮ

В.о. директора Інституту фізики напівпровідників
Лашкарьова НАН України
м. н., професор



(підпис) В.П. Мельник

ЗВІТ
ПРО НАУКОВО-ДОСЛІДНУ РОБОТУ
за договором №212/Ф81/41842 від 26.07.2021 про виконання наукового
дослідження і розробки за рахунок грантової підтримки
«МІКРОЕЛІПСОМЕТРИЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ВПОРЯДКОВАНИХ
ПЛАЗМОННИХ НАНОСТРУКТУР»

(заключний)

Науковий керівник НДР
д.ф.-м.н., зав. лаб., с.н.с.
Є.Г.



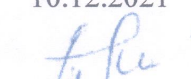
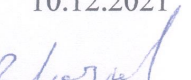
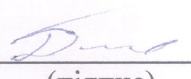
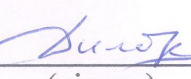

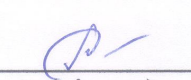
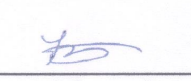
Борщагівський

(підпис)
12.12.2021

2021

Результати роботи розглянуто Вченою радою ІФН ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, протокол № 21
від 14.12.2021

СПИСОК АВТОРІВ

Керівник НДР, завідувач лабораторії, д.ф.-м.н.	 _____ (підпис) 10.12.2021	Борщаківський Є.Г., (Вступ, розділи 1-7 Висновки, Додатки 1, 2)
Відповідальний виконавець ст.н.с., к.ф.-м.н.	 _____ (підпис) 10.12.2021	Богословська А.Б., (Вступ, розділи 1, 3-5, 7, Висновки)
Відповідальний виконавець н.с., к.ф.-м.н.	 _____ (підпис) 10.12.2021	Мішакова Т.О., (Вступ, розділи 1, 2, 4, 5, 7, Висновки)
Відповідальний виконавець пр.н.с., д.ф.-м.н.	 _____ (підпис) 10.12.2021	Лозовський В.З., (Вступ, розділ 5, Висновки, Додаток 1)
Відповідальний виконавець н.с., к.ф.-м.н.	 _____ (підпис) 10.12.2021	Демиденко Ю.В., (Вступ, розділи 5-7, Висновки, Додатки 1, 2)
Відповідальний виконавець ст.н.с., к.ф.-м.н.	 _____ (підпис) 10.12.2021	Дімітрієв О.П., (Вступ, розділи 6, 7, Висновки)
Відповідальний виконавець ст.н.с., к.т.н.	 _____ (підпис) 10.12.2021	Гринько Д.О., (Вступ, розділ 8, Висновки, Додаток 3)
Відповідальний виконавець ст.н.с	 _____ (підпис) 10.12.2021	Дорошенко Т.П., (Вступ, розділи 3, 8, Висновки)
Відповідальний виконавець м.н.с.	 _____ (підпис) 10.12.2021	Федоряк О.М., (Вступ, розділ 8, Висновки, Додаток 3)

РЕФЕРАТ

Звіт про НДР: 95 стор., 27 рис., 85 джерел.

НАНОЧАСТИНКА, ГРАТКА, ЛОКАЛІЗОВАНИЙ ПЛАЗМОН, ПОВЕРХНЕВИЙ ПЛАЗМОН, ДИПОЛЬ, ПОЛЯРИЗУЄМІСТЬ, ПОЛЕ ДИПОЛЯ, МІЖЧАСТИНКОВІ ВЗАЄМОДІЇ, ВЗАЄМОДІЯ З ПІДКЛАДКОЮ, ГІБРИДИЗАЦІЯ, ЕЛІПСОМЕТРІЯ, ПІДСИЛЕННЯ ПОЛЯ, РЕПЛІКАЦІЯ, ГАЛЬВАНОПЛАСТИКА.

Об'єкт дослідження – впорядковані масиви плазмонних наночастинок на підкладці, що підтримує розповсюдження поверхневого плазмону.

Мета роботи – дослідження механізмів ренормалізації поляризуємості окремої частинки дипольними взаємодіями в складній впорядкованій системі та гібридизації мод для подальшого використання в новітніх елементах електроніки.

Методи дослідження – теоретичний аналіз та моделювання відгуку систем як неупорядкованих, так і впорядкованих в ґратки наночастинок на підкладці що може підтримувати розповсюдження поверхневого плазмону; контроль отриманих структур за допомогою скануючого електронного мікроскопу, вимірів екстинкції та мікроеліпсометрії; аналіз отриманих спектрів з побудовою дисперсійних залежностей мод в таких системах.

Виготовлені впорядковані в квадратну ґратку масиви плазмонних наноциліндрів на підкладці з прошарком золота на якому розповсюджується поверхневий плазмон. Проведені мікроеліпсометричні виміри цих структур. Для інтерпретації еліпсометричних спектрів розроблений послідовний формалізм врахування всіх дипольних взаємодій в такій системі. Для врахування взаємодії частинки кінцевих розмірів з шаруватою підкладкою вперше в макрооптиці застосований підхід оптики ближнього поля. Для аналізу взаємодій в ґратці розраховані ґраткові суми в широкому діапазоні параметрів. Визначено, як мають проявлятися резонанси в еліпсометричних спектрах та доведено вплив поверхневого плазмону в міжчастинковій взаємодії. Запропонований підхід для реплікації подібних наноструктур.

ABSTRACT

Research report: 95 p., 27 fig., 85 sources.

Key words: NANOPARTICLE, LATTICE, LOCALIZED PPLASMON, SURFACE PLASMON, DIPOLE, POLARIZABILITY, DIPOLE FIELD, INTERPARTICLE INTERACTIONS, INTERACTION WITH A SUBSTRATE, HIBRIDIZATION, ELLIPSOMETRY, FIELD ENHANCEMENT, REPLICATION, ELECTROFORMING.

The object of research – ordered lattice of plasmonic nanoparticles on a substrate, wich supports surface plasmon propagation.

The aim of the work – investigations of the polarizability renormalization mechanisms for a particle by dipolar interactions in complex ordered system and hybridization of modes for further application in modern electronic components.

Research methods – theoretical analysis and modeling of the response of both random and ordered systems of nanoparticles on a substrate supporting surface plasmon; investigation of built structures by scanning electron microscope, extinction measurements and microellipsometry; analysis of measured spectra with reconstruction of the dispersion of modes of such systems.

Ordered in square lattice arrays of plasmonic nanocylinders on a substrate with an intermediate gold layer supporting surface plasmons were produced, Scanning electron microscopic control and microellipsometric measurements of these structures were made. Consistent formalism with the account of all dipolar interactions in such a system was developed for the interpretation of ellipsometric spectra. In the first there was applied near-field optical approach for the account of the interaction of a finite size particle with a layered substrate in macrooptics. Lattice sums in wide range of parameters were calculated for the analysis of interactions in the lattice. It was determined how resonances are exhibited in ellipsometric spectra and the contribution of surface plasmons into interparticle interactions was experimentally proven. The approach for the replication of such structures by electroforming was proposed.

ЗМІСТ

ВСТУП.....	8
1 Еліпсометрія, як метод дослідження поверхні.....	9
2 Прояв резонансів в еліпсометрії.....	9
2.1 Діелектрична підкладка.....	12
2.2 Друде метал.....	17
2.3 Складна шарувата структура.....	19
2.4 Анізотропна плівка.....	20
2.5 Загальний аналіз та ефект Беремана.....	23
3 Виготовлення наноструктур та виміри.....	24
4 Експериментальні результати.....	25
5 Оптичні властивості правильної решітки нано/мезо-частинок на підкладці.....	27
5.1 Поляризація мезоскопічного циліндра.....	28
5.2 Ренормалізація поляризуємості підкладкою.....	31
5.3 Вплив інших наночастинок ґратки.....	35
5.4 Діелектрична функція еквівалентного шару.....	44
6 Можливість підсилення поля як на окремій частинці так і в ґратці.....	46
7 Порівняння моделі з експериментом.....	50
8 Гальванопластика як метод тиражування поверхневих наноструктур.....	59
8.1 Реплікація.....	59
8.2 Високоточна реплікація наноструктур оптичних дисків.....	60
8.3 Гальванопластика.....	63
8.4 Гальванопластична реплікація та суміжні технології.....	65
8.5 Бюджет похибок гальванопластичної реплікації.....	68
8.6 Проектування технологічної установки гальванопластики нікелем.....	69
ВИСНОВКИ.....	71

Публікації за Проектом.....	72
ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ	74
Додаток 1. Підхід до розрахунку ґраткових сум	81
Додаток 2. Числові значення ґраткових сум та поліноміальні коефіцієнти для їх апроксимації в діапазоні $0.1 < a/\lambda < 0.4$	84
Додаток 3. Копія креслення ванни для гальванопластики.....	95

СКОРОЧЕННЯ

eV – електрон-вольт;

SiO₂ – оксид кремнію;

Al₂O₃ – оксид алюмінію;

PMMA – поліметилметакрилат;

мкм – мікрон;

нм – нанометр;

CD – компакт диск;

DVD – цифровий відео диск.

ВСТУП

Проект був спрямований на теоретичний аналіз та експериментальні дослідження за допомогою зображуючої спектральної еліпсометрії з високою просторовою роздільною здатністю впорядкованих плазмонних наноструктур на підкладках, на яких можуть розповсюджуватися поверхневі плаزمони. Такі структури мають різноманітні електромагнітні резонанси, чиє спектральне та геометричне положення може регулюватися окрім використаного матеріалу геометричними параметрами наночастинок, параметрами та структурою ґратки та товщиною прошарку, що відокремлює наночастинок від металевого шару на якому розповсюджуються поверхневі плаزمони. Такі структури мають, мабуть, найбагатший набір параметрів, що дозволяють регулювати оптичні властивості таких структур та керувати взаємодією та гібридизацією мод і розподілом та підсиленням локального поля. Тож дослідження подібних структур є актуальним та корисним як з точки зору фундаментальної фізики, так і з практичної точки зору для подальшого використання в перспективних елементах електроніки, сенсоріки та ін.

Ці ідеї, а також визнання еліпсометрії, зокрема і внаслідок попередніх робіт авторів, як метода дуже підходящого для дослідження плазмонних структур завдяки можливості реєструвати не тільки амплітудну а також фазову інформацію були покладені в основу проекту. Оскільки подібні впорядковані структури виготовляються методами електронно-променевої літографії та мають розміри всього в десятки мікронів, не аби яку роль зіграла нещодавня поява комерційних еліпсометрів з високою просторовою роздільною здатністю, що, разом зі спільним інтересом до цих проблем, зумовило вибір партнерів для співпраці які мають таке обладнання.

Враховуючи вартість та трудомісткість виготовлення подібних структур, в проекті також розглядалися можливі підходи для реплікації таких структур.

1 Еліпсометрія, як метод дослідження поверхні

Еліпсометрія є оптичним неруйнівним методом дослідження поверхні за допомогою аналізу зміни поляризації світла що виникає при відбитті [1]. Так званим головним рівнянням еліпсометрії (для випадків ізотропних або відповідно орієнтованих анізотропних систем) є

$$\rho = \operatorname{tg}\Psi e^{i\Delta} = \frac{r_p}{r_s} \quad (1)$$

де Ψ та Δ це так звані еліпсометричні кути, що визначаються через комплексні коефіцієнти відбиття Френеля для р-поляризації r_p та для s-поляризації r_s для системи, що досліджується.

Вимірюючи зміну фази еліпсометрія має чутливість інтерферометрії, але вимірюючи тільки відносні величини та визначаючи зсув фази самоузгоджено, не потребує ніяких додаткових опорних сигналів, що підвищує точність.

2 Прояв резонансів в еліпсометрії

Відомо, що еліпсометрія є потужним методом дослідження поверхонь і плівок. Однак непрямі вимірювання та очевидна необхідність чисельної обробки вимірюваних даних для отримання параметрів досліджуваної системи створюють уявлення про те, що еліпсометрія є складним методом і практично не було зроблено спроб якісної прямої інтерпретації еліпсометричних спектрів на відміну від спектроскопії. Існують лише правила для кількох якісних інтерпретацій еліпсометричних спектрів, таких як відсутність адсорбції плівки в області інтерференційних смуг. Деякі інші думки засновані на енергетичних уявленнях про резонанс у системі, що представляє інтерес, можна розглядати як емпіричне правило на основі визначення еліпсометричного кута Ψ через $\tan\Psi = |r_p|/|r_s|$ де r_p і r_s - коефіцієнт відбиття Френеля для двох поляризацій – якщо резонанс збуджується р-поляризованим світлом, тобто енергія р-поляризованого світла передається резонансе, це призводить до мінімуму кута Ψ і якщо він збуджується s-поляризованим світлом, то призводить до максимуму кута Ψ [2,3]. Однак це не

завжди правда, як це можна побачити на рис.1. де наведені спектри еліпсометричного кута Ψ для системи плазмонічних наночастинок на склі для різних кутів падіння [4].

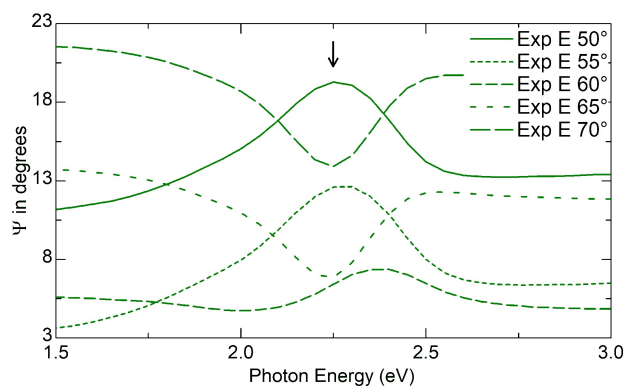


Рисунок 1 – Спектри еліпсометричного кута Ψ для шару наночастинок золота з локалізованим плазмоном поблизу 2.25eV.

Рис.1 демонструє наявність локалізованого плазмонного резонансу наночастинок приблизно при 2,25 eV, позначеного стрілкою та проявленого мінімумом лише для деяких кутів падіння, більших за кут Брюстера (56,6), тоді як він проявляється максимумом для менших кутів падіння і деякою хвилеподібною структурою навколо кута Брюстера. Тож аналіз прояву резонансів в еліпсометричних спектрах є необхідним як для інтерпретації спектрів плазмонних структур, так і з загальної точки зору для можливості якісної інтерпретації еліпсометричних спектрів.

Треба зазначити, що невідповідність енергетичних міркувань до реальної ситуації у випадку тонких плівок вже зазначалася та була пояснена в роботі [5].

Розглянемо модифікацію спектрів еліпсометричних кутів для відбиваючої системи після нанесення плівки з резонансом на поверхню цієї системи. Зрозуміло, що у випадку товстих плівок будь-які особливості діелектричної функції плівки перекриваються інтерференційними смугами, тому чіткий слід діелектричної функції плівки можна очікувати лише у випадку тонких плівок. Наближення тонкої плівки розглядалося в ряді робіт, наприклад [5-20] а історичний огляд можна знайти в [21]

Якщо розглядати тонку плівку на підкладці як структуру з проміжним шаром навколишнього середовища нульової товщини між плівкою та підкладкою [5,17], цей підхід дозволяє розділити коефіцієнт відбиття для матеріалу плівки r та коефіцієнт відбиття підкладки R у виразі для коефіцієнта відбиття підкладки з тонкою плівкою R_t у наближенні тонкої плівки першого порядку [5,16-20].

$$R_t = R + 2i\beta \frac{(1-rR)(r-R)}{1-r^2} \quad (2)$$

де $i = \sqrt{-1}$ -уявна одиниця, а фазова товщина плівки β - малий параметр, пропорційний відношенню товщини плівки d до довжини хвилі λ . Для випадку ізотропної плівки [1]

$$\beta = 2\pi \frac{d}{\lambda} n_f \cos \varphi_f \quad (3)$$

де n_f - комплексний показник заломлення плівки, φ_f - кут заломлення d плівці, який стандартно визначається законом Снелліуса. Аналогічні вирази можна знайти і для анізотропних плівок [1].

На відміну від стандартного підходу до наближення тонкої плівки з використанням стандартних рекуррентних рівнянь для шаруватих систем [1], де оптичні константи плівки включаються через коефіцієнти відбиття для її меж і змішуються таким чином з константами контактуючого матеріал підкладки, рівняння (2) включає чітко відокремлені від підкладки оптичні константи плівки і є вірним для будь -якої підкладки незалежно від того, наскільки вона є складною. Використовуючи це рівняння, легко описати модифікацію еліпсометричних кутів системи після нанесення плівки, якщо ані R_p , ані R_s початкової системи без плівки не є близькими до нуля

$$\tan \Psi_t e^{i\Delta_t} = \tan \Psi e^{i\Delta} \left[1 + 2i \left(\frac{\beta_p (1-r_p R_p)(r_p - R_p)}{R_p (1-r_p^2)} - \frac{\beta_s (1-r_s R_s)(r_s - R_s)}{R_s (1-r_s^2)} \right) \right] \quad (4)$$

де Ψ і Δ - еліпсометричні кути для початкової системи без плівки.

З іншої сторони, припускаючи, що зміна еліпсометричних кутів після нанесення тонкої плівки невелика, ми можемо записати

$$\tan \Psi_t e^{i\Delta_t} = \tan \Psi e^{i\Delta} \left[1 + \left(\tan \Psi + \frac{1}{\tan \Psi} \right) \delta\Psi + i\delta\Delta \right] =$$

$$\tan \Psi e^{i\Delta} \left[1 + \frac{|R_p|+|R_s|}{|R_p||R_s|} \delta\Psi + i\delta\Delta \right] \quad (5)$$

і, відповідно, безпосередньо обчислити зміну еліпсометричних кутів, поєднавши рівняння (4) та (5) та розділивши дійсну та уявну частини рівняння (4).

Найпростіший випадок для аналізу - це плівка на чистій підкладці, який обговорюється практично у всіх зазначених посиланнях. Тоді для ізотропної системи ми маємо

$$\frac{|R_p|+|R_s|}{|R_p||R_s|} \delta\Psi + i\delta\Delta = 4\pi i \frac{d}{\lambda} \frac{n_0 \cos \varphi_0 \sin^2 \varphi_0}{\varepsilon_1 \cos^2 \varphi_0 - \varepsilon_0 \cos^2 \varphi_1} \left(\varepsilon_f + \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_1}{\varepsilon_f} - \varepsilon_0 - \varepsilon_1 \right) \quad (6)$$

де індекси 0, f і 1 позначають навколишнє середовище, плівку та матеріал підкладки відповідно. Вирази для анізотропної плівки в тонкоплівковому наближенні також можна знайти [12,14,15 і 19,20]. Цікаво відзначити, що ізотропний випадок демонструє вже всі особливості кореляції між поведінкою діелектричної функції та модуляцією еліпсометричних кутів.

Як і раніше [4], розглянемо різні підкладки. Усе моделювання, представлене далі, щоб продемонструвати поведінку, що обговорювалося, було зроблено для ізотропного випадку або для бездисперсійної діелектричної підкладки з $n_1 = 1,45501$ ($\varepsilon_1 \approx 2,117$), що відповідає SiO_2 у далекому червоному діапазоні і призводить до кута Брюстера лише на $\sim 0,00002$ градуса більше $55,5^\circ$; або для золота та кремнію в різному спектральному діапазоні.

Для розгляду анізотропних плівок, як і для голої підкладки, обмежимося випадком двовісної анізотропії з фіксованою геометрією експерименту напрямку оптичних вісей. У цій симетричній орієнтації матриця відбиття діагональна без перехресної поляризації, і всі попередні вирази (2,4-6) вірні.

2.1. Діелектрична підкладка

У цьому випадку діелектрична функція підкладки ε_1 дійсна, і ми отримуємо з рівняння (6)

$$\delta\Psi = 2\pi \operatorname{sign}(R_p) \frac{d}{\lambda} \frac{n_0 \sin^2 \varphi_0 (n_1 \cos \varphi_1 - n_0 \cos \varphi_0)}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_0) \cos \varphi_1 (n_1 \cos \varphi_0 + n_0 \cos \varphi_1)} \left(\varepsilon_f'' - \varepsilon_0 \varepsilon_1 \frac{\varepsilon_f''}{|\varepsilon_f|^2} \right)$$

$$\delta\Delta = 4\pi \frac{d}{\lambda} \frac{n_0 \cos \varphi_0 \sin^2 \varphi_0}{\varepsilon_1 \cos^2 \varphi_0 - \varepsilon_0 \cos^2 \varphi_1} \left(\varepsilon_f' + \varepsilon_0 \varepsilon_1 \frac{\varepsilon_f'}{|\varepsilon_f|^2} - \varepsilon_0 - \varepsilon_1 \right) \quad (7)$$

Якщо припустити, що дисперсія діелектричної функції підкладки ε_1 мала, спектральна дисперсія еліпсометричного кута Ψ визначається уявною частиною діелектричної функції плівки ε_f'' а дисперсія еліпсометричного кута Δ - дійсною частиною діелектричної функції плівки ε_f' . Однак модуляція не прямо пропорційна цим частинам діелектричної функції, оскільки для обох еліпсометричних кутів є другий доданок, де та сама частина діелектричної функції плівки ділиться на квадрат модуля діелектричної функції плівки, що також є дисперсійним.

Якщо припустити, що діелектрична функція плівки описується стандартним виразом для резонансу Лоренца з затуханням

$$\varepsilon_f = \varepsilon_\infty + \frac{A}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma} \quad (7)$$

з дійсною та уявною частинами

$$\varepsilon_f' = \varepsilon_\infty + \frac{A(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2\gamma^2}, \quad \varepsilon_f'' = \frac{A\omega\gamma}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2\gamma^2} \quad (8)$$

які демонструють добре відому хвилеподібну форму реальної частини та форму дзвону для уявної частини. Хоча її максимум зміщений в червону область від резонансної частоти, зазвичай вона визначається по максимуму.

Для аналізу форми модуляції еліпсометричних кутів (7) нам потрібен квадрат модуля діелектричної функції плівки, який

$$|\varepsilon|^2 = \varepsilon_\infty^2 \frac{\left(\frac{A}{\varepsilon_\infty} + \omega_0^2 - \omega^2\right)^2 + \omega^2\gamma^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2\gamma^2} \quad (10)$$

і після деякої алгебри ми отримуємо

$$\frac{\varepsilon_f'}{|\varepsilon|^2} = \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{\frac{A}{\varepsilon_\infty^2} \left(\frac{A}{\varepsilon_\infty} + \omega_0^2 - \omega^2\right)}{\left(\frac{A}{\varepsilon_\infty} + \omega_0^2 - \omega^2\right)^2 + \omega^2\gamma^2}, \quad \frac{\varepsilon_f''}{|\varepsilon|^2} = \frac{\frac{A}{\varepsilon_\infty^2} \omega\gamma}{\left(\frac{A}{\varepsilon_\infty} + \omega_0^2 - \omega^2\right)^2 + \omega^2\gamma^2} \quad (11)$$

Форма цих співвідношень відповідає формі нового «резонансу» з тим же затуханням, але зміщеного у синю область спектру і перевернутою догори дригом хвилеподібною формою реальної частини порівняно з початковим резонансом. Якщо ε_∞ приблизно одиниця, обидві форми резонансу мають однакову амплітуду

і внесок у дисперсію еліпсометричних кутів цього нового зміщеного "резонансу", збільшено порівняно з внеском у положення реального резонансу діелектричною функцією підкладки, яка зазвичай більша за одиницю.

Частота цього "резонансу" відповідно до реального визначається

$$\omega_0' = \omega_0 \sqrt{1 + \frac{A}{\varepsilon_{\infty} \omega_0^2}} = \omega_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_{\infty}}} \quad (12)$$

що далі від реального для сильного резонансу та меншого значення діелектричної проникності на нескінченній частоті. ε_0 позначає тут діелектричну проникність (7) на нульовій частоті.

Треба зазначити, що ця частота відповідає частоті так званого повздовжнього фону для іонних кристалів, при якій дійсна частина діелектричної функції (7) занулюється.

Остаточна спектральна форма еліпсометричних кутів визначається взаємодією резонансних параметрів (ширина, амплітуда, діелектрична проникність на нескінченній частоті) та діелектричної функції підкладки. Так, наприклад, сильний вузький резонанс має дві добре розділені особливості протилежних знаків - максимум і мінімум для Ψ і дві протилежні хвилеподібні структури для Δ . В протилежному випадку - слабкий широкий резонанс - часткове перекриття максимуму і мінімуму для кута Ψ призводить до хвилеподібної структури і до більш складної форми з трьома екстремумами для кута Δ . Велике значення діелектричної проникності на нескінченній частоті робить зсув другої структури малим і практично знімає модуляцію зі зміщеною частотою, тоді як її мале значення робить цю модуляцію сильною, але досить далекою від резонансної частоти. Додаткова асиметрія впливає із зворотної пропорційності множника малості d/λ до довжини хвилі або прямої пропорційності до частоти. Усі ознаки описаної поведінки представлені на рис. 2.

Необхідно також зауважити, що структури для кутів падіння, менших і більших за кут Брюстера, мають протилежні знаки, як це видно на рис.1.

Поява другого «резонансного» піку при відбитті р-поляризованого світла або в еліпсометрії відома, особливо в інфрачервоній області спектру і називається ефектом Беремана [22-24].

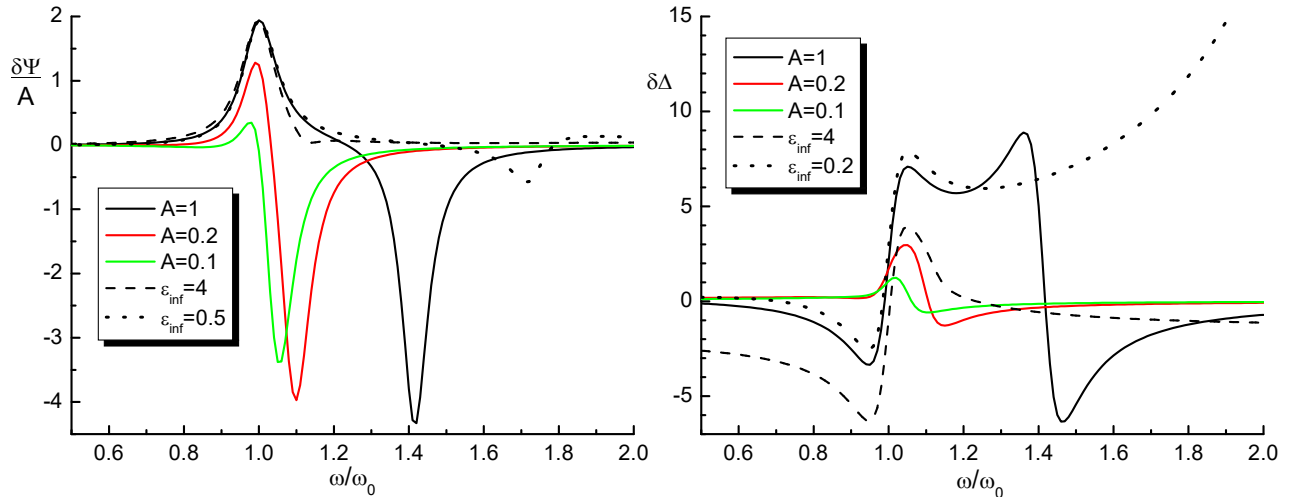


Рисунок 2 – Вплив параметрів резонансу на відображення в еліпсометричних спектрах.

У разі чистої підкладки R_s не може бути нульовим на відміну від R_p при куті падіння Брюстера $\varphi_B = \tan^{-1}(n_1/n_0)$. Додатковий аналіз для кутів навколо кута Брюстера де вираз (4) не дійсний показує, що в цьому випадку

$$\tan \Psi_t e^{i\Delta_t} = \sigma \frac{\sqrt{\epsilon_0}(\epsilon_0 + \epsilon_1)^2}{\sqrt{\epsilon_1} 2\epsilon_0\epsilon_1} + i\pi \frac{d\sqrt{\epsilon_0 + \epsilon_1}}{\lambda \epsilon_0 - \epsilon_1} \left(\epsilon_f + \frac{\epsilon_0\epsilon_1}{\epsilon_f} - \epsilon_0 - \epsilon_1 \right) \quad (13)$$

Через два доданки різного характеру цей вираз є досить складним для аналітичного аналізу. Тим не менш, ми можемо помітити подібність внеску плівки у рівняннях (13) та (6). Отже, всі висновки щодо двох резонансних структур, видимих у поведінці еліпсометричних кутів залишаються вірними. Однак у рівнянні (6) він визначає лише виправлення еліпсометричних кутів зі знаком, тоді як у рівнянні (13) він визначає самі еліпсометричні кути. В результаті еліпсометричний кут Δ змінюється у всьому діапазоні кутів (360°), а еліпсометричний кут Ψ визначається модулем і демонструє для кута Брюстера два максимуми замість максимуму та мінімуму на рис. 2. Зрозуміло, що обмежуючись лише позитивним значенням Ψ ми не можемо отримати мінімум відповідно до

нульової базової лінії. Поведінка еліпсометричних кутів в цьому випадку показана на рис. 3.

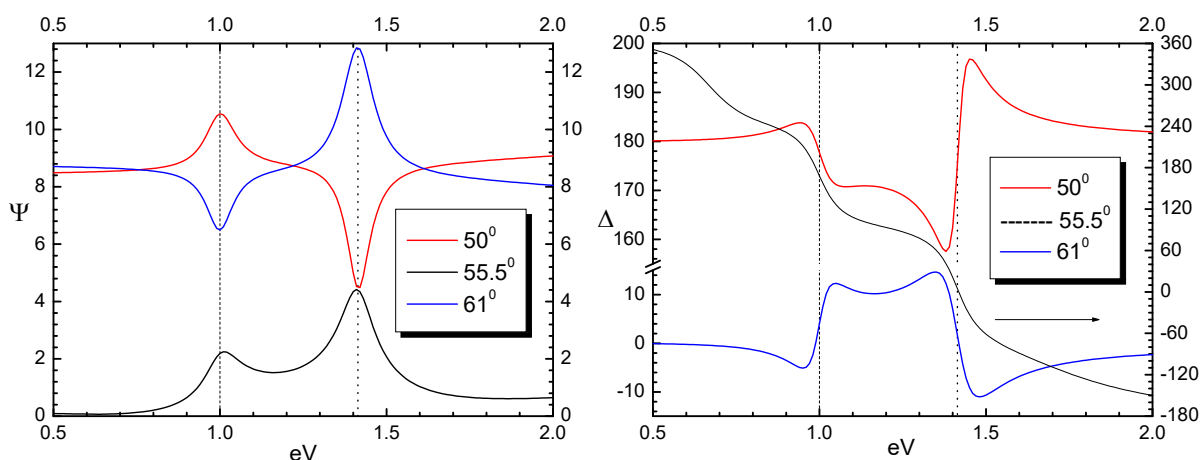


Рисунок 3 – Поведінка еліпсометричних кутів навколо кута Брюстера в області резонансу.

Моделювання демонструє, що відновлення структур з максимальним і мінімальним значеннями відбувається після відхилення кута падіння приблизно на $0,5^\circ \div 1^\circ$ від кута Брюстера.

2.2 Друде метал

У цьому випадку реальна частина діелектричної функції металу Друде має велике від'ємне значення, а величина її уявної частини мала, а саме $|\epsilon_1'| \gg \epsilon_1''$; ця умова є дійсною, наприклад, для золота в інфрачервоній та червоній частині видимого спектру, а також у більш широкому спектральному діапазоні для срібла та алюмінію. Формально, опускаючи мале значення уявної частини діелектричної функції підкладки, ми повертаємося до випадку діелектричної підкладки, але з негативною діелектричною функцією. Відбиття від такого «діелектрика» досить специфічне, оскільки під будь-яким кутом падіння ми маємо повне відбиття, а також немає кута Брюстера. Однак відображення резонансу плівки на такій підкладці має відповідати тим же правилам, що і для діелектрика з урахуванням знаку діелектричної функції підкладки. В результаті обидві спектральні

особливості як на резонансній частоті та і на частоті зсунутого "резонансу" відображаються як мінімуми.

Якщо нагадати, що значення дійсної частини діелектричної функції металу Друде зазвичай має велике значення, це дозволяє зробити наступне наближення. Це означає, що показник заломлення n близький до нуля, а показник поглинання k має велике значення. Розглядаючи k або $|\epsilon_1'|$ як найбільші значення порівняно з іншими оптичними константами та маючи на увазі, що $|R_p| \approx |R_s| \approx 1$, ми отримуємо з (6)

$$2\delta\Psi + i\delta\Delta = 4\pi i \frac{d}{\lambda} n_0 \sin \varphi_0 \tan \varphi_0 \left(\frac{\epsilon_0}{\epsilon_f} - 1 \right) \quad (14)$$

Як ми бачимо, при великому куті падіння ця поправка стає не малою.

Однак таку поведінку можна отримати з наближення тонкої плівки для випадку сильно контрастної поверхні, коли діелектрична функція підкладки ϵ_1 значно більша від інших діелектричних функцій [25]. Метал Друде є лише одним конкретним варіантом такого випадку, і рівняння (14) можна отримати безпосередньо з (6), якщо ϵ_1 велика.

Отже, у випадку будь-якої сильно контрастної поверхні, а не тільки металу Друде, модуляція еліпсометричних кутів відбувається переважно зі зміщеною частотою відповідно до обговорення рівняння (11). Насправді, існує також модуляція на резонансній частоті, але вона менша, ніж модуляція на зміщеній частоті. Це можна бачити безпосередньо з рівняння (6), оскільки модуляція зі зміщеною частотою множиться на велике значення ϵ_1 , а модуляція на резонансній частоті опускається у рівнянні (14), оскільки є наступним порядком малості. Хоча, враховуючи наявність великої діелектричної функції підкладки в знаменнику кутового залежного множника, у цьому випадку було б правильніше сказати, що модуляція на зміщеній частоті зберігається, а модуляція на резонансній частоті гаситься великим значенням діелектричної функції ϵ_1 у знаменнику. Така поведінка добре простежується на рис. 4 для золотої підкладки в різному діапазоні частот.

Результати для падіння під кутом 60^0 для випадку золотої та кремнієвої підкладки, покритої плівкою товщиною 1 нм та резонансом на різних частотах, показані на рис. 4 разом із поведінкою діелектричної функції золота [26] та кремнію [27].

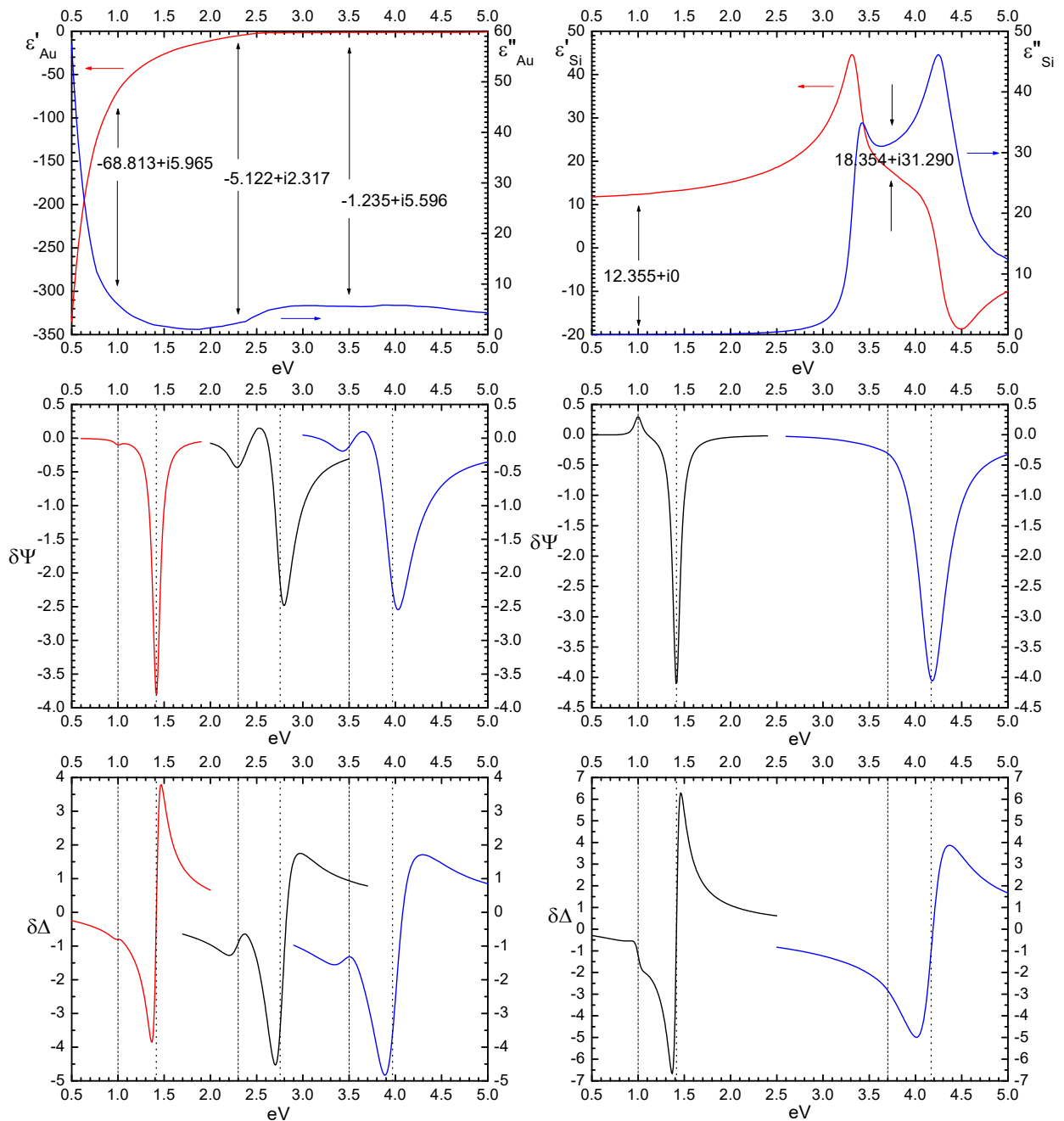


Рисунок 4 – Відображення резонансу плівки на золоті (ліва колонка) та кремнію (права колонка) в різному спектральному положенні.

Як обговорювалося, модуляція на резонансній частоті для великого значення діелектричної функції підкладки загасає, як для золота при 1eV, і практично непомітна для кремнію при 3.7eV. Оскільки при 1eV кремній є діелектриком, модуляція Ψ і Δ на частотах резонансу та "зсунутий" резонанс мають протилежні знаки, тоді як для золота однакові. Резонанс проявляється максимумом у Ψ оскільки 60° менший за кут Брюстера для кремнію який при 1eV - $74,12^\circ$. У разі не настільки великої діелектричної функції підкладки з не маленькими реальними та уявними частинами, як для золота при 3,5 eV, форма модуляції еліпсометричних кутів подібна до попередніх форм для інших частот, але положення спектральних особливостей відрізняються. Тепер ми маємо максимум у Δ та хвилеподібну форму у Ψ на резонансній частоті. Випадок золотої підкладки при 2.3eV демонструє проміжний варіант модуляції. Насправді, наявність не малої уявної частини діелектричної функції підкладки змішуватиме внесок реальної та уявної частин плівкової діелектричної функції в модуляції обох еліпсометричних кутів, також як це призводить до появи лінії Фано у пропусканні [5].

2.3. Складна шарувата структура

У разі складної підкладки, що описується коефіцієнтами відбиття R_p і R_s , можна безпосередньо скористатися виразом (4), отримавши

$$\frac{|R_p|+|R_s|}{|R_p||R_s|} \delta\Psi + i\delta\Delta = \frac{i\pi}{n_0 \cos\varphi_0 \lambda} \left[\left(\frac{1}{R_p} + R_p \right) \left(\varepsilon_f \cos^2 \varphi_0 - \varepsilon_0 + \frac{\varepsilon_0^2}{\varepsilon_f} \sin^2 \varphi_0 \right) + \left(\frac{1}{R_s} + R_s \right) \left(\varepsilon_f - \varepsilon_0 \right) + 2 \left(\varepsilon_f - 2\varepsilon_0 + \frac{\varepsilon_0^2}{\varepsilon_f} \right) \sin^2 \varphi_0 \right] \quad (15)$$

Зрозуміло, що аналіз спектральної та кутової поведінки коефіцієнтів відбиття для довільної шаруватої системи з досить товстими плівками неможливий. Навіть якщо матеріали, що складають систему, не мають дисперсії, інтерференційні смуги модулюють спектральну та кутову поведінку реальної та уявної частин коефіцієнтів відбиття. Однак або у випадку структури з досить

тонкими плівками, коли інтерференційні смуги не виражені або якась інша комбінація параметрів можливі деякі загальні висновки.

Якщо і R_p , і R_s дійсні, ситуація якісно схожа на обговорену для випадку прозорої діелектричної підкладки. Ми знову маємо модуляції кута Ψ уявними частинами прямої та зворотної діелектричної функції плівки, а для кута Δ така модуляція визначається дійсними частинами прямої та зворотної діелектричної функції плівки. Отже, ми знову маємо структури на резонансній частоті та на частоті зміщеного «резонансу». Обговорення їх відносного внеску зараз неможливе, але зауваження, що внесок зі зміщеним «резонансом» може бути більш вираженим при більших кутах падіння, що було приховано раніше явною кутовою поведінкою коефіцієнтів відбиття для чистої поверхні.

Другий випадок, який можна проаналізувати, впливає із включення обох коефіцієнтів відбиття до (15) у комбінації $(a+1/a)$. Для комплексних величин ми можемо переписати такий вираз, як

$$a + \frac{1}{a} = \frac{a'(|a|^2+1) + ia''(|a|^2-1)}{|a|^2} \quad (16)$$

Отже, якщо модуль комплексної величини близький до одиниці, така сума є майже дійсною. Таким чином, якщо наша складна система має сильний оптичний контраст і демонструє майже повне відбиття, ми повертаємося до ситуації з дійсними коефіцієнтами відбиття.

2.4. Анізотропна плівка

Розглянемо тепер випадок анізотропної плівки. Щоб зробити задачу наочною, обмежимося розглядом симетричного випадку двозаломлення, а саме двовісної плівки, що належить до орторомбічної системи з її головними вісями заломлення та поглинання, що співпадають і спрямовані вздовж геометричних осей Декартової системи координат $(X, Y$ і $Z)$ де X і Y визначають площину поверхні, а X і Z визначають площину падіння. Використання стандартних виразів для коефіцієнтів відбиття для анізотропної плівки [1]

$$r_{pp} = \frac{n_{fx} \cos \varphi_0 - n_0 \cos \varphi_{fz}}{n_{fx} \cos \varphi_0 + n_0 \cos \varphi_{fz}}, \quad \beta_p = 2\pi \frac{d}{\lambda} n_{fx} \cos \varphi_{fz}$$

$$r_{ss} = \frac{n_0 \cos \varphi_0 - n_{fy} \cos \varphi_{fy}}{n_0 \cos \varphi_0 + n_{fy} \cos \varphi_{fy}}, \quad \beta_s = 2\pi \frac{d}{\lambda} n_{fy} \cos \varphi_{fy} \quad (17)$$

де, як зазвичай, із закону Снеліуса

$$\cos \varphi_{fi} = \sqrt{1 - \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_{fi}} \sin^2 \varphi_0} \quad (18)$$

ми можемо з (4) та (5) отримати для будь-якої відбиваючої системи

$$\frac{|R_p| + |R_s|}{|R_p||R_s|} \delta\Psi + i\delta\Delta = \frac{i\pi}{n_0 \cos \varphi_0 \lambda} \frac{d}{\lambda} \left\{ \varepsilon_{fx} \cos^2 \varphi_0 \left[\left(\frac{1}{R_p} + R_p \right) - 2 \right] + \frac{\varepsilon_0^2}{\varepsilon_{fz}} \sin^2 \varphi_0 \left[\left(\frac{1}{R_p} + R_p \right) + 2 \right] + \varepsilon_{fy} \left[\left(\frac{1}{R_s} + R_s \right) + 2 \right] - \varepsilon_0 \left[\left(\frac{1}{R_p} + R_p \right) + \left(\frac{1}{R_s} + R_s \right) + 4 \sin^2 \varphi_0 \right] \right\} \quad (19)$$

Цей вираз демонструє, що якщо резонанси повздожніх складових діелектричної функції плівки ε_x та ε_y проявляються як модуляція еліпсометричних кутів початкової підкладки на резонансній частоті, то резонанс поперечної складової ε_z проявляється зі зміщеною частотою як йшлося про вираз (11). Усі попередні обговорення довільної багат шарової відбиваючої системи також безпосередньо застосовуються тут.

У випадку єдиної тонкої плівки на чистій підкладці ми можемо отримати з (19) аналог (6) для випадку двозаломлюючої плівки

$$\frac{|R_p| + |R_s|}{|R_p||R_s|} \delta\Psi + i\delta\Delta = 4\pi i \frac{d}{\lambda} \frac{n_0 \cos \varphi_0 \sin^2 \varphi_0}{\varepsilon_1 \cos^2 \varphi_0 - \varepsilon_0 \cos^2 \varphi_1} \left(\varepsilon_{fx} \frac{\cos^2 \varphi_1}{\sin^2 \varphi_0} + \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_1}{\varepsilon_{fz}} - \varepsilon_0 - \varepsilon_1 \right) - 4\pi i \frac{d}{\lambda} \frac{n_0 \cos \varphi_0}{\varepsilon_1 - \varepsilon_0} \varepsilon_{fy} \quad (20)$$

Цей вираз прямо демонструє одну специфічну особливість. Якщо компоненти діелектричної функції, які знаходяться в площині падіння ε_x і ε_z проявляються в резонансі і на зсунутій частоті, відповідно, як це обговорювалося для ізотропної плівки, кутова залежність прояву діелектричної функції компонент ε_y є іншою. Незалежно від кута падіння еліпсометричний кут Ψ модулюється лише мінімумом на резонансній частоті ε_y для діелектрика і максимумом для металу Друде з негативною діелектричною функцією підкладки. Така поведінка показано на рис. 5 для кількох кутів падіння у випадках бездисперсійного діелектрика з $n_1 = 1,45501$ та металу Друде з $\varepsilon_1 = -15,983 + i 1,04$. Остання близька

до золоті діелектричної функції приблизно при 1,8 eV. Енергії резонансу складають 2eV, 2.5eV та 3eV для ϵ_x , ϵ_z та ϵ_y відповідно. Для всіх резонансів амплітуди та діелектрична проникність на нескінченній частоті є одиницями та загасанням $\gamma=0,1\text{eV}$.

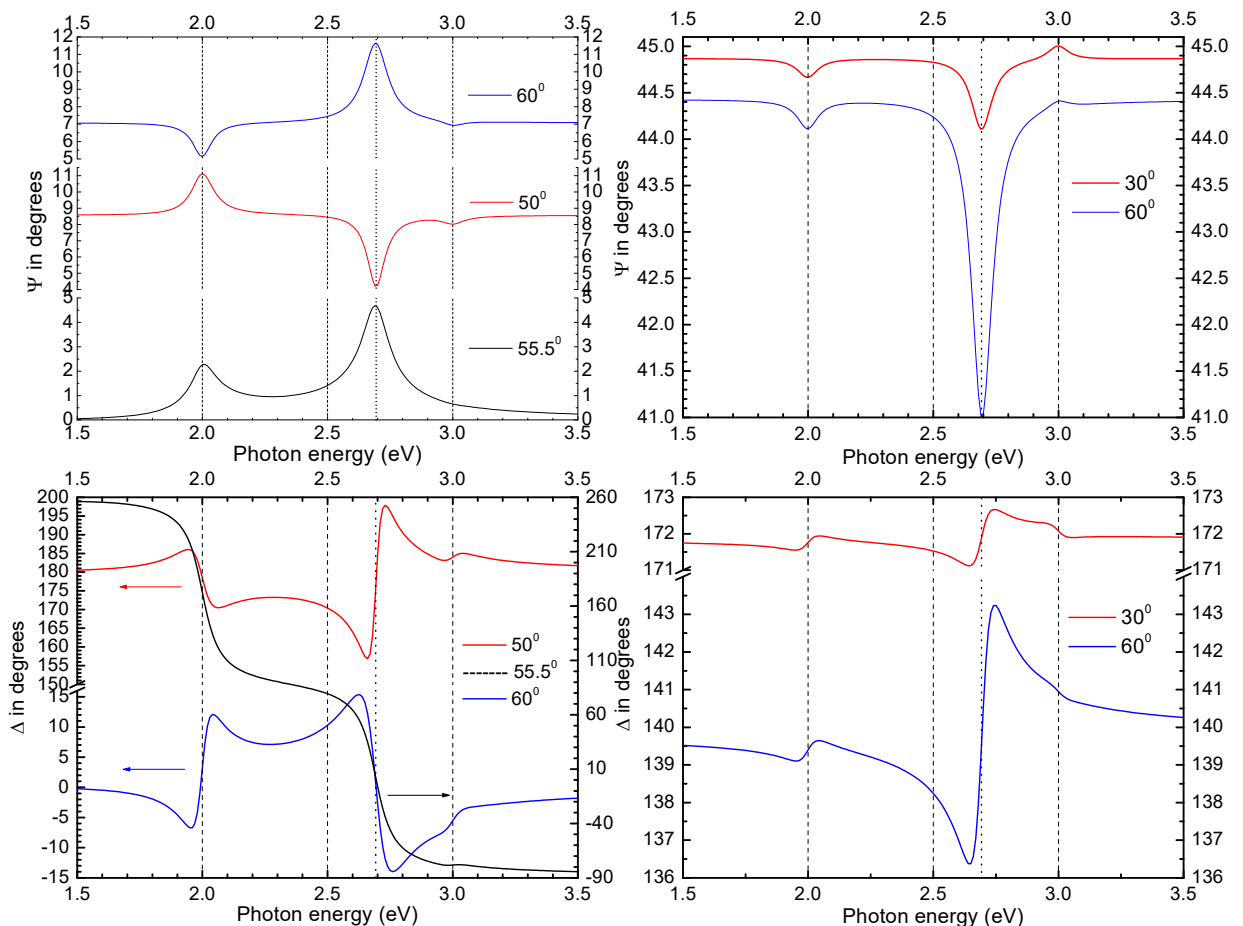


Рисунок 5 – Модуляція еліпсометричних кутів резонансами анізотропної плівки. Ліва колонка для діелектричної а права для золоті підкладки.

Однак, як видно у лівій колонці, модуляція на частоті резонансу ϵ_y зникає під кутом Брюстера для діелектрика. Це можна пояснити обговорюваною для ізотропного випадку нечутливістю еліпсометричних кутів під кутом Брюстера до малих змін коефіцієнта відбиття для s-поляризації, оскільки ця зміна дасть корекцію наступного порядку малості.

У випадку металу, як показано у правій колонці, від'ємне значення діелектричної функції підкладки змінює знак модуляції еліпсометричних кутів

резонансами ε_z та ε_y , як це обговорювалося для ізотропного випадку. Оскільки єдина кутова залежність модуляції від ε_y визначається косинусом кута падіння, її значення зменшується при збільшенні кута падіння, що краще помітно для металеві підкладки.

На відміну від ізотропного випадку, всі резонанси проявляються лише однією особливістю для кожної компоненти, а поперечний резонанс ε_z проявляється на зміщеній відповідно до (11) частоті по відношенню до реальної резонансної частоти, оскільки всі поправки є лише оберненопропорційними до ε_z .

2.5 Загальний аналіз та ефект Беремана

Таким чином, як для діелектричних підкладок, так і для сильно відбиваючих підкладок чи структур нанесена плівка модулює еліпсометричний кут Ψ уявною частиною діелектричної функції плівки, тоді як еліпсометричний кут Δ - дійсною частиною. Однак, окрім модуляції за прямим значенням відповідної частини діелектричної функції плівки, існує модуляція тією ж частиною діелектричної функції, поділена на квадрат модуля діелектричної функції плівки. Для випадку Лоренцівського резонансу діелектричної функції цей другий член модулює еліпсометричні кути, подібно до другого резонансу зі зміщеною частотою. Взаємодія параметрів резонансу визначає, чи розділені чи перекриваються модуляції на цих двох частотах. Знак модуляції визначається підкладкою, а для діелектрика цей знак змінюється на куті Брюстера.

Аналіз випадку анізотропної плівки показує, що «подвоєння» резонансної модуляції у випадку ізотропної плівки знімається, і кожен компонент анізотропної діелектричної функції модулює еліпсометричні кути лише на одній частоті. Резонанси повздовжніх компонент модулюють еліпсометричні кути на резонансних частотах, тоді як резонанс поперечної складової модулює еліпсометричні кути на зміщеній частоті. Це можна пояснити тим, що оптичний відгук плівок прямо пропорційний повздовжнім компонентам діелектричної функції плівки і зворотно пропорційний поперечній, що, в свою чергу, є наслідком граничних умов Максвелла. Така поведінка пояснює ефект Беремана,

оскільки на зсунутій частоті дійсна частина діелектричної функції плівки занулюється, тобто з граничних умов для компоненти поля перпендикулярній поверхні виходить, що завдяки існуючій уявній частині діелектричної функції таке поле в матеріалі набуває зсув фази на $\pi/2$, що, як і в пропусканні [5], відбивається в коефіцієнті відбиття в р-поляризації і в еліпсометрії та назване ефектом Беремана.

3 Виготовлення наноструктур та виміри

Схема послідовних кроків виготовлення структур впорядкованих циліндричних наночастинок за допомогою електронно-променевої літографії на підкладці з додатковим шаром золота відокремленим від наночастинок ізолюючим діелектричним прошарком показана на Рис. 6а. На Рис. 6б показано зображення в скануючому електронному мікроскопі однієї з отриманих структур з періодом 150 нм.

Виготовлення структур включає в себе послідовне нанесення шарів на підкладку термічним випаровуванням для металів, нанесенням атомарних шарів для Al_2O_3 та спін-коатінгом для РММА. Останнім наноситься шар РММА, в якому за допомогою електронного променя робиться структура або впорядкованих, або, за спеціальною програмою, «випадково» розташованих отворів. Після напилення золота шар РММА видаляється залишаючи структуру з золотих наноциліндрів на поверхні.

За показаною схемою виготовлялися структури з загальним розміром 25×25 мкм як з впорядкованими в квадратну ґратку з різними періодами, так і неупорядкованими стовпчиками/дисками з різними діаметрами. Невпорядковані структури робилися з тим же заповненням поверхні наночастинками як і відповідні впорядковані.

Виміри екстинкції проводилися при нормальному падінні сфокусованого світла.

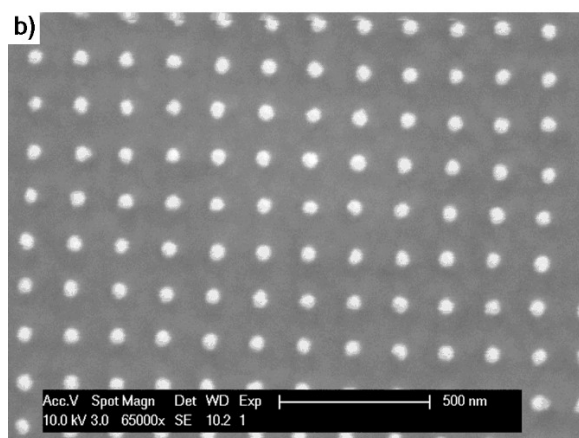
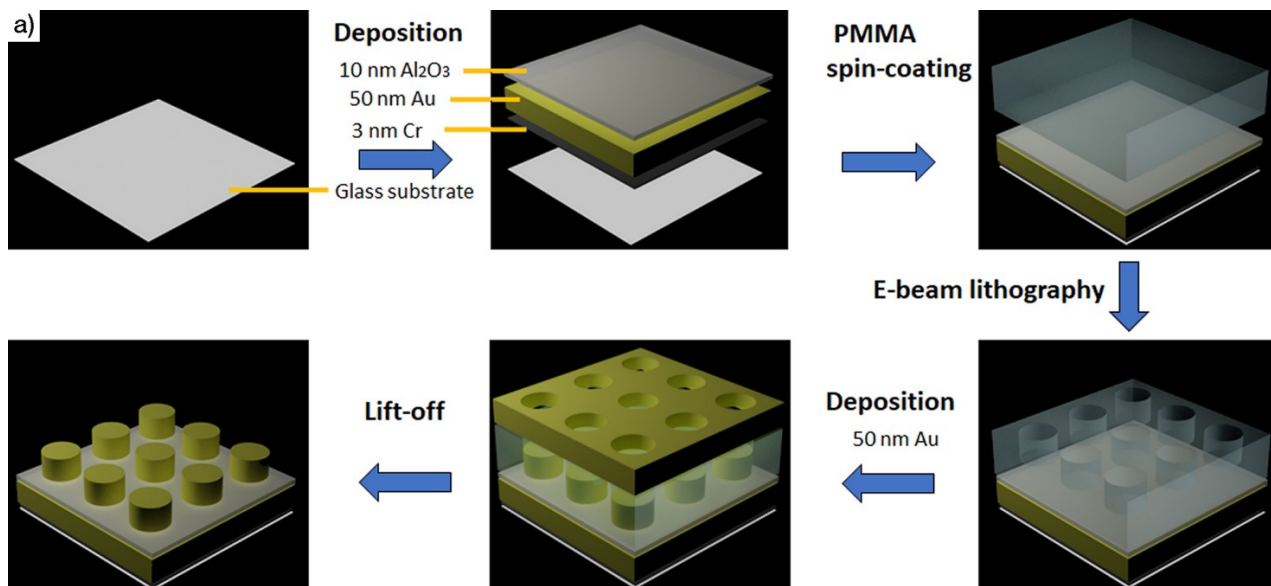


Рисунок 6 – а) схема послідовних кроків виготовлення структури з впорядкованими плазмонними наночастинками; б) Зображення за допомогою скануючого електронного мікроскопу отриманої структури з впорядкованими наночастинками.

Еліпсометрія впорядкованих ґраток та відповідних структур з «випадковим» розташуванням наночиліндрів проводилася на еліпсометрі Nanofilm EP4 (Accurion GmbH) з роздільною здатністю 1-2 мкм.

4 Експериментальні результати

Еліпсометричні дослідження чистої підкладки на еліпсометрі M2000 (Woollam Co) показали, що товщина шару золота, а відповідно і висота наночиліндрів, яка є такою ж, складає 58 нм, а прошарок Al₂O₃ має товщину 11 нм.

Оскільки моделювання головним чином проводилося для ґраток з періодом 150 нм, показані експериментальні результати обмежуються ґратками тільки з цим періодом.

Нормалізовані на спектр чистої підкладки з лише шарами Cr, Au та Al₂O₃ експериментальні спектри пропускання зразків з ґратками циліндрів різних діаметрів показані на рис. 7.

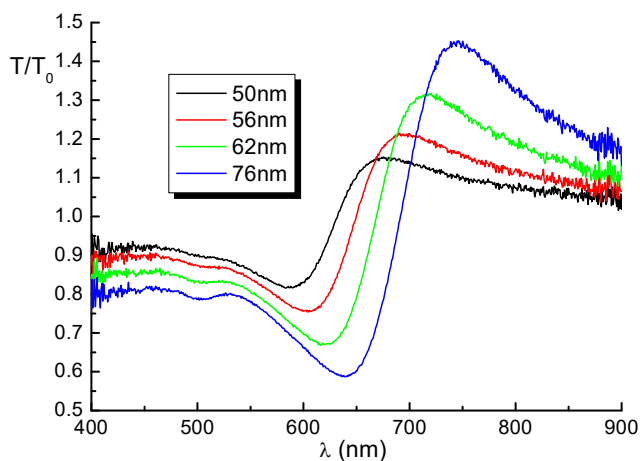


Рисунок 7 – Нормалізовані на чисту підкладку спектри пропускання ґраток наноциліндрів (висота 58 нм, діаметри 50, 56, 62 та 76 нм)

Чітка хвилеподібна форма нормалізованого пропускання добре відповідає пропусканню плівки з резонансом на золоті [5]. Оскільки пропускання вимірювалося при нормальному падінні, виміряні спектральні залежності відповідають положенню повздовжніх резонансів шарів наноциліндрів, де через асиметричну форму Фано спектральне положення резонансів розташоване на нахилах між відповідними максимумом та мінімумом [5].

Еліпсометричні спектри для впорядкованих структур з наноциліндрами діаметром 50 нм під різними кутами падіння разом зі спектрами для підкладки без наноциліндрів наведені на рис. 8.

Наведені спектри демонструють наявність принаймні двох резонансів, які можна спостерігати за мінімумами в Ψ -спектрах порівняно з гладкими спектрами для структури без наноциліндрів. Подібні спектри були виміряні для структур з іншими діаметрами, які відрізняються від показаного в основному положенням помічених мінімумів, зазначених для інших діаметрів на рис. 8 зі зсувом резонансу, видимим на ~ 530 нм, в синю область, і який зникає зі спектрів у бік коротших довжин хвиль для великих діаметрів через обмежений спектральний

діапазон; та зсув резонансу на ~ 650 нм в червону область із збільшенням діаметра наночиліндрів. Також кутова дисперсія положення мінімумів зростає зі збільшенням діаметра наночиліндрів. Варто зауважити, що ~ 650 нм - це як раз діапазон розташування поздовжніх резонансів структур наночиліндрів, зображених на рис. 7.

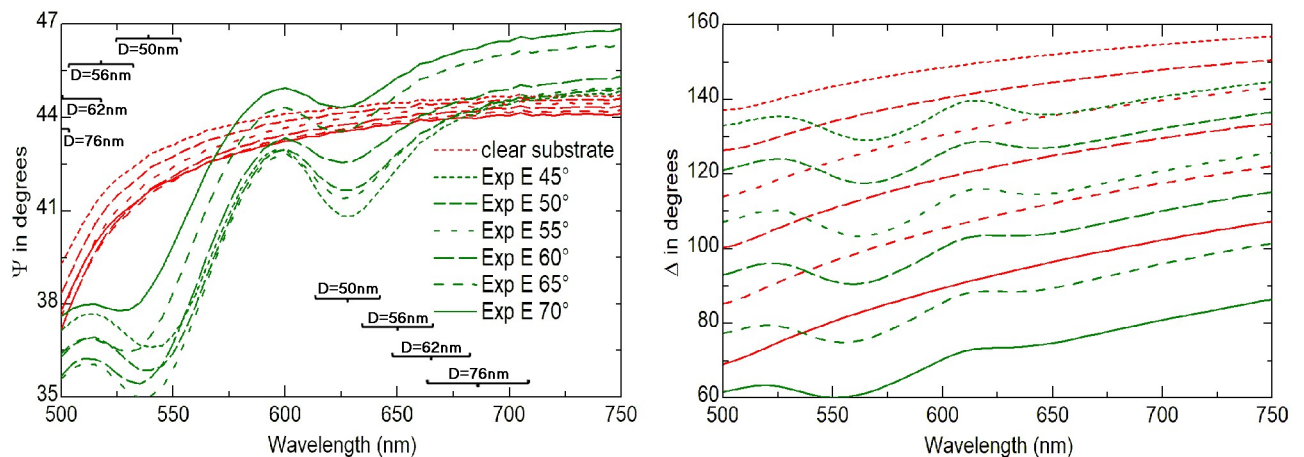


Рисунок 8 – Еліпсометричні спектри структури з наночиліндрами діаметром 50 нм (зелені) та чистої підкладки (червоні). Також відмічено положення екстремумів для структур з іншими діаметрами.

5 Оптичні властивості правильної решітки нано/мезо-частинок на підкладці

Щоб мати можливість обговорити експериментальні результати, необхідно розглянути оптичні властивості правильної решітки частинок на підкладці. У нашому випадку ми маємо квадратні решітки золотих чиліндрів з віссю перпендикулярно до поверхні шаруватої структури скло-Cr-Au-Al₂O₃. Дипольний момент \mathbf{P} , створений у наночастинці, визначається її тензором поляризуємості $\hat{\alpha}$ та векторним локальним полем \mathbf{E}_{loc} у положенні наночастинки, як

$$\mathbf{P} = \hat{\alpha} \mathbf{E}_{loc} = \hat{\alpha} (\mathbf{E}_{ext} + \mathbf{E}_{neighb} + \mathbf{E}_{substr}) \quad (21)$$

де локальне поле \mathbf{E}_{loc} складається із зовнішнього збуджуючого поля \mathbf{E}_{ext} , поля, породженого усіма іншими сусідніми диполями \mathbf{E}_{neighb} , та поля підкладки, поляризованої усіма наночастинками \mathbf{E}_{substr} . Оскільки всі додаткові поля породжуються самими наночастинками, всі такі поля можна врахувати

перенормовуючи поляризуємость. Розглянемо крок за кроком різні частини цього рівняння, поєднуючи різні існуючі підходи. Це необхідно для визначення впливу дипольних взаємодій на нашу конкретну структуру.

5.1 Поляризація мезоскопічного циліндра

Не існує жодного аналітичного виразу для поляризуємості циліндрів, за винятком випадку нескінченно довгих циліндрів. Існували деякі підходи до його визначення [28], але в основному використовується чисельне моделювання для визначення резонансів циліндричних частинок і нанострижнів. Інший підхід полягає в тому, щоб замінити циліндр сфероїдом, оскільки було показано [29], що різниця в поляризації цих фігур з однаковим об'ємом та співвідношенням сторін відносно невелика.

Відмінність оптичних властивостей еліпсоїдів від сфер, ймовірно, вперше було розглянуто в [30]. В електростатиці тензор поляризованості еліпсоїда діагональний у власних осях еліпсоїда і визначається за [31]

$$\alpha_j = \frac{V}{4\pi} \frac{\epsilon_m - \epsilon_a}{\epsilon_a + L_j(\epsilon_m - \epsilon_a)} \quad (22)$$

де $V = \frac{4\pi}{3}abc$ -об'єм еліпсоїда, a , b і c -половини довжин вісей, ϵ_m – це діелектрична функція матеріалу еліпсоїду, ϵ_a -діелектрична функція навколишнього матеріалу, а L_j - коефіцієнт деполіризації вздовж відповідної осі. Тотожність $L_1+L_2+L_3=1$ вірна для будь -якої форми, а для сфери всі деполіризуючі фактори вироджуються до $1/3$. Якщо сфероїд розташований так, що його вісь обертання співпадає з віссю Z , то коефіцієнт деполіризації дорівнює

$$L_z = \begin{cases} \frac{1-e^2}{e^2} \left(\frac{1}{2} \ln \frac{1+e}{1-e} - e \right) & \textit{prolate} \\ \frac{1}{e^2} \left(1 - \frac{\sqrt{1-e^2}}{e} \arcsin e \right) & \textit{oblate} \end{cases} \quad (23)$$

і ексцентриситет

$$e^2 = \begin{cases} \frac{c^2 - a^2}{c^2} & \textit{prolate} \\ \frac{a^2 - c^2}{a^2} & \textit{oblate} \end{cases} \quad (24)$$

де c - половина довжини осі Z , тоді як a - половина довжини інших осей. Інші коефіцієнти деполаризації $L_x=L_y$ можна визначити за одиничною сумою всіх трьох факторів. Значення цих деполаризуючих факторів були зведені до таблиці в [32].

Однак вираз (22) є статичним наближенням, яке може бути використано для наночастинок розміром не більше 20-30 нм. Для більших частинок, як у нашому випадку, необхідна корекція, аналогічна теорії Мі для сферичних частинок [33]. На жаль, існуючі рішення в сфероїдальній системі координат за допомогою спеціальних сфероїдальних функцій [34,35] непридатні для аналітичного застосування, більше для чисельного моделювання.

Існуючі аналітичні підходи для визначення такої корекції слідують за визначенням деполаризуючого поля для сфер [36] та використовують подібні корекції, як для сфероїдів [37,38]. Загальний аналіз такого підходу та додаткові виправлення наведені в [39]. Відповідно до цього міркування виправлена динамічна поляризація сфероїда дорівнює

$$\alpha_j^+ = \frac{\alpha_j}{1 - \frac{k_0^2}{l_j} D_j \alpha_j - i \frac{2k_0^2}{a} \alpha_j} \quad (25)$$

де α_j - статична поляризованість (22), $k_0=2\pi\sqrt{\epsilon_a}/\lambda$ - хвильовий вектор на довжині хвилі λ , l_j - половина довжини відповідної осі, а D_j - додатковий динамічний геометричний коефіцієнт, який дорівнює [39]

$$D_z = \frac{3}{4} \begin{cases} \frac{1+e^2}{1-e^2} L_z + 1 & 2 \frac{l_z}{l_{xy}} D_{x,y} + D_z = \begin{cases} \frac{1}{2e} \ln \frac{1+e}{1-e} & \text{prolate} \\ \frac{\sqrt{1-e^2}}{e} \arcsin e & \text{oblate} \end{cases} \end{cases} \quad (26)$$

Дійсна та уявна частини статичної (22) та динамічної (25) поляризованостей, розрахованих для геометричних параметрів циліндрів нашого зразка та діелектричної функції для тонкоплівкового золота з бази даних матеріалів програмного забезпечення WVASE, представлені на рис. 9 для повздовжньої (паралельна поверхні) та поперечної (перпендикулярна до поверхні) поляризації.

Тут і далі x' та x'' визначають дійсну та уявну частини x відповідно.

Щоб наочно продемонструвати форму спектра навколо резонансів (особливо для поздовжніх резонансів), розрахунки тут і далі були проведені для більш широкого спектрального діапазону, ніж використовується при вимірах. Поляризуємість розраховується для наночиліндрів висотою 58 нм і діаметром 50, 56, 62 і 76 нм. Оскільки поляризуємість пропорційна об'єму наночастинки, які різняться в 2,5 рази, поляризуємості, показані тут і далі, нормуються на об'єм відповідної частинки і є безрозмірними.

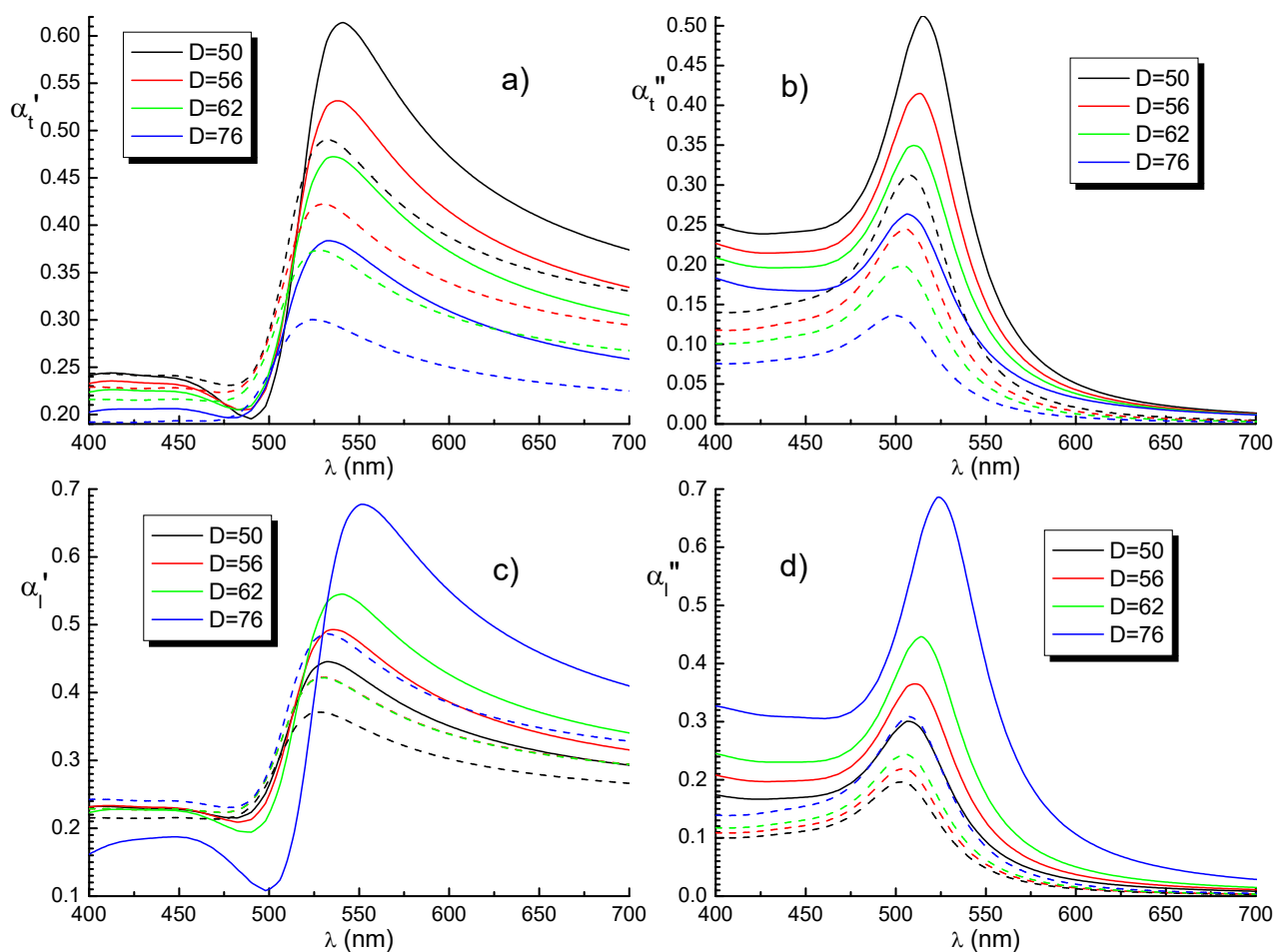


Рисунок 9 – Розраховані дійсні (а, с) та уявні (b, d) частини поперечної (а, b) та поздовжньої (с, d) поляризуємості чотирьох циліндрів з різними діаметрами, нормалізованими на їх об'єм. Статична поляризація (22) - штрихові і динамічна поляризація (25) - суцільні лінії.

Динамічна поляризуємість досліджуваних циліндрів (5), відрізняється не більше ніж у два рази від статичних поляризуємості (2), для наших розмірів.

Корекція за рахунок розміру призводить до невеликого зсуву в червону область у всіх випадках. З іншого боку, поведінка поперечної поляризації α_t та поздовжньої α_l протилежна. Збільшення діаметра циліндрів призводить до невеликого червоного зсуву поздовжньої поляризованості, як це відомо при збільшенні розмірів наночастинки [33], але до синього зсуву поперечної поляризованості, внаслідок зростання поля деполяризації у випадку більш товстих циліндрів однакової довжини. Крім того, через зростання деполяризуючого поля для поперечної поляризованості, амплітуда цієї поляризованості зменшується зі збільшенням діаметрів, тоді як амплітуда поздовжньої поляризованості зростає зі збільшенням діаметра, що є справедливим і для ненормалізованих поляризованостей. Видима асиметрія поляризованості пояснюється збільшенням затухання внаслідок переходу d-електронів у золоті для енергій вище 2,5 eV (496 нм) у діелектричній функції на коротших довжинах хвиль.

5.2 Ренормалізація поляризованості підкладкою

Проблему диполя розташованого біля поверхні розглядав ще Зоммерфельд [40]. Відомо, що будь-який диполь, розташований біля границі з іншим середовищем, поляризує це середовище своїм власним полем. Поляризоване середовище, в свою чергу, створює поле, яке додатково поляризує диполь. Однак математичний опис цього процесу є досить складним, оскільки дипольне поле має просте представлення в реальному просторі, тоді як поле, відбите поверхнею, описується у оберненому k-просторі за допомогою коефіцієнтів відбиття Френеля. Отже, чисельні розрахунки включають розклад Вейля дипольного поля на плоскі хвилі [41], їх відбиття поверхнею та підсумовування всіх відбитих хвиль [42], що є досить складним процесом.

Існує ще один статичний підхід, коли поле поляризованого середовища апроксимується полем диполя зображення, розташованого симетрично до початкового відповідно до межі розподілу та має значення $\pm \frac{\epsilon_2 - \epsilon_a}{\epsilon_2 + \epsilon_a} P$ де P - значення початкового диполя, ϵ_2 і ϵ_a - діелектричні функції другого середовища та навколишнього середовища диполя, а + застосовується для поперечного та - для

повздожнього диполя відповідно [31]. Такий вплив другого середовища/підкладки можна пояснити перенормівкою поляризуємості диполя. У разі точкоподібного диполя, відокремленого від поверхні підкладки на відстань Z , ця перенормована поляризуємість дорівнює [31]

$$\alpha^* = \frac{\alpha^+}{1 - \frac{\vartheta}{\varepsilon_s \varepsilon_a} \alpha^+ \beta}, \quad \beta = \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_a}{\varepsilon_s + \varepsilon_a} \quad (27)$$

Де α^+ - початкова поляризуємість диполя, $\vartheta = 1$ для повздожнього та $\vartheta = 2$ для поперечного диполя, ε_s та ε_a - діелектричні функції підкладки та навколишнього середовища відповідно, а β називається статичним коефіцієнтом відбиття.

У нашому випадку у нас немає ані точкоподібних частинок, ані однорідної підкладки. Однак ідея диполя зображення є робастною. Існують більш коректні підходи [43-45] до розв'язання проблеми у випадку стратифікованих середовищ, які базуються на тому, що стандартні коефіцієнти відбиття Френеля для обох поляризацій (s або p), які є функціями повздожнього імпульсу q і частоти ω ,

$$r_{ij}^s = \frac{k_z^i - k_z^j}{k_z^i + k_z^j}, \quad r_{ij}^p = \frac{\varepsilon_j k_z^i - \varepsilon_i k_z^j}{\varepsilon_j k_z^i + \varepsilon_i k_z^j} \quad (28)$$

мають область визначення як для радіаційних $k_{\parallel} < \sqrt{\varepsilon_a} \omega/c$ так і так і для затухаючих $k_{\parallel} > \sqrt{\varepsilon_a} \omega/c$ мод [45,46]. Хвильовий вектор k та його поперечна складова у будь-якому середовищі визначаються як

$$k = \sqrt{\varepsilon_a} \omega/c = 2\pi \sqrt{\varepsilon_a} / \lambda, \quad k_z^i = \sqrt{k^2 \varepsilon_i - k_{\parallel}^2} \quad (29)$$

Легко показати, що при $k_{\parallel} \rightarrow \infty$, $r^p \rightarrow \beta$ з рівняння (27).

Відомо, що розсіювання світла об'єктом обмеженого розміру зміщує хвильовий вектор розсіяного світла, що є досить простим поясненням основних властивостей оптики ближнього поля [47]. Отже, наші циліндри з діаметром D генерують повздожній хвильовий вектор [48]

$$k_{\parallel} = 2\pi/D \quad (30)$$

Коефіцієнт відбиття для будь-якої шаруватої структури можна рекурентно обчислювати за допомогою стандартного виразу [1]

$$r_{ijm} = \frac{r_{ij} + r_{jm} \exp(2id_j k_z^j)}{1 + r_{ij} r_{jm} \exp(2id_j k_z^j)} \quad (31)$$

де m може визначати не лише напівнескінченне середовище, а й шарувату структуру, для якої коефіцієнт відбиття r_{jm} обчислюється рекурентно за тим самим виразом (11) починаючи з першого напівнескінченного середовища. Цей коефіцієнт відбиття замінює β у (27), визначаючи самодію диполя p об'єкта розміром D на шарувату структуру як взаємодію з диполем зображення зі значенням $\pm rp$ з $+$ для поперечного та $-$ для повздовжнього диполя.

Варто зауважити, що для точкового диполя збільшення уявного поперечного хвильового вектора призводить до нульової експоненти в (31), тому коефіцієнт статичного відбиття в цьому випадку визначає лише матеріал верхнього шару.

Треба зазначити, що обговорюваний тут формалізм є емпіричним поєднанням точково-дипольного підходу з розсіянням на об'єктах кінцевого розміру. Насправді, якщо розгляд диполя перед підкладкою розглядався протягом тривалого часу після Зоммерфельда [40], наскільки нам відомо, немає спроб аналітично розглянути об'єкт скінченного розміру перед підкладкою. Справедливість підходу тут підтверджується малою товщиною нашої розділової плівки Al_2O_3 . У цьому випадку всі інтерфейси нашої підкладки знаходяться в області ближнього поля, і хвилі, що поширюються, можна опустити. Будь-який об'єкт скінченного розміру розсіює світло, створюючи цілий спектр хвильових векторів, але найбільш ефективно розсіювання визначається рівнянням (30) [49], тому обмежимо наше наближення основною складовою розсіяного поля. Якщо розділяюча плівка буде товстою, хвилі, що поширюються, слід враховувати також у самодії частинок. Наприклад, інтерференція підсилює як самодію частинок, так і взаємодії між ними, що призводить до посилення деполаризації [50].

Чисельні результати для коефіцієнтів відбиття нашої шаруватої структури для даних та менших діаметрів D циліндрів разом із значеннями β згідно з (27), розраховані для золота та Al_2O_3 , показані на рис. 10. Діелектричні функції

матеріалів взяті з бази даних матеріалів програмного забезпечення WVASE. Параметри золота були взяті для тонкоплівкового золота.

Видно, що статичний коефіцієнт відбиття золота сильно відрізняється від коефіцієнтів відбиття всієї структури, тоді як для найменшого діаметра (близького до точкового об'єкта) коефіцієнт відбиття близький до коефіцієнта статичного відбиття верхнього шару Al_2O_3 , показаний внизу обох панелей на рис. 10. Як згадано вище, це легко пояснюється великою уявною частиною k_z -векторів для точкових об'єктів, що сильно послаблює вплив основної структури в рівнянні (31). Однак вплив золотої плівки стає все більш вираженим при збільшенні діаметрів циліндрів.

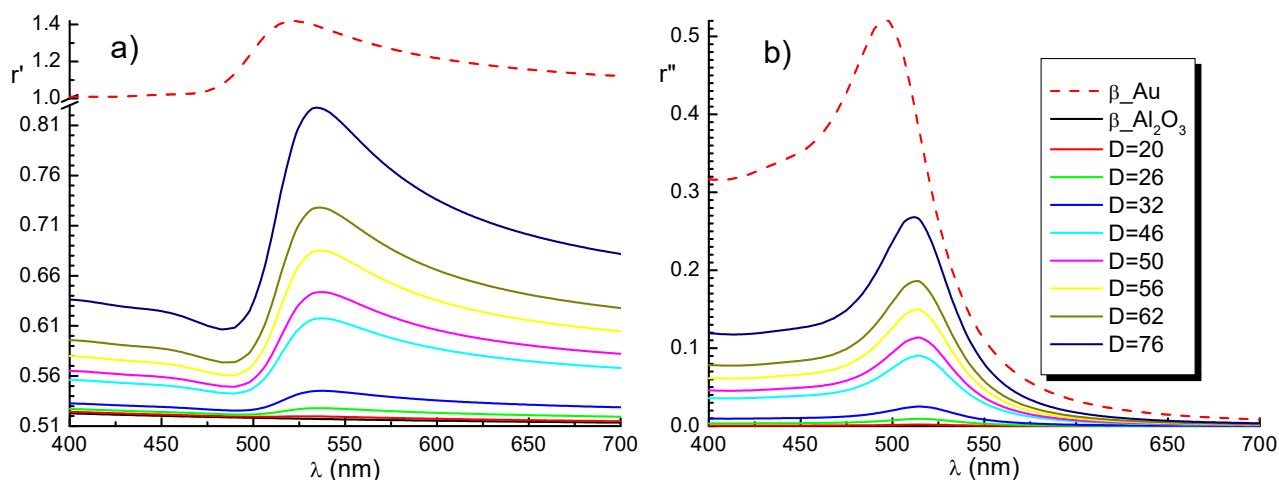


Рисунок 10 – Дійсна (а) та уявна (б) частина коефіцієнтів відбиття для циліндрів різного діаметру на структурі скло-Cr-Au- Al_2O_3 .

З цими коефіцієнтами відбиття, ми можемо обчислити перенормовані поляризованості окремих циліндрів на поверхні, які представлені на рис. 11.

Оскільки для обох поляризацій будь-який диполь притягується підкладкою, то резонанси такого диполя мають червоне зміщення порівняно з ізольованим диполем. Більше того, оскільки взаємодія поперечного диполя з підкладкою сильніша за повздовжнє, його зсув також більший, що добре видно на рис. 11. Що стосується взаємного положення перенормованих резонансів, то знову-таки повздовжні резонанси відносно зміщені в червону область зі збільшенням

діаметра, а поперечні - лише трохи зсуваються в червону область, за винятком циліндра з найбільшим діаметром, який помітно зміщений. Цікаво зазначити, що перенормовані поляризованості, розраховані для наночиліндрів з меншими розмірами, демонструють зсув в синю область зі збільшенням розміру приблизно до 50 нм (трохи менше висоти циліндра). Також, порівнюючи поляризованість вільних наночиліндрів (штрихові) та наночиліндрів на підкладці (суцільні), помітно збільшення амплітуди як поперечного, так і поздовжнього резонансів. Це пояснюється тим, що поле від поверхневої поляризації орієнтоване вздовж збуджуючого поля для обох поляризацій. Таким чином, реакція наночастинки сильніша, ніж для вільної частинки без підкладки.

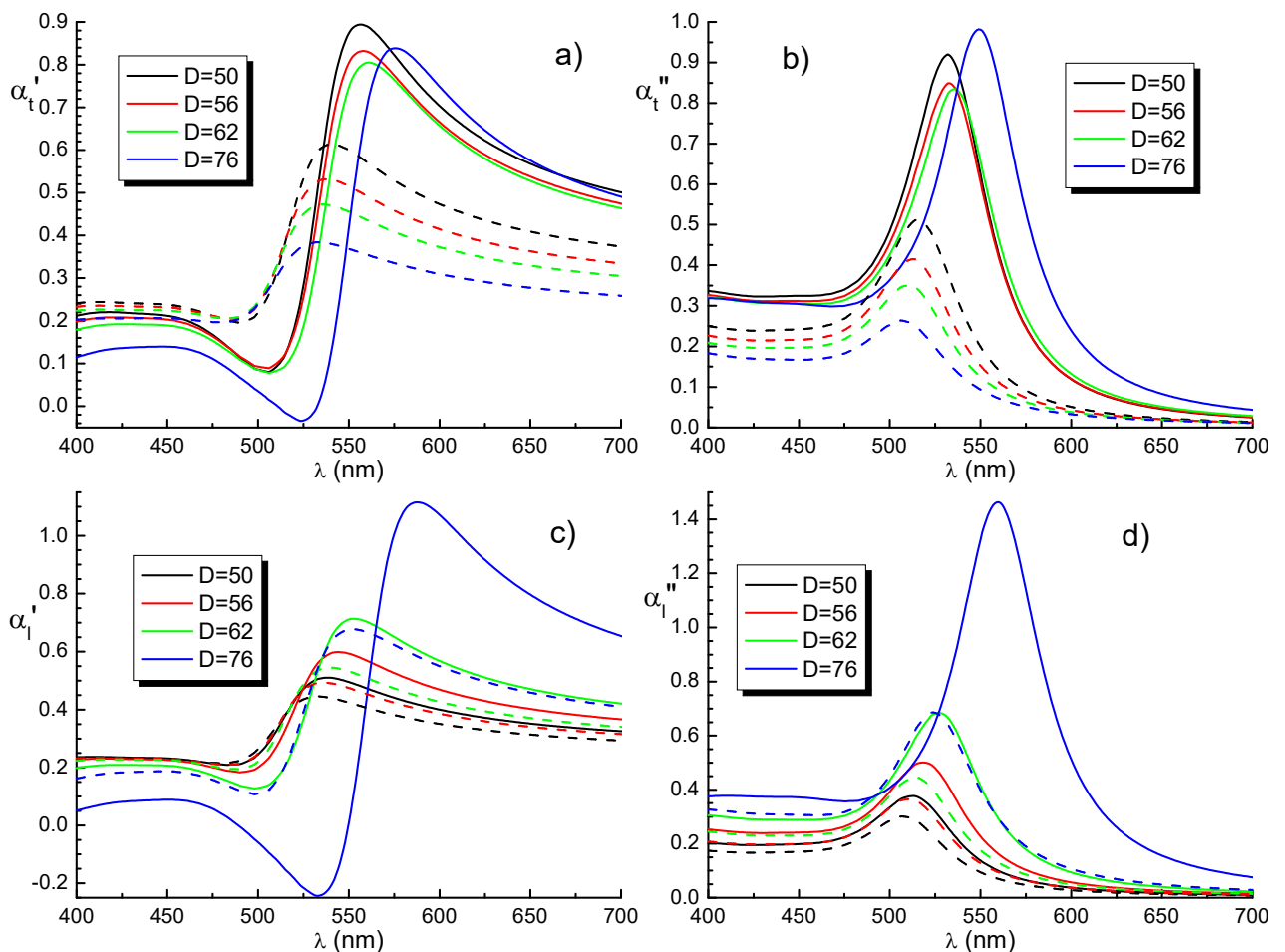


Рисунок 11 – Розраховані дійсні (а, с) та уявні (b, d) частини поперечної (а, b) та поздовжньої (с, d) поляризованості чотирьох циліндрів з різними діаметрами, нормованими на їх об'єм на підкладці. Динамічна поляризованість (25) - штрихові

лінії та динамічна поляризуємість, перенормована підкладкою (рівняння (27) при обміні β на r) - суцільні лінії.

5.3 Вплив інших наночастинок ґратки

Якщо розглядати електромагнітні хвилі, що поширюються, як $\mathbf{E} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)$, де \mathbf{E} , \mathbf{k} і \mathbf{r} - вектори, то диполь як гармонічний осцилятор це $\mathbf{p} = \mathbf{P} \exp(-i\omega t)$, де \mathbf{P} - вектор диполю з амплітудою P та його поле [51]

$$\mathbf{E}(\mathbf{P}, \mathbf{R}) = \left\{ \left[\frac{3}{R^3} - i \frac{3k}{R^4} - \frac{k^2}{R^2} \right] (\mathbf{P}\mathbf{R})\mathbf{R} - \left[\frac{1}{R^3} - i \frac{k}{R^2} - \frac{k^2}{R} \right] \mathbf{P} \right\} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}) \quad (32)$$

де \mathbf{R} це радіус-вектор до точки спостереження, R є його довжиною, $i = \sqrt{-1}$. Цей вираз чітко демонструє, що поділ простору на область ближнього поля, тобто область, де основною частиною поля є статичне дипольне поле, пропорційне R^{-3} , і область поширення хвилі, де поле пропорційний R^{-1} , визначається відношенням відстані R до зворотного хвильового вектора $1/k = \lambda/2\pi$. Отже, якщо період нашої ґратки дорівнює 150 нм, ця відстань порівнянна зі зворотним хвильовим вектором у використовуваному спектральному діапазоні ($150 \approx 942/2\pi$), тож для розрахунку поля, створеного на відокремленому диполі усіма іншими сусідніми диполями ґратки, ми повинні використати весь вираз (32).

Визначимо декартову систему координат з віссю Z , спрямованою перпендикулярно до поверхні назовні та з нулем на поверхні, вісі X та Y , розташовані у площині поверхні та спрямовані паралельно рядам ґратки, а початок координат співпадає з положенням певного наноциліндру. Якщо ґратка подібних наночастинок нескінченна, всі їхні диполі еквівалентні. Тож, враховуючи вплив усіх інших наночастинок та підкладки на будь-яку окрему частинку, ми отримуємо той самий результат. У такому випадку ми можемо вибрати наноциліндр у початку координат як основний і розглядати поля саме на цьому наноциліндрі без втрати загальності. Якщо припустити, що диполі наночастинок розташовані в їх центрі, координати диполя цієї основної наночастинок дорівнюють $(0,0,Z)$, де Z - центр висоти над поверхнею (29 нм у нашому випадку), а також координати всіх інших диполів ґратки дорівнюють

(ja, la, Z) де a - постійна (крок) квадратної ґратки, а j і l - коефіцієнти ґратки. Поляризація підкладки моделюється ґраткою диполів зображення $\pm rp$ (“+” для поперечних та “-” для повздовжніх диполів) з координатами $(ja, la, -Z)$. Коефіцієнт відбиття r визначається виразами (28)-(31). Отже, локальне поле на основній наночастинці системи, освітленою плоскою хвилею, падаючою під кутом θ до нормалі поверхні, визначається сумою (21) з

$$\begin{aligned} E_{ext,x} &= E_{0,x} \left(1 - r_{0p} \exp(2ikZ \cos\theta) \right), \\ E_{ext,y} &= E_{0,y} \left(1 + r_{0s} \exp(2ikZ \cos\theta) \right), \\ E_{ext,z} &= E_{0,z} \left(1 + r_{0p} \exp(2ikZ \cos\theta) \right) \end{aligned} \quad (33)$$

оскільки наші диполі відокремлені від поверхні на відстань Z , а збуджуюче поле - це сума падаючої та відбитої хвиль. Стандартні коефіцієнти відбиття для обох поляризацій r_{0p} і r_{0s} [1] обчислюються рівняннями (28), (29) та (31), але з повздовжнім хвильовим вектором поля, що поширюється $k_{||} = k \sin\theta$ замість розсіяного у (30). Для інших полів ми можемо написати

$$\mathbf{E}_{neighb} = \sum_{j,l=-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{P}_{jlz}, \mathbf{R}_{jlz}) \quad (34)$$

де штрих біля суми вказує на те, що доданок для $j=l=0$ пропущено, а \mathbf{E}_{substr} - це поле, створене усіма зображеннями диполів, включаючи власне зображення, розглянуте у попередньому підрозділі

$$\mathbf{E}_{substr} = \sum_{j,l=-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{P}_{jl-z}, \mathbf{R}_{jl-z}) \quad (35)$$

де вже немає штриха, оскільки використовуються всі індекси j та l .

Відстані до диполя в початку координат $(0,0, Z)$ для обох сум дорівнюють

$$R_{jlz} = a\sqrt{j^2 + l^2}, \quad R_{jl-z} = \sqrt{4Z^2 + a^2(j^2 + l^2)} = a\sqrt{4Z^2/a^2 + j^2 + l^2} \quad (36)$$

Для нескінченного регулярного масиву, збудженого зовнішньою хвилею, усі струми або дипольні моменти на ділянках решітки рівні за величиною і мають лінійну фазову затримку відповідно до падаючої хвилі згідно з теоремою Флоке. Ця теорема для одновимірних періодичних структур впливає із розв'язання диференціального рівняння з періодичними коефіцієнтами [52]. Отже, якщо світло падає на нашу структуру під кутом θ до нормалі, а площиною падіння є площина XOZ , дипольні моменти всіх циліндрів уздовж вісі X відповідають

$$\mathbf{P}_{jl} = \mathbf{P}_{00} \exp(i k j a \sin \theta) \quad (37)$$

і всі диполі вздовж вісі Y рівні. Таким чином, ми можемо опустити для величини диполів l -індекс, визначаючи його положення вздовж вісі Y.

Перепишемо вираз для поля диполя, (32), у матричній формі.

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{x^2}{R^2} c - b & \frac{xy}{R^2} c & \frac{xz}{R^2} c \\ \frac{xy}{R^2} c & \frac{y^2}{R^2} c - b & \frac{yz}{R^2} c \\ \frac{xz}{R^2} c & \frac{yz}{R^2} c & \frac{z^2}{R^2} c - b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{pmatrix} \exp(ikR) \quad (38)$$

де x, y, z -компоненти радіус-вектора до точки спостереження \mathbf{R} і

$$c = \frac{1}{R^3} [3 - i3(kR) - (kR)^2], \quad b = \frac{1}{R^3} [1 - i(kR) - (kR)^2]$$

Цей вираз демонструє, що якщо всі диполі розташовані в деякій площині XY, для будь-якого радіус-вектору в цій площині $z=0$, а поперечна та повздовжня дипольні складові незалежні. Легко показати з (38) що для впорядкованої квадратної ґратки подібних диполів з $x=ja$ та $y=la$, X- та Y-компоненти також незалежні, що є результатом суми полів E_x з диполів з (j,l) та $(j,-l)$ та E_y з диполів у точках (j,l) та $(-j,l)$, які дорівнюють нулю у початку координат. Однак поперечна та повздовжня складові поляризації мають різні поля деполізації, що призводить до ефективної поперечної одновісної оптичної анізотропії, породженої геометрією системи. Більш того, навіть за наявності другого шару також взаємоподібних диполів зображення в одній і тій же ґратці, зміщеної від першої площини вздовж вісі Z, усі компоненти диполів також незалежні, що зберігає одновісну поперечну оптичну анізотропію. Це легко демонструється сумою полів чотирьох диполів у кожній площині з (j,l) , $(j,-l)$, $(-j,l)$ та $(-j,-l)$.

Однак, якщо величини диполів модулюється рівнянням (37), навіть для одного шару диполів усі поляризації залишаються незалежними, але деполізуючі поля для всіх них тепер різні, що призводить до двовісної ефективної оптичної анізотропії з оптичними вісями, спрямованими вздовж геометричних. Це можна зрозуміти з того факту, що зони Френеля для диполів, що генерують поле в початку координат з тією ж фазою, зараз еліптичні [53], на

відміну від кругових у попередньому випадку. Отже, різна кількість диполів уздовж вісей X та Y генерує в цьому випадку деполяризуюче поле у початку координат. Розглядаючи в цьому випадку вплив площини диполів зображення, ми можемо показати, що внаслідок позаплощинних взаємодій тепер X- та Z-компоненти поляризації стають залежними.

Поєднуючи всі попередні вирази, ми можемо тепер записати

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \alpha_l^+ & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_l^+ & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_t^+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{ext,x} \\ E_{ext,y} \\ E_{ext,z} \end{pmatrix} + \\
 &\left(\sum_{j,l=-\infty}^{\infty} \begin{vmatrix} j^2 \frac{\alpha^2}{R_{jlz}^3} c_{jly} - b_{jly} & jl \frac{\alpha^2}{R_{jlz}^3} c_{jly} & 0 \\ jl \frac{\alpha^2}{R_{jlz}^3} c_{jly} & l^2 \frac{\alpha^2}{R_{jlz}^3} c_{jly} - b_{jly} & 0 \\ 0 & 0 & -b_{jly} \end{vmatrix} \exp(ikR_{jlz}) \exp(ikja \sin\theta) + \right. \\
 &r \sum_{j,l=-\infty}^{\infty} \begin{vmatrix} b_{jl-z} - j^2 \frac{\alpha^2}{R_{jl-z}^3} c_{jly} & -jl \frac{\alpha^2}{R_{jl-z}^3} c_{jly} & j \frac{2\alpha z}{R_{jl-z}^3} c_{jly} \\ -jl \frac{\alpha^2}{R_{jl-z}^3} c_{jly} & b_{jl-z} - l^2 \frac{\alpha^2}{R_{jl-z}^3} c_{jly} & l \frac{2\alpha z}{R_{jl-z}^3} c_{jly} \\ -j \frac{2\alpha z}{R_{jl-z}^3} c_{jly} & -l \frac{2\alpha z}{R_{jl-z}^3} c_{jly} & \frac{4z^2}{R_{jl-z}^3} c_{jly} - b_{jl-z} \end{vmatrix} \exp(ikR_{jl-z}) \exp(ikja \sin\theta) \left. \right) \begin{pmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{pmatrix} \\
 &\begin{pmatrix} \alpha_l^* & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_l^* & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_t^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{ext,x} \\ E_{ext,y} \\ E_{ext,z} \end{pmatrix} + \frac{1}{\alpha^3} \left(\begin{pmatrix} A_1 & 0 & 0 \\ 0 & B_1 & 0 \\ 0 & 0 & D_1 \end{pmatrix} + r \begin{pmatrix} A_2 & 0 & E_2 \\ 0 & B_2 & 0 \\ -E_2 & 0 & D_2 \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{pmatrix}
 \end{aligned}
 \tag{39}$$

і отримати з цього рівняння нову поляризованість однієї наночастинки з урахуванням усіх дипольних взаємодій у нашій системі як відповідь на зовнішнє збуджуюче поле. У другій частині цього виразу самодія базисної частинки викликана підкладкою чітко відокремлена та включена до перенормованої поляризованості α^* замість α^+ у першій частині. Ця перенормована поляризованість відрізняється від (27) врахуванням фазової затримки у разі самодії диполя через підкладку так само, як це враховано у збуджуючому полі (33). Таке врахування затримки призводить до зменшення амплітуди перенормованих значень поляризованості за рахунок підкладки майже до рівня відбної частинки без підкладки без видимої зміни форми.

Обговорення підходів до обчислення таких ґраткових сум, а також їх збіжності представлено у Доданку 1. Розрахована поведінка коефіцієнтів A , B , D , E з рівняння (39) в залежності від a/λ показані на рис. 12.

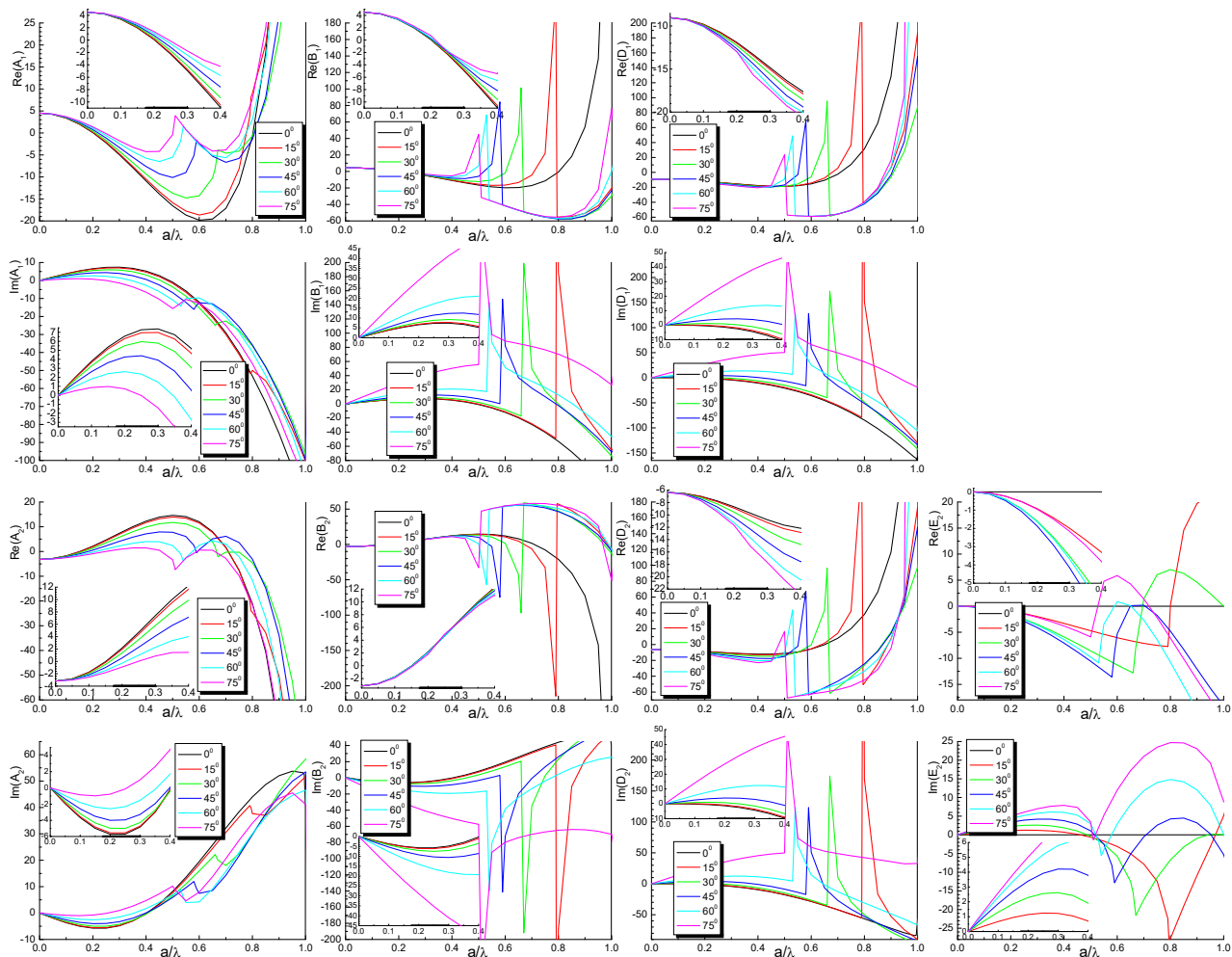


Рисунок 12 – Поведінка дійсної та уявної частин ґраткових сум

Вставки всіх панелей демонструють залежності для $a/\lambda < 0,4$, проте той факт, що уявні частини коефіцієнтів D_1 і D_2 позитивні для $a/\lambda < 0.05-0.06$, не видно навіть на цих збільшених графіках. Діапазон експериментальних значень $0.17 < a/\lambda < 0.3$ позначений жирною частиною абсциси в цих вставках.

Усі залежності демонструють подібні різкі особливості при різних значеннях a/λ залежно від кута падіння, які відсутні в [53], оскільки там враховувався лише невеликий діапазон значень a/λ .

Такі особливості відповідають аномаліям Вуда - створенню або зникненню нового порядку дифракції [28], це призводить до зростання деполяризації через посилення міжчастинкової взаємодії [54], і подібні особливості були отримані для одновимірного ланцюга диполів [55]. Оскільки ми розглядаємо ситуацію $a/\lambda < 1$, це означає, що додатковий хвильовий вектор, що генерується такою ґраткою, більший за хвильовий вектор падаючого світла. Однак у діапазоні $0.5 < a/\lambda < 1$ ґратка може генерувати -1 порядок дифракції. Розглядаючи збереження імпульсу, можна отримати, що -1 порядок дифракції виникає в площині решітки при

$$\frac{a}{\lambda} = \frac{1}{1 + \sin \theta} \quad (40)$$

і положення всіх різких особливостей на рис. 12 відповідають цій умові.

Як і в [53], для моделювання поведінки ґраткових сум в інтервалі $0.1 < a/\lambda < 0.4$, які охоплюють нашу експериментальну ситуацію, було використано поліноміальне наближення. Деякі елементи, такі як E_2 , навіть для цього діапазону вимагають полінома щонайменше третього порядку, тому він використовувався для всіх наближень, а поліноміальні коефіцієнти використовувалися для наближення ґраткових сум на будь-якій довжині хвилі.

Розв'язуючи (19) відносно дипольного моменту можна визначити поляризуємість, модифіковану міжчастинковими взаємодіями. Беручи до уваги, що X- та Z-компоненти тепер залежні, маємо

$$\tilde{\alpha}_y = \frac{\alpha_l^*}{1 - \frac{\alpha_l^*}{a^2}(B_1 + rB_2)} \quad (41)$$

$$\begin{vmatrix} \tilde{\alpha}_x & \tilde{\alpha}_{xz} \\ \tilde{\alpha}_{zx} & \tilde{\alpha}_z \end{vmatrix} = \frac{1}{Det} \begin{vmatrix} \alpha_l^* \left[1 - \frac{\alpha_l^*}{a^2}(D_1 + rD_2) \right] & r \frac{\alpha_l^* \alpha_t^*}{a^2} E_2 \\ -r \frac{\alpha_l^* \alpha_t^*}{a^2} E_2 & \alpha_t^* \left[1 - \frac{\alpha_t^*}{a^2}(A_1 + rA_2) \right] \end{vmatrix}$$

$$\text{де } Det = \left[1 - \frac{\alpha_l^*}{a^2}(A_1 + rA_2) \right] \left[1 - \frac{\alpha_t^*}{a^2}(D_1 + rD_2) \right] + r^2 \frac{\alpha_l^* \alpha_t^*}{a^6} E_2^2$$

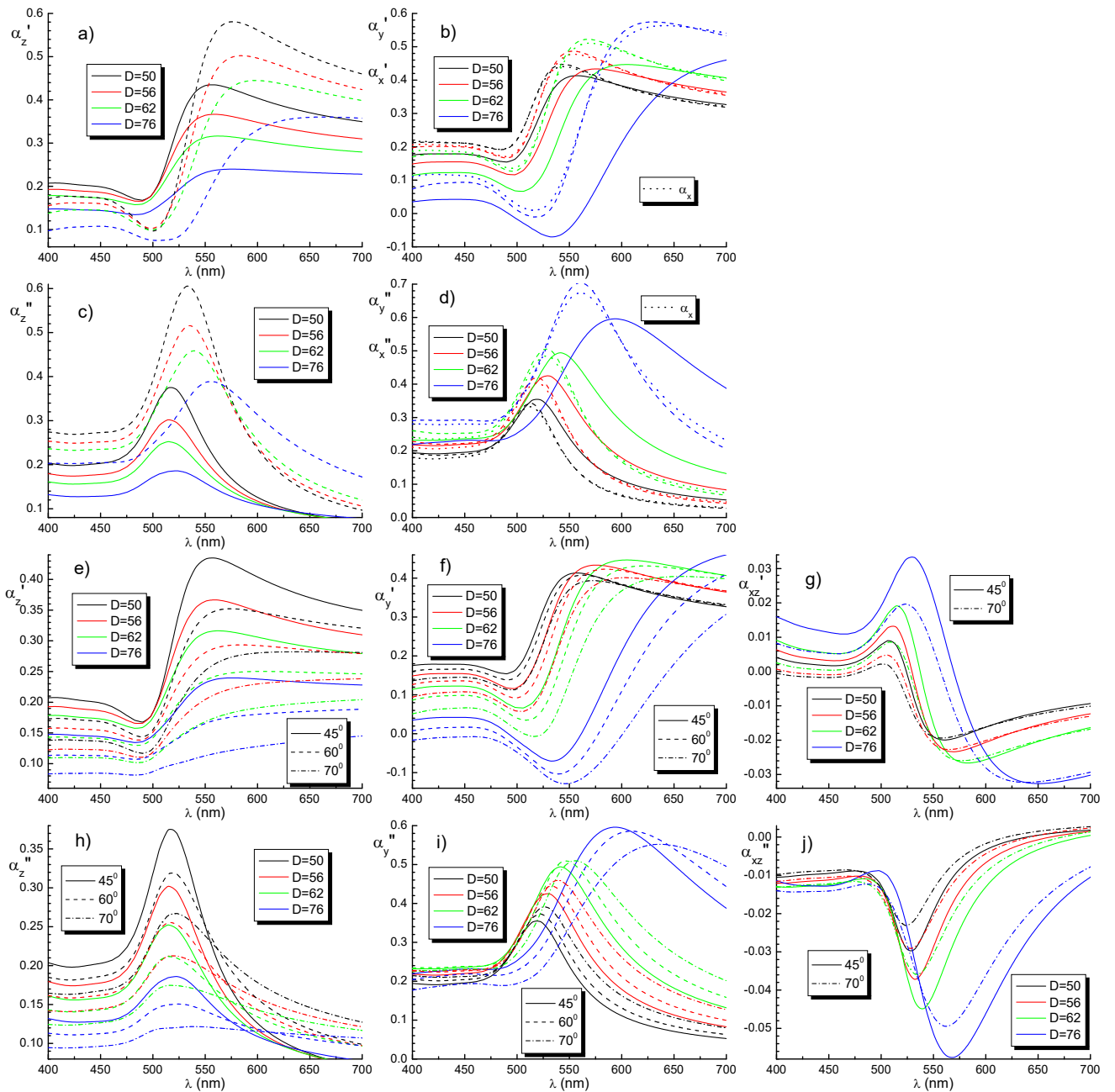


Рисунок 13 – Обчислені дійсні (а, b, e, f, g) та уявні (с, d, h, i, j) частини поляризуємості чотирьох циліндрів з різними діаметрами, нормованими на їх об'єм, з урахуванням міжчастинкових дипольних взаємодій. Поляризація одиничної частинки (27) - штрихові лінії та поляризуємість, перенормована міжчастинковими дипольними взаємодіями (41) - суцільні лінії (а-d) для кута падіння 45° . Показано залежності перенормованої поляризуємості від кута падіння (45° - суцільні лінії, 60° - штрихові лінії та 70° - штрихові пунктирні лінії) (e-h), а також для діагонального елемента α_{xz} (i, j).

Форма матриці, що з'єднує X- та Z-компоненти поляризованості, відповідає системі з оптичною активністю, яка б змінювала відбиття р-поляризованого світла. Необхідно підкреслити, що залежність ґраткових сум від кута падіння робить ці перенормовані поляризованості, а відповідно і ефективну діелектричну функцію шару з частинками, а також його двозаломлення залежними від кута падіння. Цей факт ускладнює тлумачення результатів експерименту.

Нарешті, перенормовані поляризованості відповідно до (41) для експериментальних параметрів показані на рисунку 13.

Рисунок 13 демонструє різні аспекти впливу дипольних міжчастинкових взаємодій у ґратці на кінцеву поляризованість. Спектри, наведені для окремих частинок на рис. 13 (a-d), розраховані з урахуванням фазової затримки на відміну від рисунку 11.

Сильне затухання поперечної (Z-) складової, породженої міжчастинковими взаємодіями, добре помітно, тоді як затухання повздовжніх (X- та Y-) складових є помірним. Схематичний аналіз впливу міжчастинкових взаємодій у шарі на резонанс наночастинок був зроблений у [56] для статичного випадку. У такому випадку сумарне поперечне поле інших наночастинок, що діють на кожну з них, протилежне поляризації частинок, тоді як сумарне повздовжнє поле орієнтовано вздовж поляризації частинок. Це пояснює знак ґраткових сум для цих напрямків: $D_1 = -9.03359$ і $A_1 = 4.51679 = -D_1/2$. Статичні константи A_2 і D_2 для випадку $2Z/a = 58/150$ становлять -3.17977 та -6.35915 відповідно. Це означає, що якщо для взаємодії в шарі інтерференція для поперечного та повздовжнього полів є відповідно деструктивною та конструктивною порівняно з поляризацією наноциліндра [56], вони є деструктивними для будь-якої поляризації поля від шару диполів зображення, принаймні для $2Z/a = 58/150$. Однак вплив фазової затримки в динамічному випадку, як це видно на рис. 12, змінює знак як внутрішньосферової так і інтерференції від шару зображень для повздовжніх компонент понад $a/\lambda \sim 0.2$. Оскільки у нашому випадку статичні коефіцієнти відбиття є позитивними та меншими за одиницю, а $|A_2|, |C_2| < |A_1|, |C_1|$, то загальна

сума визначається сумами в шарі. Отже, амплітуди поляризованості в обох поляризаціях зменшуються, але для поперечної поляризації їх зменшення набагато сильніше.

Зміна поляризованості з кутом падіння є сильнішою для поперечної поляризації і зростає при нахиленому падінні. Слід зазначити, що, принаймні для наших параметрів системи, практично немає кутової залежності X-компоненти поляризованості, яка тому не показана. Більше того, треба зазначити, що врахування міжчастинкових взаємодій майже не змінило значення X-компоненти поляризованості, що видно з панелей b) та d) на яких вона майже збігається з повздовжньою компонентою поляризованості для окремої частинки. Також, хоч і слабо, але ця компонента демонструє зсув максимуму в синю сторону з кутом падіння, на відміну від інших. Хоча збільшення діаметру призводить до помітного зсуву в червону сторону. Всі кутові залежності суттєво збільшуються з ростом діаметру. Що стосується недіагонального елемента α_{xz} , його значення в максимумі становить близько 15% від Z-компоненти і навіть менше порівняно з X-компонентою, тому його можна опустити далі.

Положення резонансів у випадку ґратки дещо зміщено порівняно з положенням окремих частинок в синю сторону для поперечної та червону сторону для повздовжньої поляризації відповідно, як і очікувалося [56]. Кутовий зсув для поперечної поляризації більший, оскільки ці взаємодії сильніші. Що стосується зміни положення резонансів з діаметром наноциліндрів, воно помітно зміщується в червону сторону у випадку повздовжньої поляризації при збільшенні розміру. Для поперечної поляризації ситуація не така однозначна. Практично до збігу висоти та діаметра резонанс має зсув в синю сторону (не чітко видно на показаній шкалі, але чітко видно з урахуванням менших діаметрів), тоді як після цього для більш дископодібної форми резонанс зміщується в червону сторону для більших діаметрів.

5.4 Діелектрична функція еквівалентного шару

Для стандартних розрахунків будь-якого оптичного відгуку системи з шаром наночастинок можна вважати цей шар рівномірним з ефективною

діелектричною проникністю. Були дискусії щодо значення оптичної товщини такого ефективного шару, особливо у випадку наночастинок зі змінним розміром, але для випадку подібних частинок єдиною фіксованою товщиною є геометрична товщина такого шару

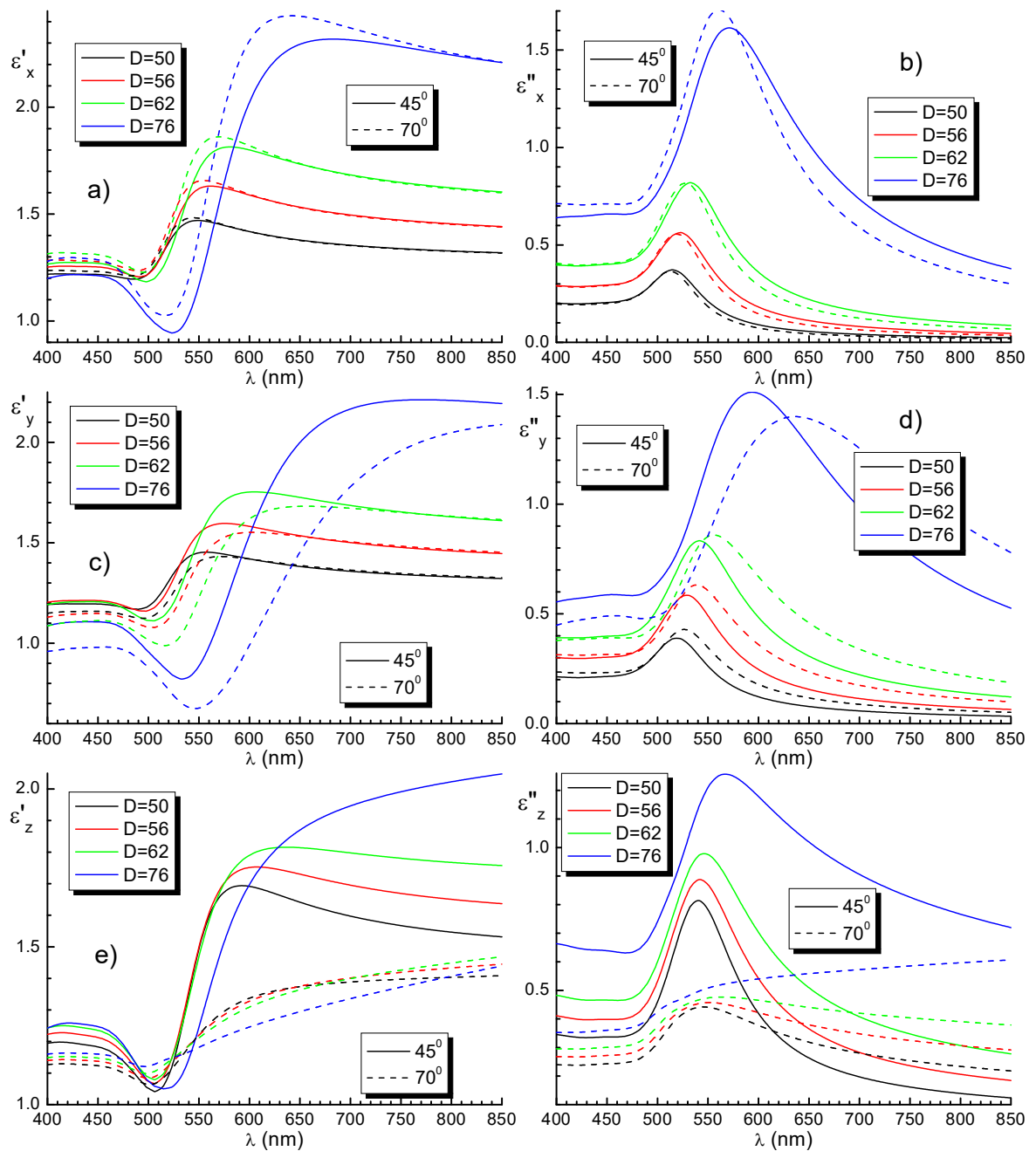


Рисунок 14 – Ефективна діелектрична функція шару з наночастинок.

Ми будемо використовувати висоту наших наночиліндрів як товщину однорідної ефективно півки.

Застосовуючи стандартні граничні умови для ефективного шару, ми можемо записати $E_l^{in}=E_l^{ext}$ та $E_t^{in}=E_t^{ext}/\varepsilon_t$, тому ми можемо записати з виразу для зміщення через дипольний момент на одиницю об'єму

$$\begin{aligned}\frac{P_l}{a^2 d} &= \frac{1}{4\pi} (\varepsilon_l - 1) E_l^{ext} = \frac{\tilde{\alpha}_l}{a^2 d} E_l^{ext} \\ \frac{P_t}{a^2 d} &= \frac{1}{4\pi} (1 - \varepsilon_t^{-1}) E_t^{ext} = \frac{\tilde{\alpha}_t}{a^2 d} E_t^{ext}.\end{aligned}\quad (42)$$

де $\tilde{\alpha}$ визначається рівнянням (41) і d - висота наноциліндра.

Якщо, враховуючи відносно невелике значення, ми, як було помічено, опустимо недіагональну складову E_2 , отримаємо

$$\varepsilon_x = 1 + 4\pi \frac{\tilde{\alpha}_x}{a^2 d}; \quad \varepsilon_y = 1 + 4\pi \frac{\tilde{\alpha}_y}{a^2 d}; \quad \varepsilon_z^{-1} = 1 - 4\pi \frac{\tilde{\alpha}_z}{a^2 d} \quad (43)$$

Ці компоненти діелектричної функції показані на рисунку 14. Знову ж таки, як і у випадку окремих складових поляризованості, ε_x не сильно залежить від кута падіння. Поведінка ε_x та ε_y виглядає подібно до резонансів Лоренца, але асиметрично, з тим, що положення резонансу відрізняються лише на 3-4 нм між ε_x та ε_y для того самого діаметра наноциліндрів під будь-яким кутом падіння. Хоча величина ε_z' подібна до величин ε_x' та ε_y' , зміни ε_z'' залежно від діаметра є меншими порівняно з ε_x'' та ε_y'' . Водночас ε_z виявляє набагато більш виражену кутову залежність.

6 Можливість підсилення поля як на окремій частинці так і в ґратці.

Отримавши поляризованість частинки: окремої (25) – рис. 9; на підкладці (27) – рис. 11; та в ґратці (41) – рис. 13, ми можемо розрахувати диполі, які генеруються при збудженні такої частинки зовнішнім полем за стандартним виразом $\mathbf{P}=\hat{\alpha}\mathbf{E}$, а відповідно і поля, які генеруються таким диполем за виразом (38). Вже зазначалося, що поля, які генерує наночиліндр близькі до полів, що генерує еліпсоїд обертання з тим же об'ємом та ексцентриситетом [29], можемо використати отримані попередньо вирази.

Для еліпсоїда, точки екстремумів поля лежать на його поверхні вздовж вісей при збудженні вздовж цих вісей. Враховуючи, що всі наведені на рисунках

поляризованості є нормованими на об'єм еліпсоїда $\frac{4}{3}\pi c a^2$ де a і c це піввісі нашого еліпсоїда перпендикулярно та вздовж його вісі обертання, що відповідно дорівнює об'єму циліндра $\frac{1}{2}\pi h D^2$ за умови збереження співвідношення сторін $a/c=D/h$, можемо спростити (38) до полів на поверхні еліпсоїда в відповідних точках, тож для окремого еліпсоїда матимемо враховуючи на цих відстанях лише найсильніше ближнє поле

$$E_t = \frac{9}{2}\pi \left(\frac{D}{h}\right)^2 \alpha_t E_t^0, \quad E_l = \frac{9}{2}\pi \frac{h}{D} \alpha_l E_l^0 \quad (44)$$

де компоненти α – це нормовані поляризованості наведені на рисунку 9.

Розраховані за (44) залежності відношення модуля згенерованого поля до збуджуючого, що і є коефіцієнтом підсилення поля наведені на рис. 15.

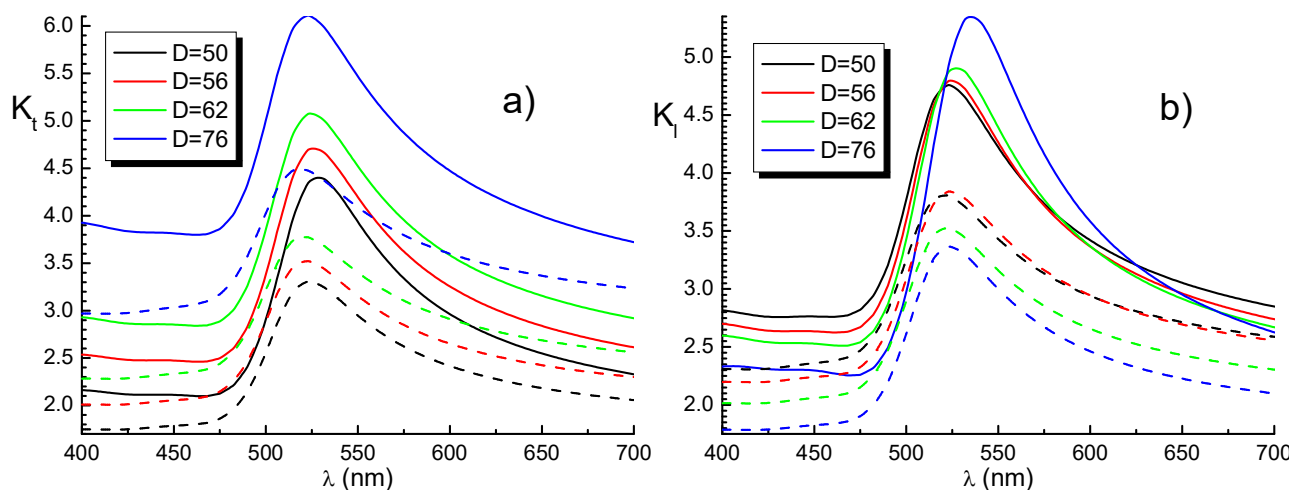


Рисунок 15 – Коефіцієнти підсилення поля для вільного еліпсоїду різного діаметру з урахуванням корекції на розмір (суцільні) та без (штрихові).

Як видно з рисунку 15, для обох поляризацій підсилення поля досягає шести для найбільшої наночастинки.

Для випадку частинки на поверхні сумарне поле складається з поля що генерує сама частинка та поля від поляризованої поверхні. Це теж саме поле, яке ренормалізує поляризованість частинки на поверхні та обговорюється у розділі 5.2. Для оцінок та спрощення розрахунків тут і в подальшому будемо розраховувати поля від інших елементів системи або на вісі обертання або взагалі

в центрі частинки. Окрім того треба зазначити, що наявність поверхні робить не еквівалентними два кінці еліпсоїда на вісі обертання – тобто точку де еліпсоїд торкається поверхні та протилежну. Таким чином використовуючи вирази (27)-(31) та враховуючи зниження симетрії ми отримаємо

$$E_t^{surf} = \frac{8}{3}\pi \left(\frac{D}{h}\right)^2 (1+r)\alpha_t^* E_t^0, \quad E_t^{free} = \frac{8}{3}\pi \left(\frac{D}{h}\right)^2 \left(1 + \frac{r}{27}\right)\alpha_t^* E_t^0,$$

$$E_l = \frac{8}{3}\pi \frac{h}{D} \left(1 + \frac{r}{16} \left(\frac{D}{h}\right)^3\right)\alpha_l^* E_l^0 \quad (45)$$

де компоненти α^* – це нормовані поляризованості наведені на рисунку 11, а позначення “*surf*” та “*free*” позначають поле в точці на поверхні та в протилежному кінці еліпсоїда відповідно. Оскільки коефіцієнт відбиття r , показаний на рисунку 10, майже завжди порядку чи менше одиниці а діаметри наших наночиліндрів співвимірні з їх висотою, поля (45) не суттєво відрізняються від випадку окремої наночастинки за винятком поля в точці, де наночастинка торкається поверхні.

Розраховані за (45) залежності відношення модуля згенерованого поля до збуджуючого наведені на рис. 16 лише для точки де еліпсоїд торкається поверхні.

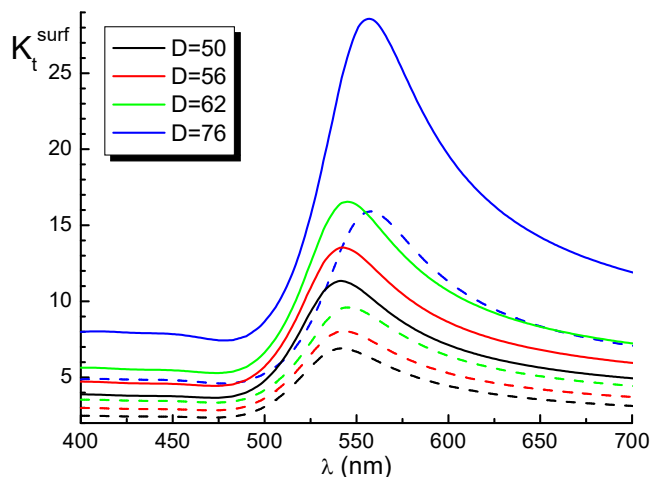


Рисунок 16 – Коефіцієнти підсилення поля для еліпсоїду різного діаметру на поверхні в точці торкання (суцільні) або «вільного» (штрихові).

Ренормалізація поляризованості поверхнею сама по собі призводить до збільшення підсилення від приблизно двох с половиною до трьох разів в

порівнянні з еліпсоїдом у вільному просторі. Саме випадок еліпсоїду у вільному просторі але з ренормалізованою поляризуємостью позначений як «вільний». Максимум підсилення тепер зсувається в червону область зі збільшенням діаметру наночастинки. Додача поля від поверхні збільшує підсилення в точці торкання майже вдвічі практично без додаткового зсуву. Навіть з урахуванням лише дипольних взаємодій, що суттєво знижує реальні поля, оскільки не враховує неоднорідну поляризацію біля поверхні, максимальне розраховане підсилення в точці торкання досягає майже тридцяти. Хоча для параметрів систем, що досліджувалися ситуація далека від конфігураційного резонансу [57], підсилення достатньо суттєве.

Такий же підхід використаний для оцінки підсилення впорядкованим масивом наночастинок. Як і раніше, нехтуючи малою величиною недіагонального елемента E_2 в (39) та (41) ми отримуємо діагональну матрицю поляризуємості окремої наночастинки $\tilde{\alpha}$, яка описує її власне поле за допомогою виразу (45). Додатково до цього поля є поле, що генерується іншими диполями системи, яке, знову ж нехтуючи недіагональним елементом E_2 можна використовувати (41) записати в центрі наночастинки як

$$E_x^{add} = \frac{\tilde{\alpha}_x}{a^3} (A_1 + rA_2)E_x^0, \quad E_y^{add} = \frac{\tilde{\alpha}_y}{a^3} (B_1 + rB_2)E_y^0, \quad E_z^{add} = \frac{\tilde{\alpha}_z}{a^3} (D_1 + rD_2)E_z^0 \quad (46)$$

Для більшості наночастинок, які знаходяться не дуже близько ці поля майже однакові на всій поверхні наночастинки. Якщо використовувати $\tilde{\alpha}$ з рис. 13, то вирази мають бути помножені на об'єм.

Знехтувавши E_2 в (41), тобто діагоналізувавши матрицю поляризуємостей, і підставивши його в (46) отримаємо для кожного з додаткових компонентів поля

$$E_i^{add} = \left(\frac{1}{1 - \frac{\alpha_i^0}{a^3}(X_1 + rX_2)} - 1 \right) E_i^0 \quad (47)$$

де i позначає x , y або z , а X відповідно A , B або D .

Знову, відношення модуля повного поля до збуджуючого показані на рисунку 17 для двох кутів падіння. Як ми бачимо, підсилення поля зменшилося в порівнянні з однією частинкою на поверхні. Це пов'язано з тим, що період наших

структур досить малий і умови для резонансів Релея та Вуда не досягаються, а поля від ґратки є деполаризуючими для всіх напрямків. Але для частинок діаметру 62 нм ми бачимо для поляризації вздовж вісі наноциліндру появу нового резонансу в червоній області.

Оптимізація подібних структур для збільшення підсилення потребує подальших досліджень та чисельного моделювання з врахуванням неоднорідної поляризації та внеску від вищих мультиполів.

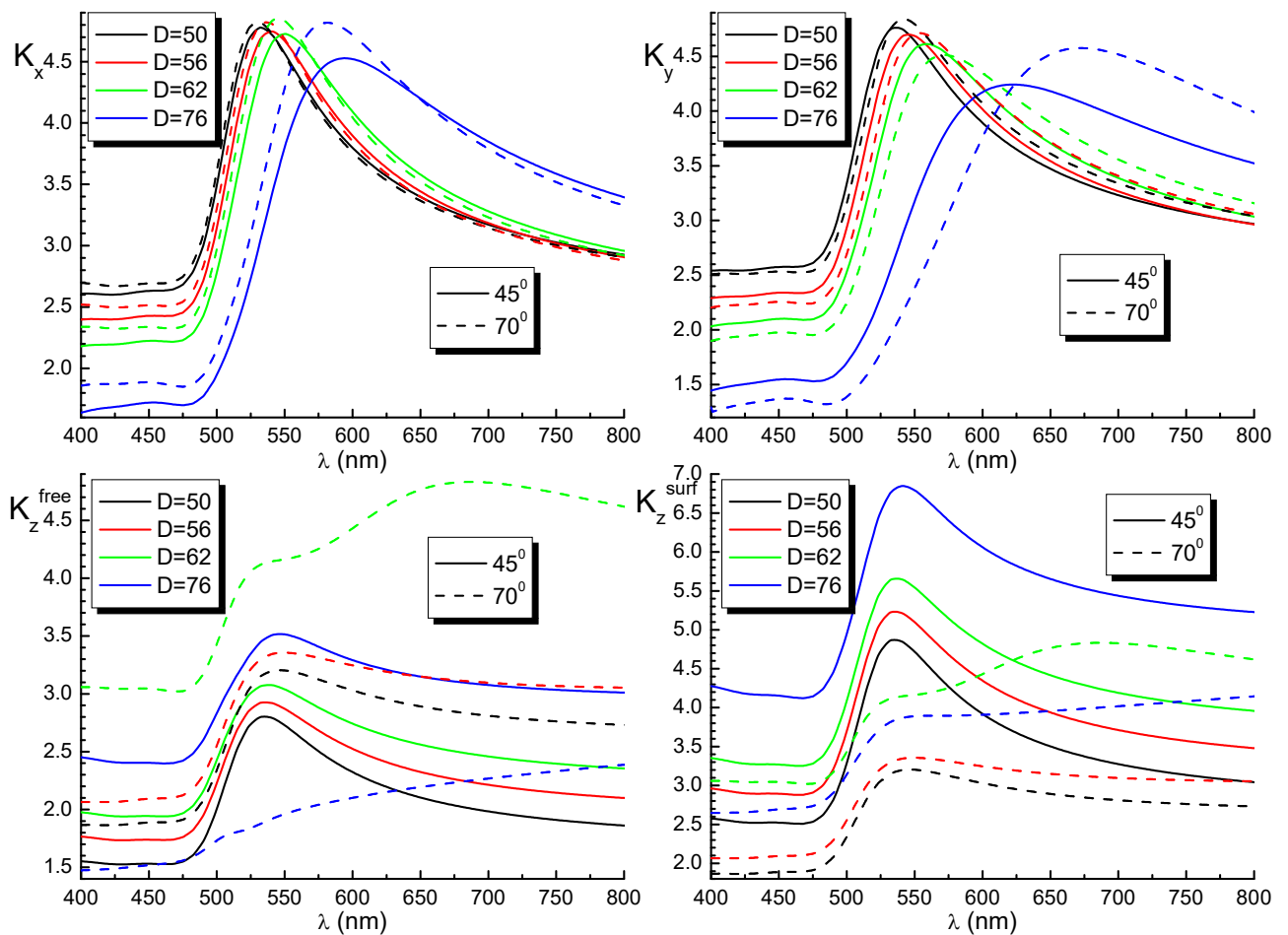


Рисунок 17 – Коефіцієнти підсилення поля для різних точок на вісях еліпсоїда в ґратці на поверхні.

7 Порівняння моделі з експериментом.

Слід зазначити, що теоретичний опис демонструє багато тенденцій, що спостерігаються експериментально не повністю співпадає з експериментом.

Так, положення повздовжніх резонансів, продемонстровані в цьому експерименті на довжинах хвиль понад 600 нм (рисунок 7), відрізняються від розрахунків, показаних на рисунку 14, де всі повздовжні резонанси розташовані на довжинах хвиль менших за 600 нм. Це вказує на те, що конструктивна інтерференція для повздовжньої поляризації недооцінюється, можливо, тому, що внески від вищих мультиполів опускаються. Індекс розміру kl для наших частинок змінюється від 0,37 до 0,95, тому для найбільших частинок ми можемо очікувати, що існує внесок від вищих мультиполів. Ймовірно, маленькою особливістю нормалізованого пропускання близько 500 нм, яка найбільш виражена для найбільших частинок, є ознака квадрупольної моди. Іншою причиною відхилення є зв'язування локалізованих плазмонів наноциліндрів з поверхневим плазмоном підкладки, що не враховувалося у введеному раніше простому дипольному наближенні. Така гібридизація призводить до посилення диполь-дипольних взаємодій поверхневим плазмоном на підкладці [58].

Якщо розглянути еліпсометричні спектри з рисунку 8, положення резонансів в області ~650-700 нм співпадає з областю резонансів на рисунку 7, що інтерпретуються як повздовжні. Однак крім відмінності спектральних положень повздовжніх резонансів від розрахункових на рисунку 14, спектральний зсув резонансу на ~530 нм зі збільшенням діаметра наноциліндра протилежний розрахунковому червоному зсуву для всіх резонансів. Однак більш сильна взаємодія між наночастинками призведе до зсуву в синю область для поперечних резонансів та подальшого зміщення в червону область для повздовжніх [56]. Отже, гіпотеза про посилену взаємодію завдяки поверхневому плазмону [58] може пояснити експеримент.

Обробка еліпсометричних спектрів вимагає певного моделювання. Наприклад, діелектрична функція ряду довгих паралельних наноциліндрів може бути апроксимована одновісною діелектричною функцією з апроксимацією ефективного середовища [59], де незвичайна складова вздовж циліндрів буде зваженою, що визначається коефіцієнтом заповнення, сумою діелектричних функцій матеріалу циліндрів та навколишнього середовища, тоді як звичайна

складова буде задана моделлю Максвелла-Гарнетта з двовимірним коефіцієнтом деполяризації 0.5. Однак ця модель не підходить для нашого випадку. Проблема не в дефіциті внутрішньо тривимірної моделі Максвелла-Гарнетта у застосуванні до двовимірних структур [60], і не в тому, що у нас більше дископодібних форм, ніж циліндрів. Це лише змінило б незвичайну діелектричну функцію та коефіцієнт деполяризації для звичайної, але розміри нашої системи надто великі для стандартних варіантів наближення ефективної середовища. Наші частинки розташовані занадто далеко одна від одної, і положення повздовжнього резонансу для наночастинок золота з невеликим коефіцієнтом заповнення буде приблизно на 500 нм незалежно від коефіцієнта деполяризації. Щоб пересунути цей резонанс на 600 нм і далі, золота мало би бути більше 70%, що далеко від нашого випадку.

Теоретичний опис усіх дипольних взаємодій у нашій системі в попередній частині свідчить про те, що ефективна діелектрична функція шару наночастинок залежить від кута падіння. Як зазначалося, цей факт робить обробку даних досить складною. Маючи 6 спектрів Ψ та 6 спектрів Δ , ми могли б отримати 3 діелектричні функції для двовісної системи в кожній спектральній точці незалежно, оскільки 12 вимірних параметрів достатньо для отримання 6 невідомих значень. Однак, працюючи лише з двома спектрами Ψ та Δ , вимірними під одним кутом падіння, ми могли б отримати не більше двох невідомих параметрів, тобто одну комплексну діелектричну проникність у кожній спектральній точці. Отже, нам потрібна деяка параметризація наших діелектричних функцій, щоб зменшити кількість невідомих параметрів. Це також означає, що обробка результатів вимірювань під різними кутами падіння разом може дати лише деяке наближення загальної поведінки.

Ми не можемо використовувати підхід узагальненої еліпсометрії [61,62] вимірюючи зразки під різними азимутами для отримання додаткової інформації та прояву недіагональних елементів матриці Джонса, оскільки у нас немає недіагональних елементів. Вже було відмічено, що ефективна плоска анізотропія визначається кутом падіння, а напрямок оптичних осей - площиною падіння. Отже, на відміну від будь-якого двозаломлюючого матеріалу з фіксованим

напрямок оптичних осей, ефективні оптичні вісі у нашому випадку фіксуються площиною падіння. Безумовно, через дискретність нашої системи деякі зміни ефективного двозаломлення повинні виникати при зміні азимута площини падіння, але побудова аналогії узагальненої еліпсометрії для випадку двовимірної впорядкованої ґратки наночастинок вимагає подальших досліджень та багатьох нових ідей.

Найпростіший підхід - заміна шару наночастинок одновісним шаром з двома резонансами Лоренца - повздовжнім у звичайній діелектричній функції та поперечним у незвичайній. Враховуючи результати моделювання, двовісний шар повинен краще відповідати реальній ситуації. Безумовно, жоден із цих підходів не відтворює зсуву резонансів з кутом падіння, але показує деякі загальні властивості. Отримані резонансні положення зображено на рис. 18.

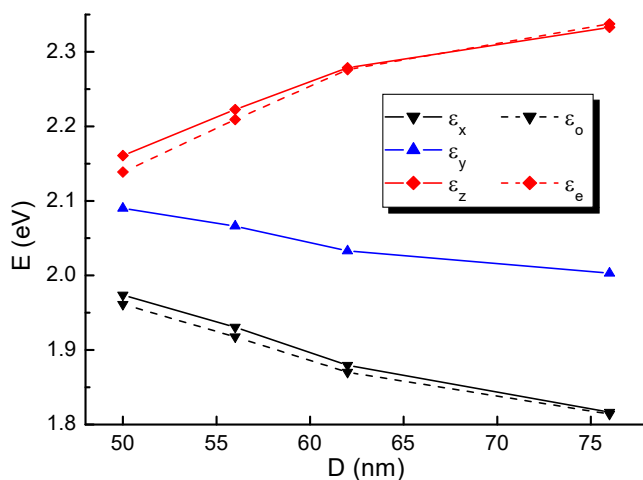


Рисунок 18 – Залежності резонансних положень для простих двовісних (суцільні) та одновісних (штрихові) моделей для різних зразків.

Настільки хороший збіг положення резонансів звичайної та незвичайної діелектричних функцій для одновісної моделі з резонансами X- та Z-складових діелектричної функції двовісної моделі можна пояснити тим, що наявність двох мінімумів на плавній кривій автоматично створює максимум між ними. Однак підгонка експериментальних кривих двовісною моделлю краще відтворює форму навколо цього максимуму. Розглядаючи двовісну модель, ми бачимо, що

поведінка ε_x і ε_y схожа і лише зміщена по енергії. Це можна пояснити еліптичною формою зон Френеля та різною кількістю диполів уздовж вісей X та Y, що впливають на інші при нахиленому падінні [53].

Не дивлячись на досить погане відтворення експериментальних спектрів без можливості відтворення значень $\Psi > 45^\circ$, що виміряні при довгих довжинах хвиль (рисунок 8), ця модель дає правильну поведінку для повздовжнього та поперечного резонансів зі зміною діаметра наноциліндрів. Як і очікувалося [56], зі збільшенням діаметра повздовжні резонанси зміщуються в червону, а поперечні – в синю область.

Така поведінка в порівнянні з аналізом проявів резонансів в еліпсометричних спектрах (рисунок 5) пропонує просту оцінку положення резонансів. Оскільки наша структура має золотий шар майже у поверхні і плівка Al_2O_3 прозора, система гарно відбиває світло, тож резонанси в X- та Z-компонентах діелектричної функції мають проявлятися як мінімуми, причому мінімум, що відповідає резонансу Z-компоненти зсунутий в синю область, тоді як резонанс Y-компоненти має проявлятися як максимум для всіх використаних кутів падіння. Наші експериментальні спектри як раз мають два мінімуми та один максимум, і положення резонансів на рисунку 18 гарно корелюють з положеннями екстремумів зареєстрованими експериментально (рисунок 8) з урахуванням зсуву мінімуму, що відповідає резонансу Z-компоненти діелектричної функції.

Для параметризації ми можемо використовувати обчислені лінії (рисунок 14), враховуючи всі дипольні взаємодії в системі. Було помічено, що ці лінії мають форму асиметричних Лоренціанів. Фактично, всі перетворення поляризованості, за винятком врахування корекції розміру за формулою (25) практично зберігають форму Лоренця з, можливо, незначними поправками затухаючого члена. Отже, якби поляризованість невеликої металевої частинки мала б форму Лоренця, це відображалось б у кінцевій діелектричній функції. Причина може полягати в тому, що поляризованість наночастинки, виготовленої з металу Друде, має форму Лоренця [63,64], але золото можна розглядати у

видимому діапазоні як метал Друде лише з деякими припущеннями. Отже, форма лінії в діелектричній функції не є точно Лоренцівською. Підгонка показала, що форму цих ліній можна досить добре описати сумою Лоренціану, лінії Тауца-Лоренця та додаткової гладкої залежності Коші з хвостом поглинання Урбаха. Отже, для підгонки еліпсометричних спектрів для кожного кута падіння окремо були використані такі суми для ϵ_x , ϵ_y та ϵ_z . Результати показані на рис. 19. Однак, хоча ϵ_x та ϵ_y прямо пропорційні відповідним поляризуємостям (рівняння (23)) і їх резонанси збігаються, тож ми можемо розпізнати правильні резонансні положення у поведінці цих компонентів діелектричної функції, це не так для ϵ_z . Отже, останній рядок на рис. 19 демонструє поведінку виразу $(1 - \epsilon_z^{-1})$, який також прямо пропорційний поперечній поляризуємості та правильно відтворює положення поперечного резонансу.

Рисунок 19 демонструє діелектричні функції, які відповідають еліпсометричним експериментальним даним під кутом падіння 55° . Діелектричні функції для інших кутів падіння поводяться подібно до показаних залежностей тож не показані.

Підгонка експерименту погіршується із збільшенням діаметра наноциліндрів. Слід зазначити, що підгонка досить нестабільна, і можуть бути різні, досить схожі описи експерименту з різними встановленими параметрами. Остаточний вибір був зроблений на основі «плавних» змін параметрів при зміні кута падіння та фізичного сенсу. Можливо, таку нестійкість можна пояснити досить великою кількістю невідомих параметрів (ми маємо 13 невідомих параметрів для кожної компоненти параметризованої діелектричної функції, тому 39 невідомих для 142 однозначно корельованих вимірних значень трохи забагато).

Модель з такою параметризованою діелектричною функцією для шару наноциліндрів не є цілком адекватною, оскільки уявні частини отриманих таким чином діелектричних функцій негативні на деяких довжинах хвиль. Зі збільшенням діаметра наноциліндрів діелектричні функції все менше і менше нагадують функції для одного резонансу. Однак модель описує експеримент і

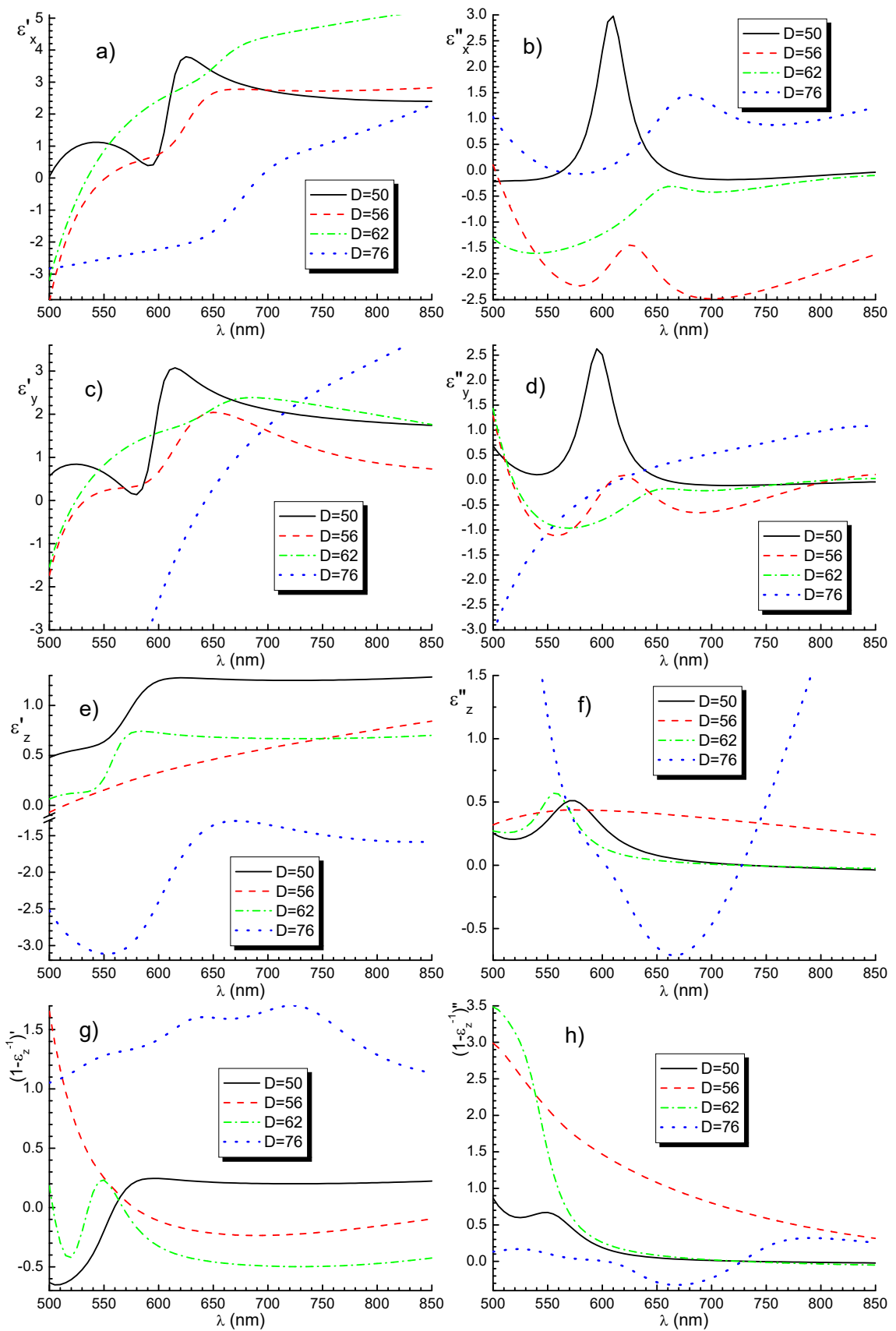


Рисунок 19 – Параметризовані діелектричні функції для кута падіння 55° , які відповідають еліпсометричним експериментальним даним та значення $(1-\epsilon_z^{-1})$ в останньому ряду, прямо пропорційному поперечній поляризації.

дозволяє відстежувати загальну поведінку оптичного відгуку при зміні параметрів системи.

Слід проаналізувати ще одне питання, а саме вже згадану взаємодію локалізованих збуджень наночастинок із поверхневим плазмоном на плівці золота в підкладці. Дослідження цього питання численні, наприклад [58,65-69], але аналітичного опису такої взаємодії не існує. Нажаль мікроеліпсометричні виміри з внутрішнім відбиттям неможливі, тож неможливо продемонструвати розщеплення дисперсійних відносин безпосередньо, як це було зроблено у [68,69]. Однак ми можемо проаналізувати залежності положення резонансів від поздовжньої складової хвильового вектора світла, тобто кута падіння. Можна уникнути аналізу s-поляризованого світла, оскільки він може взаємодіяти з поверхневим плазмоном тільки якщо утворюється відповідний хвильовий вектор у цьому напрямку. Однак хвильові вектори, утворені нашими ґратками, більші, ніж необхідно для цього.

Кутові положенням резонансів X- та Z-складових поляризуєності, отримані під час підгонки експериментальних кривих під кожним кутом показані разом із дисперсією поверхневого плазмону на чистому золоті $\omega(k_{SP}^0)$, і дисперсією виправленою присутністю шару Al_2O_3 – $\omega(k_{SP})$ на рисунку 20 як функція k_x/k_0 . При такому нормуванні це співвідношення є синусом кута падіння в області хвиль, а одиниця відповідає світловій лінії.

Як видно на рисунку 19, не всі зображені уявні частини пропорційні поперечній поляризації, мають пік. Аналіз рівняння (43) демонструє, що резонансне положення ϵ_z зміщене від положення екстремуму для поперечної поляризуєності як і має бути для прояву поперечного резонансу. Отже, оскільки параметризовані діелектричні функції включають осцилятор Лоренца, права панель на рисунку 20 демонструє залежності резонансів цих осциляторів Лоренца від нормованого хвильового вектору. Щоб продемонструвати, що така підміна дійсних поперечних резонансів дозволяє досягти правильних висновків, залежність максимуму $(1-\epsilon^{-1})''$ для найменших наноциліндрів показана на обох панелях пунктирною лінією. Як і очікувалося, криві практично збігаються для X-

компоненти і зміщуються лише по енергії для Z-компоненти. Цей збіг результатів доводить, що ми можемо обговорювати показані залежності замість реальних залежностей для поперечних резонансів. Видимі «коливання», які спостерігаються на червоних кривих, не мають фізичного значення і пояснюються нестабільністю підгонки.

Як передбачає теорія, кутова залежність X-компоненти практично відсутня, лише з незначним зменшенням, за винятком випадку найбільших наноциліндрів. Подібне невелике кутове зменшення спостерігається для Y-компоненти для всіх наноциліндрів (не показано). Ситуація щодо Z-компоненти (і X-компоненти для наноциліндрів діаметром 76 нм) протилежна теоретичному передбаченню. Теоретичні значення показують помітне зменшення енергії з кутом падіння, яке протилежне отриманому збільшенню. Так само, як і в [69], таку поведінку можна віднести до дисперсії внаслідок гібридизації спостережених локалізованих мод з поверхневим плазмоном, дисперсія якого показана для k_x -значень більше одиниці праворуч від світлової лінії. Цей факт підтверджує припущення, що існує сильний вплив поверхневого плазону на міжчастиночні взаємодії, що помітно зміщує спостережувану поведінку від теоретично передбаченої.

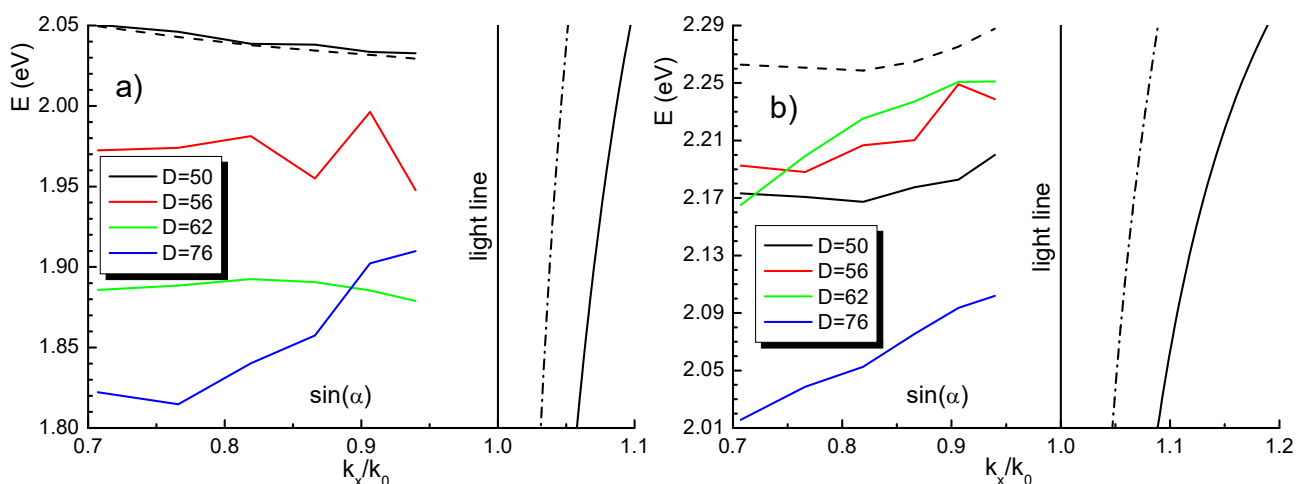


Рисунок 20 – Залежності резонансних положень для X- (a) та Z-компонентів (b) поляризуємості від нормованого хвильового вектора. Дисперсійні відносини поверхневого плазону (для чистого золота-тире-крапка і для золота з 10,94 нм плівки Al_2O_3 - суцільне) показано справа від світлової лінії.

Варто зазначити, що показані взаємні резонансні положення Z -компонент відповідають передбаченим теорією без врахування міжчастинкових взаємодій.

Фактично, завжди слід очікувати гібридизації для взаємодіючих електромагнітних мод, таких як локалізовані та поверхневі плаزمони.

Таким чином, незважаючи на те, що пряме порівняння з експериментальними результатами вказує на необхідність подальшого розширення розвинутої теорії, щоб врахувати вплив поверхневого плазмону на міжчастинкові взаємодії, це перший повний опис дипольних взаємодій не лише у шарі наночастинок, а також із шаром зображень диполів частинок. Крім того, розроблений формалізм для опису взаємодії наночастинок з шаруватою підкладкою з врахування розміру наночастинок вперше було перенесено з оптики ближнього поля на макрооптику.

Прямий вплив взаємодії та збудження поверхневих плазмонів на обох сторонах золотої плівки через ґраткові моди для ґраток з більшими періодами була продемонстрована нами експериментально [70].

8 Гальванопластика як метод тиражування поверхневих наноструктур

Враховуючи досвід Української групи в гальванопластиці, одним з завдань проекту є розробка підходів для достатньо дешевого підходу для реплікації подібних впорядкованих наноструктур. Гальванопластика, це набір методів для утворення стабільних покриттів та відтворення/реплікації різних об'єктів. Гальванопластика включає в себе набір операцій, які тут розглянуті.

8.1 Реплікація

Реплікація полягає у багатократному технологічному повторюванні певних операцій нанесення розплаву, найчастіше пластмаси або металу, на поверхню матриці. У випадку, коли найважливіші якості виробу визначаються рельєфом поверхні, говорять про реплікацію матриці. Повнофункціональний інструмент для тиражування певного виробу, найважливішою частиною якого є матриця,

називають формою. Конструкція форми та умови технологічного процесу забезпечують інжекцію розплавленого полімеру у внутрішню порожнину форми, відтворення рельєфу копії під тиском, охолодження копії, розділення копії і матриці в кожному циклі практично без зміни властивостей матриці та автоматичне видалення копії з форми. Оскільки копія містить рельєф, який є дзеркальним до рельєфа матриці, то для забезпечення реплікації потрібне виготовлення спеціального інструменту – матриці та форми.

Матриця може бути виготовлена як репліка рельєфу оригіналу в прецизійному процесі. Сучасні методи проектування дозволяють, також, спроектувати оригінал як віртуальний 2D або 3D об'єкт, а матрицю виготовити безпосередньо, наприклад за допомогою електронпроменевого літографічного процесу.

При проектуванні реплікації сучасними методами [77,78] можливо закласти певну корекцію розмірів елементів, щоби врахувати систематичну зміну розмірів і встановити певні допуски елементів рельєфу на стадії проектування оригіналу та виготовлення матриці. Наприклад, функціональні властивості копій можна підвищити, якщо закласти в матрицю розміри важливих елементів з врахуванням корекції на теплове розширення в кожному циклі при реплікації термопластичним литтям пластмаси. Для підвищення максимального тиражу, який можна зняти з даної форми, враховують поступове електромеханічне зношування робочої поверхні матриці в результаті виготовлення багатомільйонних тиражів і проєктують певні допуски розмірів критичних елементів рельєфу.

8.2 Високоточна реплікація наноструктур оптичних дисків

Досягнення технології реплікації оптичних дисків з підвищеною швидкістю зчитування можна вважати прототипом для проектування технології тиражування елементів нанооптики. Широко відоме використання реплікації для виготовлення багатотисячних тиражів оптичних дисків CD та DVD типів і виготовлення рельєфних підкладок з спрямовуючою канавкою для дисків CD-R, DVD-R, DVD-RW.

У випадку проектування оптичних дисків CD, DVD оригінал є реальним рельєфним виробом [80] (Рисунок 21). Оригінал формується комп'ютерним цифровим кодуванням корисного сигналу, наприклад музики.

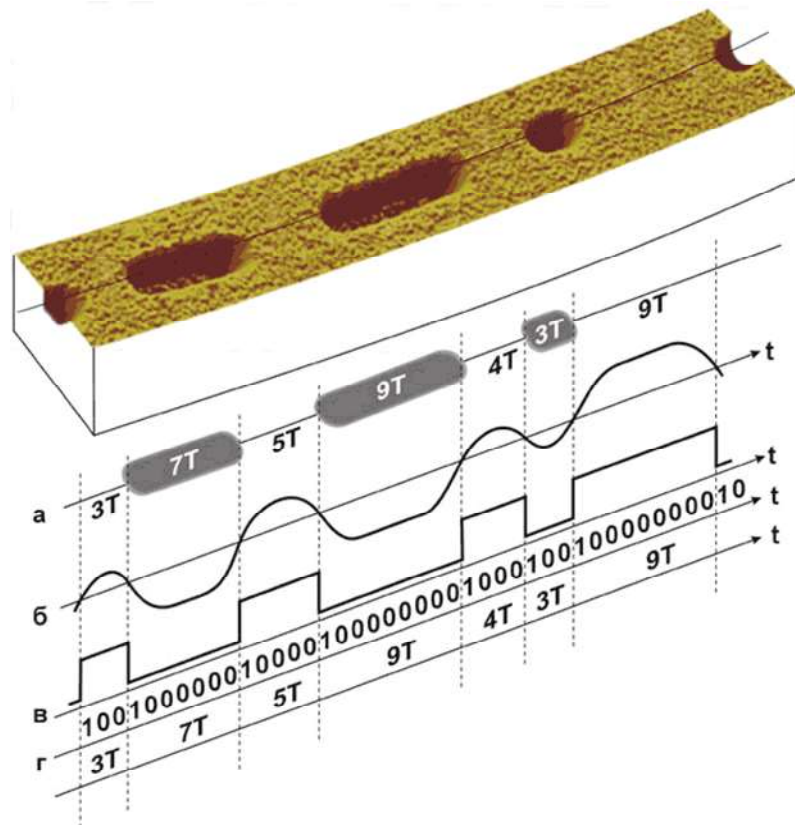


Рисунок 21 – Проектування оригіналу та рел'єфна копія оптичного диску: а- кодова послідовність вздовж трека зчитування на копії, б- оптичний сигнал зчитування рельєфу при відтворенні копії, в- дворівневий сигнал для лазерної експозиції диску-оригіналу, г- цифровий образ інформації.

Якість копій визначається властивостями матриці (Рисунок 22). Матрицю виготовляють як нікелевий інструмент товщиною 300 мкм шляхом копіювання з поверхні оригіналу (Рисунок 23). Перед виготовленням металеві копії поверхню оригіналу покривають електропровідним шаром товщиною біля 20 нм, який є технологічно жертвним і впливає на точність відтворення нанoeлементів.

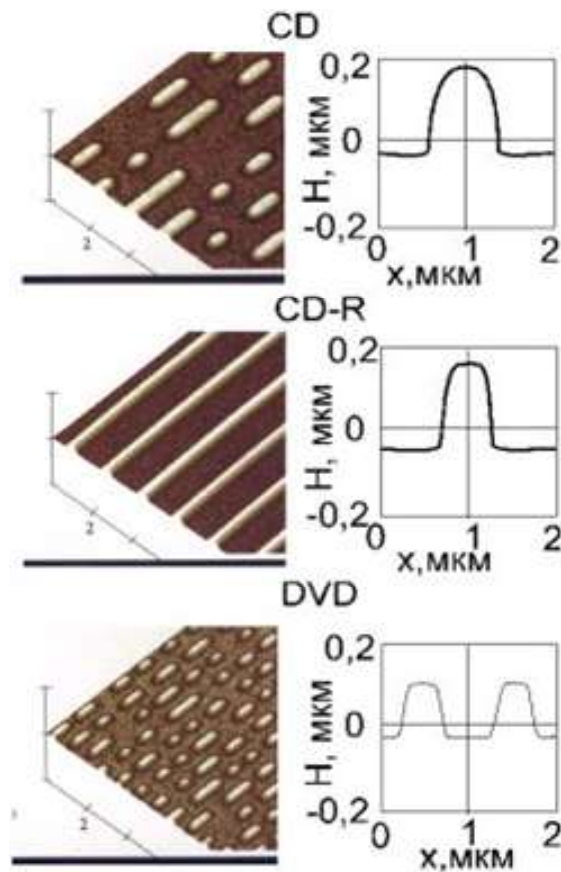


Рисунок 22 – Рельєф матриць для тиражування оптичних дисків типу CD, CD-R, DVD.

Якість копій визначається перш за все припустимими відхиленнями розмірів наноканавок на поверхні копії. Оскільки запис та зчитування дисків ґрунтується на послідовній обробці оптоелектронного сигналу зчитування, то нормується джиттер - середньоквадратичне відхилення фази сигналу зчитування, яке визначається положенням передніх та задніх фронтів при зчитуванні диска, у порівнянні з цифровим образом. Джиттер опосередковано зв'язаний з цілим рядом параметрів нанорельєфу, а також з варіацією коефіцієнта двозаломлення підкладки, ймовірністю світлів та пласкістю підкладки. Вимоги до припустимих відхилень суттєво збільшуються для дисків з підвищеною швидкістю запису та відтворення - окремі відхилення розмірів елементів нанооптики лежать в діапазоні одиниць нанометрів. Так, припустимі відхилення висоти елементів рельєфу матриці не перевищують 2нм для підкладок 16×CD-R з спрямовуючою канавкою, а довжини заглиблень – біля 10нм для CD та 2нм для 32×DVD.

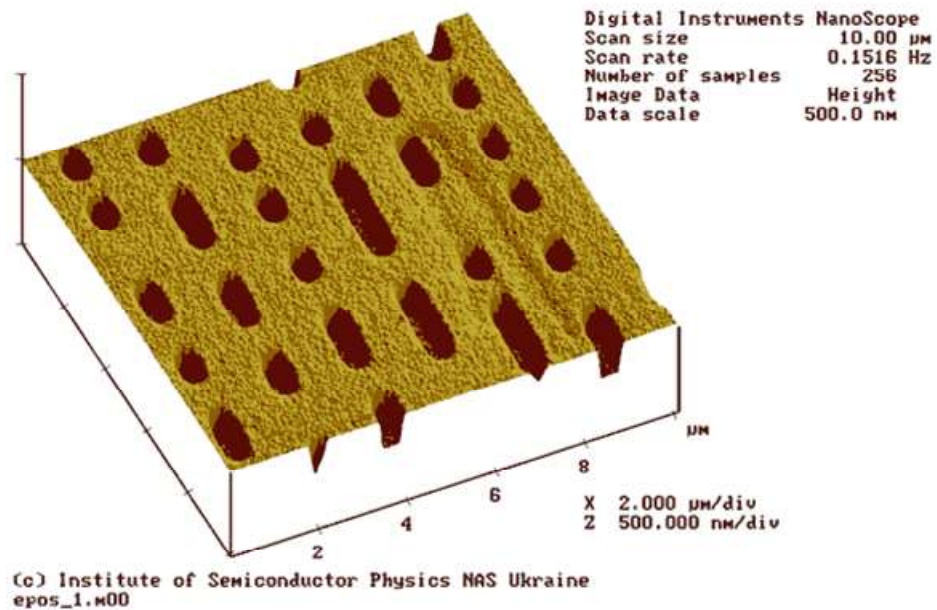


Рисунок 23 – Поверхня оригіналу для виготовлення оптичного диску CD, АСМ зображення.

Якість зчитування копій залежить від макроскопічної площинності диску, оскільки відхилення від площини формують значні прискорення на високих швидкостях зчитування. Для виготовлення багатотисячних тиражів також важливо, щоби матриця не деформувалася в процесі тиражування. Обидві ці вимоги задовольняються при виготовленні матриці макроскопічно пласкою з близькими до нуля механічними напруженням по всій поверхні.

Зазначені припустимі відхилення розмірів елементів нанооптики та макроскопічні вимоги до площинності повинні гарантуватися точністю виготовлення диску-оригіналу та технологією виготовлення матриці. Цим високим вимогам задовольняє технологія гальванопластичного копіювання оригіналу.

8.3 Гальванопластика

Гальванопластика (electroforming) - це процес нанесення металу шляхом відновлення і конденсації іонів з електроліту на поверхні електроду з рельєфом. В результаті одержують покриття, яке відтворює дзеркальну копію електроду

(оригінал або мастер) з нанометровою точністю. Гальванопластична копія і мастер розділяються після завершення гальванічного процесу. Цей процес відрізняється від гальванічного покриття тим, що гальванопластична копія набагато товща і може існувати як самонесуча конструкція при видаленні мастера.

Серед широкого ряду металів, подвійних і потрійних твердих розчинів, гальванічне осадження яких практикується, потреби гальванопластики найбільше задовольняє кристалізація нікелю з сульфаміновокислих електролітів [78,81].

Електрохімічну кристалізацію нікелю проводять на катоді з одночасним розчиненням анодного нікелевого матеріалу в електроліті. Оскільки анодне розчинення чистого нікелю пасивується шаром гідроксиду, в якості анодів використовують прецизійні сплави нікелю, активовані сіркою [78,81] - Ni-S аноди. Нікель, осаджений на катоді, має високу коррозійну стійкість і дуже низьку швидкість електрохімічного розчинення в сульфатних та сульфамінатних електролітах. Одночасно з зазначеними основними катодним та анодним окислювально-відновлювальним процесом на катоді виділяється невелика кількість водню (вихід за струмом нікелю на катоді не менше 98%) та відбувається ряд складних електрохімічних реакцій в об'ємі ванни (Рисунок 24). Водень, який виділяється на катоді паралельно з кристалізацією нікелю, утворює гідриди, може інтеркалювати в матриці нікелю разом з сполуками сірки та гідроокисами, і помітно впливає на механічні напруження катодного осаду. Саме сульфаміновокислі електроліти в оптимальних умовах електрохімічного осадження забезпечують катодні осадки нікелю з внутрішніми механічними напруженнями, близькими до нуля (zero-stress matrix), їх високу твердість, зносостійкість та коррозійну стійкість.

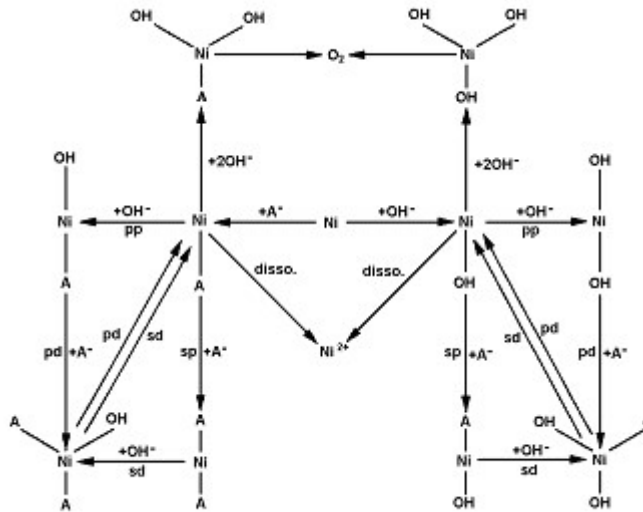


Рисунок 24 – Хімічні та електрохімічні реакції за участі нікеля в гальванічній ванні [81].

В умовах, коли площа анодів з активованого нікелю на порядок перевищує площу катоду, швидкість катодної кристалізації обмежена дифузією іонів в прикатодному подвійному зарядженому шарі на межі катод-електроліт і не перевищує 80 мкм/годину. Для високопродуктивних технологічних процесів масового виробництва матриць з неглибоким рельєфом, наприклад у виробництві оптичних дисків, ширину подвійного шару зменшують гідродинамічною активацією, обертаючи катод під час росту [82]. При цьому для зменшення товщини дифузійного шару оптимізують в'язкість та температуру електроліту. Нами розроблений спосіб швидкісного вирощування нікелевих матриць [83] в електролізері певної конструкції з нерухомими анодом та катодом за рахунок додаткової гідродинамічної активації дифузійного шару швидкісним потоком електроліту за допомогою циркуляційного насоса. В оптимальних умовах була досягнута швидкість росту матриці 750 мкм/годину, висока однорідність та припустимо низькі механічні напруження по всій поверхні матриць.

Для гальванопластики нікелем розроблено детальний опис технологічних процедур [82], котрий продубльовано рядом державних стандартів ряду розвинених країн.

Тверді розчини Ni-Co, одержані в гальванопластичному процесі з розчинними анодами одночасною кристалізацією нікелю та кобальту, можна розглядати як наступний крок розвитку гальванопластики нікелем, оскільки такі матриці мають ряд функціональних та технологічних переваг у порівнянні з нікелевими. На Рисунку 25 наведено SEM – зображення рельєфу матриці для тиражування підкладок оптичних дисків типу 16×CD-R на основі твердого розчину Ni₉₉Co₁.

В ювелірній промисловості і електроніці використовуються процеси гальванопластики і гальванічного покриття золотом та сріблом.

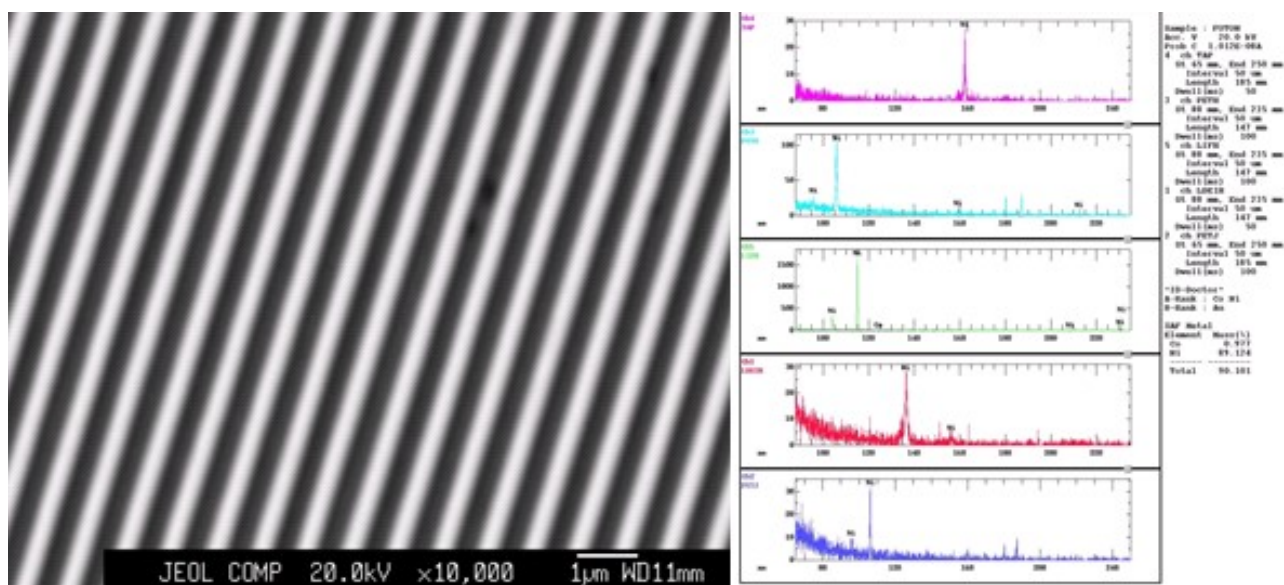


Рисунок 25 – Поверхня матриці для виготовлення підкладок оптичного диску CD-R. SEM зображення. На врізці наведено результати EDX аналізу складу матриці - Ni₉₉Co₁.

8.4. Гальванопластична реплікація та суміжні технології

Гальванопластика потребує електропровідної поверхні мастера, тоді як більшість літографічних технологій продукують рельєф в діелектричному шарі резисту. Тому перед гальванопластикою на поверхню мастера наносять електропровідний шар. Оскільки перші атомарні шари гальванічного нікелю утворюють двовимірний перколяційний шар при товщині 5нм і мають високу електропровідність, функціями цього додаткового шару є забезпечення

електропровідності (питрмого опору 10 кОм/квадрат достатньо), механічного розділення поверхонь мастера та матриці після завершення росту, запобігання розшаруванню в процесі гальванічного росту. Для прецизійних технологій необхідно враховувати товщину та рівномірність покриття нанооб'єктів електропровідним шаром, оскільки матеріал цього шару має недостатню зносостійкість і твердість та є жертвним. Одним з найбільш поширених технологічних рішень є магнетронне напилення плівки срібла товщиною біля 20нм. Розроблено, також, магнетронне напилення тонкого шару сплаву платини, який стає суцільним при товщині 3,5нм. Найбільш економним рішенням є осадження шару Cu_2S або Ni_2S товщиною від 4,5 нм до 10 нм іонним нашаруванням з розчинів (метод SILAR).

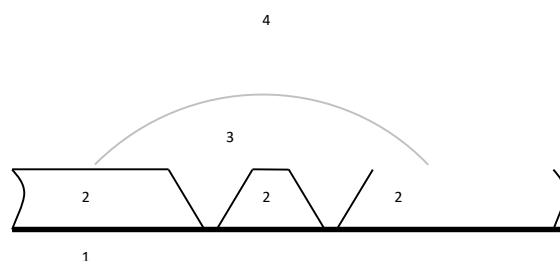


Рисунок 26 – Локальна гальванопластика в діелектричному вікні: 1- металева підкладка; 2- діелектрична маска; 3- нано-розмірна металева деталь, вирощена гальванічно; 4-електроліт.

Гальванопластичний процес може використовуватися для продукування і тиражування певних виробів безпосередньо. Напрацьований набір технічних рішень, який називають гальванопластичним монтажем або гальванопластичною реплікацією. Приклад застосування гальванопластичі реплікації для тиражування точних нанодеталей наведено на Рисунку 26. Гальванопластика виконується локально, в місцях обмежених масками (Рисунок 26) і використовується для вирощування окремих мікро- та нано-розмірних елементів на поверхні [81,85] з наступним їх відшаруванням. Тиражування нанорозмірних деталей (3, Рисунок 26), реалізується шляхом гальванопластики в отворах діелектричної маски 2,

виготовлених електронопроменевою літографією в шарі електронорезисту на поверхні титанової пластини 1. Для реалізації роз'єму мастера та матриці або гальванічної копії (Рисунок 26) без руйнування мастера важливе забезпечення позитивних кутів нахилу бічних стінок.

Відділення пластмасової репліки від поверхні форми після завершення процесу інжекційного лиття під тиском відбувається за принципово можливої умови незмочування форми розплавленим пластиком. Для мікро- та нано-розмірних деталей важливим моментом при проектуванні може виявитися врахування карпілярних радіусів, навіть якщо тиск був 10^7 Па. Також важливе врахування особливостей течії пластмаси в формі і ущільнення полімеру під тиском 10^7 - 10^8 Па, адже зменшення об'єму полімеру може становити 2-5%, що сильно залежить від олігомерного складу, кількості адсорбованої води, пластифікуючих додатків.

Репліація суттєво знижує вартість копії у порівнянні з вартістю оригіналу та матриці при великих тиражах. Вартість проектування і виготовлення оригіналу, матриці та форми виявляється великою, оскільки використовуються високоточні технології. Сучасні технології, також, дозволяють дублювати певні вироби з якістю оригіналу (наприклад методом 3D друку). Доцільність використання дублікації, або реплікації як альтернативи, визначається економічними факторами та можливістю відтворення прецизійних функціональних елементів оригіналу. Альтернативною до гальванопластики є технологія надтвердих SiC темплатів [84]. Для формування рельєфу використовують реактивну інно-пучкову літографію, оригінал може бути віртуальним. Такі темплати здатні деформувати не тільки полімери, а і сталь.

8.5 Бюджет похибок гальванопластичної реплікації

Таким чином, основні джерела та величини похибок наступні:

Діаметр критичного зародку нікелю - 2 нм .

Товщина розділового шару оксиду або гідроксиду на поверхні матриці 2-5 нм.

Товщина жертвовного електропровідного шару - 3,5 -20 нм .

Термічне розширення пласмаси в результаті лиття під тиском в форму приблизно 10^{-4} макроскопічних розмірів елементів, можливе анізотропне ущільнення .

Реплікація гальванопластикою забезпечує точність копіювання 3-20 нм.

Реплікація литтям пластмаси під тиском в форму може забезпечувати точність копіювання окремих мікроелементів з точністю близько 10 нм, але процес проектування потребує врахування багатьох факторів, в тому числі і технологічних умов лиття під тиском.

8.6 Проектування технологічної установки гальванопластики нікелем

Для обох методів реплікації, як для виготовлення форм, так і для гальванопластичної реплікації, критично важливою є технологія гальванопластики. З наведеного огляду можна зробити висновок, що найбільш перспективним технологічним процесом для реалізації задач проекту є гальванопластика нікелем в сульфаміновокислому електроліті з розчинними анодом з активованого нікелю. Для забезпечення рівномірного росту , підвищення максимальної швидкості росту та зменшення внутрішніх механічних напружень установка забезпечує неперервну фільтрацію та гідромеханічну активацію поверхні струменем електроліту. Оскільки необхідно забезпечити безперервний ріст протягом кількох діб, система електроживлення забезпечена резервним акумуляторним джерелом.

Загальний вигляд гальванічної ванни наведено на рисунку 27 а копія креслення в додатку 3. Установка включає систему терморегулювання, циркуляції і фільтрації електроліту, безперебійного живлення з акумуляторним додатковим джерелом електроживлення, систему обліку заряду в колі катода. Діелектричні елементи ванни виготовляють з поліпропелену зварюванням, Електропровідні елементи, які контактують з електролітом, виготовляють з високочистого титану.

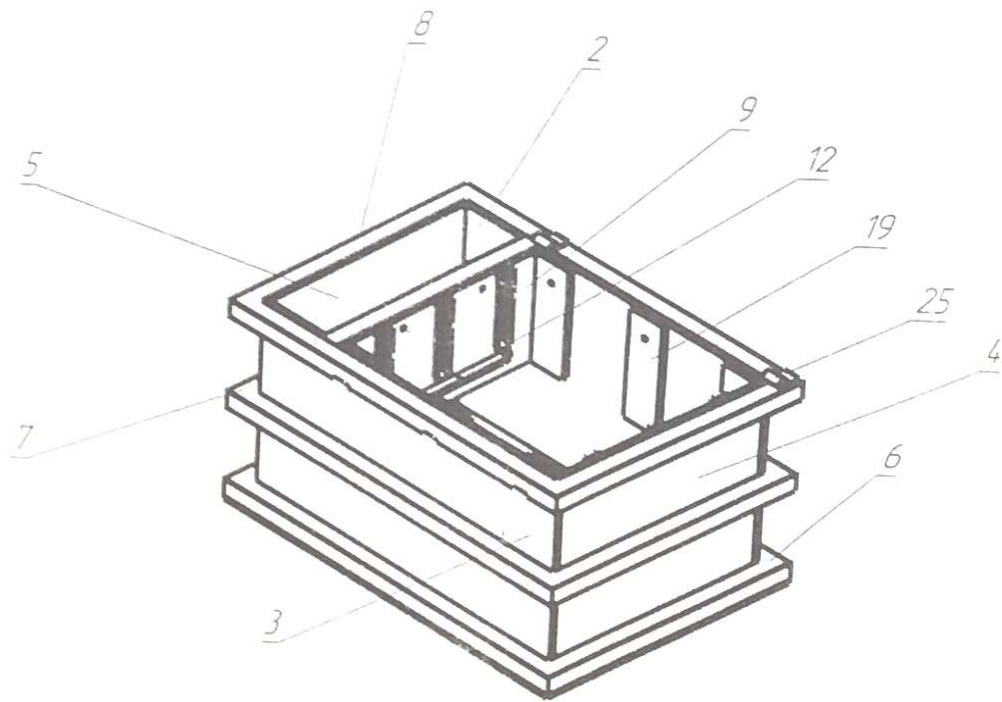


Рисунок 27 – Загальний вигляд гальванічної ванни для гальванопластики нікелем:
1-25 основні конструктивні елементи з поліпропілену.

Таким чином можна зазначити, що гальванопластика є розвинутою технологією, широко використовується в промисловості для зменшення вартості пластмасових виробів при масовому виробництві. Гальванопластика забезпечує унікальну високу точність копіювання поверхні ма­стеру – практично 3-20 нм в залежності від технологічних особливостей. Методи гальванопластичної реплікації металом мають точність копіювання і відтворення до 1 нм.

Розроблено технологічні рішення і ряд оригінальних прийомів для тиражування елементів нанооптики.

ВИСНОВКИ

В процесі виконання проєкту, в зв'язку з відсутністю фінансування та пандемією були вирішені не всі заплановані в 2018 році завдання. Так виготовлення німецьким партнером зразків з великими періодами, що дозволить збуджувати поверхневий плазмон через ґраткові моди ще тільки починається. Також для електроформінгу та реплікації поки розроблений лише підхід. Виготовлення відповідного обладнання неможливе за пів року та потребує додаткового фінансування.

В той же час при виконанні проєкту розроблений повний формалізм для перенорміровки поляризованості частинки кінцевого розміру з квадратної ґратки на шаруватій підкладці з урахуванням всіх дипольних взаємодій в такій системі. Вперше запропоновано використати підхід ближньопольової оптики для розрахунку впливу шаруватої підкладки на поляризованість мезоскопічної частинки. Розраховані ґраткові суми для широкого діапазону співвідношення періоду ґратки та довжини хвилі. Вперше напряду врахований вплив диполів зображення з окремої площини та показано, що цей вплив призводить до, хоч і слабкої, але гібридизації X- та Z- компонент поляризованості окремої частинки. Явно продемонстровано, що наявність ґратки породжує ефективне двозаломлення в системі, яке прив'язане до площини падіння та змінюється з кутом падіння.

Експериментально доведено гібридизацію плазмонних мод системи та продемонстровано, що наявність поверхневого плазмону суттєво модифікує міжчастинкові взаємодії. Тож подальшим розвитком моделі має бути врахування міжчастинкових взаємодій через поверхневий плазмон.

Розроблений підхід для використання гальванопластики для реплікації подібних нанорозмірних структур.

Публікації за проектом

Запрошена стаття в тематичній колекції “Plasmonics: Enabling Functionalities with Novel Materials”

1. E. Bortchagovsky, Yu. Demydenko, A. Bogoslovskaya, J. Tang, F. Dai, M. Fleischer, I. Milekhin, A. Sharma, G. Salvan, D. R. T. Zahn, “Microellipsometry study of plasmonic properties of metal–insulator–metal structures with ordered lattices of nanoparticles”, *J. Appl. Phys.* **129**, 123104 (2021) (Q2)
<https://doi.org/10.1063/5.0039164>

Практично відповідно до завдань проекту внесок авторів наступний:

- J. Tang, F. Dai, M. Fleischer (Тюбінген) – виготовлення зразків та скануюча електронна мікроскопія;
- I. Milekhin, A. Sharma, G. Salvan, D. R. T. Zahn (Хемніц) – мікроеліпсометрія;
- E. Bortchagovsky, Yu. Demydenko, A. Bogoslovskaya (Київ) – побудова моделі та обробка і інтерпретація результатів.

Готується до публікації

2. E. Bortchagovsky, T. Mishakova, “Exhibition of film’s resonances in ellipsometric spectra and Berreman effect”, буде направлено в *Appl. Opt.* (Q1)
3. E. Bortchagovsky, A. Bogoslovskaya, T. Mishakova, F. Dai, J. Tang, M. Fleischer, I. Milekhin, D.R.T. Zahn, R. Kenaz, R. Rapaport, “Lattice orientation dependences of plasmonic properties of ordered structures of nanoparticles and lattice sums”, буде направлено в спеціальний випуск журналу *Micro and Nano Engineering* “Plasmonics and Nanophotonics: Trends, Techniques and Applications”. (Q1/Q2)

Представлення на конференціях і тези

4. E. Bortchagovsky, F. Dai, M. Fleischer, P.-M. Adam, R. Kenaz, R. Rapaport, “Microellipsometric registration of strong coupling in MIM structures with ordered lattice of plasmonic nanoparticles”, 8th International Conference on Spectroscopic Ellipsometry ICSE8, Barcelona (Spain), May 2019, Conference Program & Abstracts. p.160.

5. E. Bortchagovsky, "Ellipsometry of nanostructured layers", 12th International Conference "Electronic Processes in Organic and Inorganic Materials" (ICEPOM-12), Kamianets-Podilski (Ukraine), June 2020, Conference Abstracts. p.53.
6. E.G. Bortchagovsky, Yu.V. Demydenko, "Absorption spectra of a layer of metallic ellipsoidal nanoparticles on a surface supporting surface plasmon", 12th International Conference "Electronic Processes in Organic and Inorganic Materials" (ICEPOM-12), Kamianets-Podilski (Ukraine), June 2020, Conference Abstracts. p.56.
7. E. Bortchagovsky, F. Dai, J. Tang, M. Fleischer, I. Milekhin, D. Zahn, R. Kenaz, R. Rapaport, "Microellipsometric investigations of MIM structures with ordered lattices of plasmonic nanoparticles", 12th International Conference "Electronic Processes in Organic and Inorganic Materials" (ICEPOM-12), Kamianets-Podilski (Ukraine), June 2020, Conference Abstracts. p.108.
8. E. Bortchagovsky, T. Mishakova, "Exhibition of resonances in ellipsometric spectra", 11th Workshop on ellipsometry (WSE10), Steyr (Austria), September 2021, Abstract Book p.14-15.
9. E. Bortchagovsky, Yu. Demydenko, A. Bogoslovska, T. Mishakova, F. Dai, J. Tang, M. Fleischer, I. Milekhin, D.R.T. Zahn, "Plasmonic properties of an ordered lattice of nanocylinders on a substrate supporting surface plasmons probed by imaging ellipsometry", 11th Workshop on ellipsometry (WSE10), Steyr (Austria), September 2021, Abstract Book p.52.
10. E. Bortchagovsky, A. Bogoslovska, T. Mishakova, F. Dai, J. Tang, M. Fleischer, I. Milekhin, D.R.T. Zahn, R. Kenaz, R. Rapaport, "Microellipsometric investigation of MIM structures with an ordered lattice of plasmonic nanocylinders", 11th Workshop on ellipsometry (WSE10), Steyr (Austria), September 2021, Abstract Book p.53-54.

Література

1. Р. Аззам, Н. Башара, *Эллисометрия и поляризованный свет*, Мир, 1981.
2. K. Roodenko, J. Rappich, F. Yang, X. Zhang, N. Esser, and K. Hinrichs, “Anisotropy in hydrogen-passivated and organically modified nanoporous silicon surfaces studied by polarization dependent IR spectroscopy”, *Langmuir* **25**, 1445-1452 (2009).
3. E. Bortchagovsky, Yu. Demydenko, A. Bogoslovskaya, J. Tang, F. Dai, M. Fleischer, I. Milekhin, A. Sharma, G. Salvan, and D. R. T. Zahn, “Microellipsometry study of plasmonic properties of metal–insulator–metal structures with ordered lattices of nanoparticles”, *J. Appl. Phys.* **129**, 123104 (2021)
4. E. G. Bortchagovsky, A. Dejneka, L. Jastrabik, V. Z. Lozovski, and T. O. Mishakova, “Deficiency of standard Effective-Medium Approximation for ellipsometry of layers of nanoparticles”, *J. Nanomater* **2015**, 602488 (2015).
5. E. G. Bortchagovsky and U. C. Fischer, “On the modulation of optical transmission spectra of thin dye layers by a supporting medium”, *J. Chem. Phys.* **117**, 5384-5392 (2002).
6. L. S. Bartell and D. Churchill, “Polarimetric determination of absorption spectra of thin films on metal I. Interpretation of optical data”, *J. Phys. Chem.* **65**, 2242-2247 (1961).
7. P. Drude, “Ueber Oberflächenschichten II Theil”, *Ann. Phys. Chem.* **36**, 865-897 (1889).
8. R. C. Maclaurin, “On the intensity of light reflected from transparent substrates”, *Proc. R. Soc. Lond. A* **79**, 18-30 (1907).
9. C. E. Leberknight and B. Lustman, “An optical investigation of oxide films on metals”, *J. Opt. Soc. Am.* **29**, 59-66 (1939).
10. F. A. Lucy, “Studies of surface films by reflection of polarized light. I. A more rigorous algebraic method for computing results”, *J. Chem. Phys.* **16**, 167-174 (1948).

11. R. J. Archer and G. W. Gobeli, "Measurement of oxygen adsorption on silicon by ellipsometry", *J. Phys. Chem. Solids* **26**, 343-351 (1965).
12. M. J. Dignam, B. Rao, M. Moskovits, and R. W. Stobie, "Ellipsometric determination of the spectra of adsorbed molecules", *Can. J. Chem.* **71**, 1115-1132 (1971).
13. J. D. E. McIntyre and D. E. Aspnes, "Differential reflection spectroscopy of very thin surface films", *Surf. Sci.* **24**, 417-434 (1971).
14. K. Hingerl, D. E. Aspnes, I. Kamiya, and L. T. Florez, "Relationship among reflectance-difference spectroscopy, surface photoabsorption, and spectroellipsometry", *Appl. Phys. Lett.* **63**, 885-887 (1993).
15. I. K. Kim and D. E. Aspnes, "Toward nkd spectroscopy: Analytic solution of the three-phase model of polarimetry in the thin-film limit", *Appl. Phys. Lett.* **88**, 201107 (2006).
16. E. G. Bortchagovsky, "Ellipsometric method for investigation of the optical anisotropy of thin films: theory and calculations", *Thin Solid Films* **307**, 192-199 (1997).
17. E. G. Bortchagovsky and O. M. Getsko, "Comparison of ellipsometric methods for separate determination of thickness and optical constants of thin films", *SPIE Proc* **4517**, 126-133 (2001).
18. E. G. Bortchagovsky, "Possibilities of ellipsometry with the surface plasmon excitation in the investigation of thin films in comparison with separated ellipsometry and surface plasmon spectroscopy" *SPIE Proc* **3094**, 239-249 (1997).
19. E. G. Bortchagovsky and O. M. Getsko, "Invisible layers in ellipsometry", *Thin Solid Films* **234**, 553-556 (1993).
20. E. G. Bortchagovsky, "Some aspects of a thin film ellipsometry", *SPIE Proc.* **2113**, 12-16 (1994).
21. A. C. Hall, "A century of ellipsometry", *Surf. Sci.* **16**, 1-13 (1969).
22. D. W. Berreman, "Infrared absorption at longitudinal optic frequency in cubic crystal films", *Phys. Rev.* **130**, 2193-2198 (1963).

23. B. Harbecke, B. Heinz, and P. Grosse, "Optical properties of thin films and the Berreman effect", *Appl. Phys. A* **38**, 263-267 (1985).
24. A. Röseler, "Spectroscopic infrared ellipsometry" in *Handbook of ellipsometry*, H. G. Tompkins and E. A. Irene (eds.), Springer, 763-798 (2005).
25. H. Arwin and D. E. Aspnes "Determination of optical properties of thin organic films by spectroellipsometry", *Thin Solid Films* **138**, 195-207 (1986).
26. J. P. Johnson and R. W. Christy, "Optical constants of the noble metals", *Phys. Rev. B* **6**, 4370-4379 (1972).
27. G. E. Jellison Jr., "Optical functions of silicon determined by two-channel polarization modulation ellipsometry", *Opt. Mater.* **1**, 41-47 (1992).
28. M. Meier, A. Wokaun, P. F. Liao, "Enhanced fields on rough surfaces: dipolar interactions among particles of sizes exceeding the Rayleigh limit", *J. Opt. Soc. Am. B* **2** (1985) 931-949.
29. J. Venermo, A. Sihvola, "Dielectric polarizability of circular cylinder", *J. Electrostat.* **63** (2005) 101-117.
30. R. Gans, "Über die Form ultramikroskopischer Silberteilchen", *Ann. d. Phys.* **47** (1915) 270-284.
31. J. D. Jackson, *Classical electrodynamics*, Wiley (New York) 1962.
32. E. C. Stoner, "The Demagnetizing Factors for Ellipsoids", *Philos. Mag.* **36** (1945) 803-821.
33. G. Mie, "Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen", *Ann. d. Phys.* **25** (1908) 377-445.
34. S. Asano, G. Yamamoto, "Light Scattering by a Spheroidal Particle", *Appl. Opt.* **14** (1975) 29-49.
35. N. V. Voshchinnikov, V. G. Farafonov, "Optical properties of spheroidal particles", *Astrophys. Space Sci.* **204** (1993) 19-86.
36. M. Meier, A. Wokaun, "Enhanced fields on large metal particles: dynamic depolarization," *Opt. Lett.* **8** (1983) 581-583.

37. H. Kuwata, H. Tamaru, K. Esumi, K. Miyano, “Resonant light scattering from metal nanoparticles: Practical analysis beyond Rayleigh approximation”, *Appl. Phys. Lett.* **83** (2003) 4625-4627.
38. K. L. Kelly, E. Coronado, L. L. Zhao, G. C. Schatz, “The optical properties of metal nanoparticles: the influence of size, shape, and dielectric environment”, *J. Phys. Chem. B* **107** (2003) 668-677.
39. A. Moroz, “Depolarization field of spheroidal particles”, *J. Opt. Soc. Am. B* **26** (2009) 517-527.
40. A. Sommerfeld, “Über die Ausbreitung der Wellen in der drahtlosen Telegraphie”, *Ann. d. Phys.* **28** (1909) 665-736.
41. H. Weyl, “Ausbreitung elektromagnetischer Wellen über einem ebenen Leiter”, *Ann. d. Phys.* **60** (1919) 481–500.
42. M. Paulus, P. Gay-Balmaz, O. J. F. Martin, “Accurate and efficient computation of the Green’s tensor for stratified media”, *Phys. Rev. E* **62** (2000) 5797-5807.
43. B. Wang, C. H. Woo, “Atomic force microscopy-induced electric field in ferroelectric thin films”, *J. Appl. Phys.* **94** (2003) 4053-4059.
44. S. G. Moiseev, S. V. Sukhov, “Near-Field Optical Microscopy in the Presence of an Intermediate Layer”, *Opt. Spectrosc.* **98** (2005) 308-313.
45. B. Hauer, A. P. Engelhardt, T. Taubner, “Quasi-analytical model for scattering infrared near-field microscopy on layered systems”, *Opt. Express* **20** (2012) 13173-13188.
46. L. M. Zhang, G. O. Andreev, Z. Fei, A. S. McLeod, G. Dominguez, M. Thiemens, A. H. Castro-Neto, D. N. Basov, M. M. Fogler, “Near-field spectroscopy of silicon dioxide thin films”, *Phys. Rev. B* **85** (2012) 075419.
47. J. M. Vigoureux, D. Courjon, “Detection of nonradiative fields in light of the Heisenberg uncertainty principle and the Rayleigh criterion”, *Appl. Opt.* **31** (1992) 3170-3177.
48. На відміну від тверджень у [45] та [46] повздовжній хвильовий вектор повинен визначатися виразом (29), а не тільки оберненим розміром. Це виходить з принципу невизначеності Гейзенберга $\Delta x \Delta k > 2\pi$

49. K. Jang, W. Jhe, “Nonglobal model for a near-field scanning optical microscope using diffraction of the optical near field”, *Opt. Lett.* **21** (1996) 236-238.
50. E. G. Bortchagovsky, T. O. Mishakova, K. Hingerl, “Ellipsometry of monolayers of metallic nanoparticles taking into account depolarization”, *Thin Solid Films* **571** (2014) 625-630.
51. М. Борн, Э. Вольф, *Основы оптики*, Наука, 1973.
52. G. Floquet, “Sur les équation différentielles linéaires à coefficients périodiques,” *Annales Scientifiques de l'École Norm. Sup.* **12** (1883) 47-88.
53. T. Yamaguchi, S. Yoshida, A. Kinbara, “Effect of retarded dipole-dipole interactions between island particles on the optical plasma-resonance absorption of a silver-island film”, *J. Opt. Soc. Am.* **64** (1974) 1563-1568.
54. G. F. Walsh, C. Forestiere, L. Dal Negro, “Plasmon-enhanced depolarization of reflected light from arrays of nanoparticle dimers”, *Opt. Express* **19** (2011) 21081-21090.
55. V. A. Markel, “Coupled-dipole approach to scattering of light from a one-dimensional periodic dipole structure”, *J. Mod. Opt.* **40** (1993) 2281-2291.
56. B. N. J. Perrson, “Lateral interactions in small particle systems”, *J. de Physique (Colloque)* **44** (1983) C10-409-C10-420.
57. O. Keller, M. Xiao, S. Bozhevolnyi, “Configurational resonances in optical near-field microscopy: a rigorous point-dipole approach”, *Surf. Sci.* **280** (1993) 217-230.
58. H. R. Stuart, D. G. Hall, “Enhanced dipole-dipole interaction between elementary radiators near a surface”, *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998) 5663-5666.
59. D. E. Aspnes, “Local-field effects and effective-medium theory: a microscopic perspective”, *Am. J. Phys.* **50** (1982) 704-709.
60. E. G. Bortchagovsky, A. Dejneka, L. Jastrabik, V. Z. Lozovski, T. O. Mishakova, “Deficiency of standard Effective-Medium Approximation for ellipsometry of layers of nanoparticles”, *J. Nanomater.* **2015** (2015) 602844.
61. M. Schubert, “Polarization-dependent optical parameters of arbitrarily anisotropic homogeneous layered systems”, *Phys. Rev. B* **53** (1996) 4265-4274.

62. M. Schubert, “Theory and application of generalized ellipsometry” in *Handbook of ellipsometry*, H. G. Tompkins, E. A. Irene (eds.), Springer 2005, 637-717.
63. W. Hampe, “Beitrag zur Deutung der anomalen optischen Eigenschaften feinstteiliger Metallkolloide in großer Konzentration”, *Z. Phys.* **152** (1958) 476-494.
64. S. Yamaguchi, “The resonance type absorption of very thin silver and gold films”, *J. Phys. Soc. Jap.* **15** (1960) 1577-1585.
65. Y. Chu, K. B. Crozier, “Experimental study of the interaction between localized and propagating surface plasmons”, *Opt. Lett.* **34** (2009) 244-246.
66. R. Nicolas, G. Lévêque, J. Marae-Djouda, G. Montay, Y. Madi, J. Plain, Z. Herro, M. Kazan, P.-M. Adam, T. Maurer, “Plasmonic mode interferences and Fano resonances in Metal-Insulator-Metal nanostructured interface”, *Sci. Rep.* **5** (2015) 14419.
67. Y. Nishijima, L. Rosa, S. Juodkazis, “Surface plasmon resonances in periodic and random patterns of gold nano-disks for broadband light harvesting”, *Opt. Express* **20** (2012) 11466-11477.
68. A. Rueda, M. Stemmler, R. Bauer, Yu. Fogel, K. Müllen, M. Kreiter, “Localized plasmons seen by propagating surface plasmons: unique determination of their dielectric response”, *J. Phys. Chem. C* **112** (2008) 14801–14811.
69. E. Bortchagovsky, “Plasmonic coupling and how standard ellipsometry can feel surface plasmon”, *J. Vac. Sci. Technol. B* **38** (2020) 013603.
70. E. Bortchagovsky, A. Bogoslovska, T. Mishakova, F. Dai, J. Tang, M. Fleischer, I. Milekin, D.R.T. Zahn, R. Kenaz, R. Rapaport, “Microellipsometric investigation of MIM structures with an ordered lattice of plasmonic nanocylinders”, 11th Workshop on ellipsometry (WSE10), Steyr (Austria), September 2021, Abstract Book p.53-54.
71. J. Topping, “On the mutual potential energy of a plane network of doublets”, *Proc. R. Soc. (London) A* **114** (1927) 67-72.
72. Д. В. Сивухин, “Молекулярная теория отражения и преломления света”, *ЖЭТФ* **18** (1948) 976-994; **21** (1951) 367-376.

73. B. M. E. Van der Hoff, G. C. Benson, “A method for the evaluation of some lattice sums occurring in calculations of physical properties of crystals”, *Can. J. Phys.* **31** (1953) 1087-1094.
74. A. Bagchi, R. G. Barrera, R. Fuchs, “Local field effect in optical reflectance from adsorbed overlayers”, *Phys. Rev. B* **25** (1981) 7086-7096.
75. G. D. Mahan, A. A. Lucas, “Collective vibrational modes of adsorbed CO”, *J. Chem. Phys.* **68** (1978) 1344-1348.
76. B. R. A. Nijboer, F. W. de Wette, “On the calculation of lattice sums”, *Phys.* **23** (1957) 309-321.
77. T. Yamaguchi, S. Yoshida, A. Kinbara, “Optical effect of the substrate on the anomalous absorption of aggregated silver films”, *Thin Solid Films* **21** (1974) 173-187.
78. Г.А. Садаков, *Гальванопластика*, М. Машиностроение, 1987, 288 с.
79. Г. Менгес, В. Микаэли, П. Морен, *Как делать литьевые формы*, С.-Пб., Профессия, 2007, 613 с
80. A. Flynn, *Clear and Unbiased Facts About CD Duplication*, 2015. Lulu.com
81. https://nickel institute.org/media/1674/electroforming_aunique metal fabrication process_10084_.pdf
82. Б. Б. Дамаскин, *Электрохимия*. М.: Высшая школа, 2020, 670 с.
83. “Пристрій для нарощування гальванічних покриттів”, Патент №73551, 15.08.2005, Бюл. № 8, 2005 р. Петров В. В., Ковтун В. Д., Крючин А. А., Дорошенко Т. П., Боднар Є. В., Заболотний В. О., Савицький А. М.
84. Y. Chen, Y. Zhou, G. Pan, E. Huq, B.-R. Lu, S.-Q. Xie, J. Wan, Z. Shu, X.-P. Qu, R. Liu, S. Banu, S. Birtwell, L. Jiang, “Nanofabrication of SiC templates for direct hot embossing for metallic photonic structures and meta materials”, *Microelectronic Engineering* **85** (2008) 1147–115.
85. N. Lee, Y. Kim, S. Kang, J. Hong, “Fabrication of metallic nano-stamper and replication of nano-patterned substrate for patterned media”, *Nanotechnol.* **15** (2004) 901-906.

Додаток 1. Підхід до розрахунку ґраткових сум

ґраткові суми різного роду є темою багатьох робіт. У багатьох випадках результати для квадратних ґраток диполів були отримані в статичному наближенні без урахування фазової затримки, як у випадку одного шару диполів [71-74], або також з врахуванням диполів зображення [74,75]. Загальний підхід для прискорення збіжності ґраткових сум був запропонований у [76]. Однак, наскільки нам відомо, єдина робота, яка декларує врахування як фазової затримки в міжчастинкових взаємодіях так і додатковим зсув фаз (37) при падінні світла під кутом є [53]. Нажаль, вплив поляризації підкладки розглядається в [53], як і раніше в [77], шляхом зміщення площини диполів зображення до площини початкових диполів та підсумовування цих двох значень, тому враховується лише одна ґратка диполів.

Незважаючи на відсутність необхідних виразів, ми можемо формально розглядати наш випадок, посилаючись на обчислені значення з [53], додаючи та віднімаючи диполі зображення до реальних диполів. В результаті ми отримуємо нескінченну ґраткову суму реальних диполів з доданими диполями зображення, як у [53], та дві паралельні ґратки протилежних диполів, збіжність поля у початку координат від яких відбувається швидше оскільки різниця між R_{jlz} та R_{jl-z} зменшується зі зростанням j і l . Однак такий підхід дає суми, які залежать від статичного коефіцієнту відбиття (28)-(31) і мають перераховуватися для кожної довжини хвилі та для кожного розміру наночастинок та кожної нової підкладки.

Таким чином простіше порахувати 7 ґраткових сум в (39), які не залежать від частинок та підкладки, оскільки тут статичний коефіцієнт відбиття це лише множник до другої матриці. Беручи до уваги симетрію системи щодо вісей X і Y (індекси j та l), необхідними ґратковими сумами є:

$$\begin{aligned}
A_1 &= 2\alpha^3 \sum_{j=1}^{\infty} \left(\left(\frac{(\alpha j)^2}{R_{j0z}^2} c_{j0z} - b_{j0z} \right) \cos \left(j2\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sin\theta \right) - b_{j0z} \right) e^{ikR_{j0z}} \\
&\quad + 4\alpha^3 \sum_{j,l=1}^{\infty} \left(\frac{(\alpha j)^2}{R_{jlz}^2} c_{jlz} - b_{jlz} \right) \cos \left(j2\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sin\theta \right) e^{ikR_{jlz}} \\
&= 2 \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j^3} \left(2 \left[1 - i2\pi \frac{\alpha}{\lambda} j \right] \cos \left(j2\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sin\theta \right) - \left[1 - i2\pi \frac{\alpha}{\lambda} j - 4\pi^2 \left(\frac{\alpha}{\lambda} \right)^2 j^2 \right] \right) e^{i2\pi \frac{\alpha}{\lambda} j} \\
&\quad + 4 \sum_{j,l=1}^{\infty} \frac{1}{(j^2 + l^2)^{3/2}} \left(\frac{j^2}{j^2 + l^2} \left[3 - i6\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sqrt{j^2 + l^2} - 4\pi^2 \left(\frac{\alpha}{\lambda} \right)^2 (j^2 + l^2) \right] \right. \\
&\quad \left. - \left[1 - i2\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sqrt{j^2 + l^2} - 4\pi^2 \left(\frac{\alpha}{\lambda} \right)^2 (j^2 + l^2) \right] \right) \cos \left(j2\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sin\theta \right) e^{i2\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sqrt{j^2 + l^2}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_1 &= 2\alpha^3 \sum_{j=1}^{\infty} \left(\left(\frac{(\alpha j)^2}{R_{j0z}^2} c_{j0z} - b_{j0z} \right) - b_{j0z} \cos \left(j2\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sin\theta \right) \right) e^{ikR_{j0z}} \\
&\quad + 4\alpha^3 \sum_{j,l=1}^{\infty} \left(\frac{(\alpha l)^2}{R_{jlz}^2} c_{jlz} - b_{jlz} \right) \cos \left(j2\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sin\theta \right) e^{ikR_{jlz}} \\
&= 2 \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j^3} \left(2 \left[1 - i2\pi \frac{\alpha}{\lambda} j \right] - \left[1 - i2\pi \frac{\alpha}{\lambda} j - 4\pi^2 \left(\frac{\alpha}{\lambda} \right)^2 j^2 \right] \cos \left(j2\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sin\theta \right) \right) e^{i2\pi \frac{\alpha}{\lambda} j} \\
&\quad + 4 \sum_{j,l=1}^{\infty} \frac{1}{(j^2 + l^2)^{3/2}} \left(\frac{l^2}{j^2 + l^2} \left[3 - i6\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sqrt{j^2 + l^2} - 4\pi^2 \left(\frac{\alpha}{\lambda} \right)^2 (j^2 + l^2) \right] \right. \\
&\quad \left. - \left[1 - i2\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sqrt{j^2 + l^2} - 4\pi^2 \left(\frac{\alpha}{\lambda} \right)^2 (j^2 + l^2) \right] \right) \cos \left(j2\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sin\theta \right) e^{i2\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sqrt{j^2 + l^2}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D_1 &= -2\alpha^3 \sum_{j=1}^{\infty} b_{j0z} \left(1 + \cos \left(j2\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sin\theta \right) \right) e^{ikR_{j0z}} - 4\alpha^3 \sum_{j,l=1}^{\infty} b_{jlz} \cos \left(j2\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sin\theta \right) e^{ikR_{jlz}} \\
&= -2 \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j^3} \left[1 - i2\pi \frac{\alpha}{\lambda} j - 4\pi^2 \left(\frac{\alpha}{\lambda} \right)^2 j^2 \right] \left(1 + \cos \left(j2\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sin\theta \right) \right) e^{i2\pi \frac{\alpha}{\lambda} j} \\
&\quad - 4 \sum_{j,l=1}^{\infty} \frac{1}{(j^2 + l^2)^{3/2}} \left[1 - i2\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sqrt{j^2 + l^2} \right. \\
&\quad \left. - 4\pi^2 \left(\frac{\alpha}{\lambda} \right)^2 (j^2 + l^2) \right] \cos \left(j2\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sin\theta \right) e^{i2\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sqrt{j^2 + l^2}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D_2 &= 2\alpha^3 \sum_{j=1}^{\infty} \left(\frac{\left(\frac{2Z}{\alpha} \right)^2}{R_{j0-z}^2} c_{j0-z} - b_{j0-z} \right) \left(1 + \cos \left(j2\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sin\theta \right) \right) e^{ikR_{j0-z}} \\
&\quad + 4\alpha^3 \sum_{j,l=1}^{\infty} \left(\frac{\left(\frac{2Z}{\alpha} \right)^2}{R_{jl-z}^2} c_{jl-z} - b_{jl-z} \right) \cos \left(j2\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sin\theta \right) e^{ikR_{jl-z}}
\end{aligned}$$

$$E_2 = 2\alpha^3 i \sum_{j=1}^{\infty} \frac{j2Z}{R_{j0-z}^2} c_{j0-z} \sin \left(j2\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sin\theta \right) e^{ikR_{j0-z}} + 4\alpha^3 i \sum_{j,l=1}^{\infty} \frac{j2Z}{R_{jl-z}^2} c_{jl-z} \sin \left(j2\pi \frac{\alpha}{\lambda} \sin\theta \right) e^{ikR_{jl-z}}$$

в той час як A_2 і B_2 - це від'ємні значення A_1 і B_1 після заміни елементів та відстаней з індексами jlZ на елементи та відстані з індексами $jl-Z$.

На відміну від інтегрування за еліпсами, використаного в [53], ці суми були розраховані безпосередньо. Ми не впевнені, що збіжність інтегралу краща за збіжність суми. Підсумовування проводилося по послідовних квадратах навколо початку координат, додаючи до сум значення від діполів з наступного квадрату. Збіжність дуже погана, але за винятком деяких крайніх випадків ($a/\lambda=0$, $a/\lambda=1$ або при аномаліях Вуда) після кількох десятків перших елементів усі суми починають коливатися (з кількома періодами, що створює Муарові картини) навколо деякого середнього значення. Зближення до цього значення відбувається дуже повільно, але визначення цього значення не створює проблем. Щодо випадку $a/\lambda=0$, послідовні суми не коливаються зі збільшенням розміру квадрата оскільки всі внески мають один знак. Ці суми асимптотично і надзвичайно повільно наближаються до деяких значень і обчислена константа $D_1=-9.03359$, яка лише на $3 \cdot 10^{-5}$ менша, ніж у літературі [66], була отримана з апроксимації одномодовою експонентою поведінки останніх 10000 елементів ряду зазначених сум по квадратах до квадрату у 200000×200000 елементів. Те саме було зроблено для A_1 , A_2 та D_2 .

Залежності цих значень від параметра a/λ в діапазоні від 0 до 1 показані на рис. 12. Значення $(2Z/a)=58/150$, що відповідає експериментальній ситуації, було використано для розрахунків елементів від A_2 до E_2 . Аналіз загальної залежності цих елементів від величини $(2Z/a)$ не проводився. Значення, представлені на рис. 12, були отримані з підсумовування квадратів принаймні 2000×2000 ($j, l=1000$).

Додаток 2. Числові значення ґраткових сум та поліноміальні коефіцієнти для їх апроксимації в діапазоні $0.1 < a/\lambda < 0.4$.

Кут падіння 0°

a/λ	$\text{Re}(A_1)$	$\text{Im}(A_1)$	$\text{Re}(B_1)$	$\text{Im}(B_1)$	$\text{Re}(D_1)$	$\text{Im}(D_1)$	$\text{Re}(A_2)$	$\text{Im}(A_2)$	$\text{Re}(B_2)$	$\text{Im}(B_2)$	$\text{Re}(D_2)$	$\text{Im}(D_2)$	$\text{Re}(E_2)$	$\text{Im}(E_2)$
0	4.51679	0	4.51679	0	-9.03359	0	-3.17977	0	-3.17977	0	-6.35915	0	0	0
0.05	4.22901	1.953548	4.22901	1.953548	-9.22486	-0.020063	-2.816267	-1.939063	-2.816267	-1.939063	-6.521995	-0.020032	0	0
0.1	3.373189	3.782714	3.373189	3.782714	-9.790052	-0.164888	-1.750379	-3.668722	-1.750379	-3.668722	-6.998412	-0.163914	0	0
0.15	1.97537	5.363843	1.97537	5.363843	-10.69747	-0.557726	-0.055845	-4.989674	-0.055845	-4.989674	-7.745455	-0.550349	0	0
0.2	0.078658	6.572921	0.078658	6.572921	-11.89518	-1.322592	2.147667	-5.720719	2.147667	-5.720719	-8.694141	-1.29162	0	0
0.25	-2.254401	7.285876	-2.254401	7.285876	-13.30715	-2.583601	4.697462	-5.707595	4.697462	-5.707595	-9.74775	-2.489529	0	0
0.3	-4.93979	7.3787	-4.93979	7.3787	-14.83041	-4.464749	7.392741	-4.830794	7.392741	-4.830794	-10.78219	-4.23202	0	0
0.35	-7.869043	6.72738	-7.869043	6.72738	-16.33069	-7.090033	10.000497	-3.012136	10.000497	-3.012136	-11.64607	-6.590444	0	0
0.4	-10.90429	5.207859	-10.90429	5.207859	-17.63497	-10.58354	12.261334	-0.220078	12.261334	-0.220078	-12.15869	-9.617174	0	0
0.45	-13.87153	2.696132	-13.87153	2.696132	-18.5213	-15.06926	13.895473	3.526299	13.895473	3.526299	-12.10706	-13.34334	0	0
0.5	-16.5506	-0.931813	-16.5506	-0.931813	-18.70339	-20.67119	14.607596	8.155078	14.607596	8.155078	-11.23944	-17.7774	0	0
0.55	-18.65898	-5.800049	-18.65898	-5.800049	-17.80505	-27.51346	14.088208	13.540996	14.088208	13.540996	-9.25181	-22.90415	0	0
0.6	-19.82669	-12.03255	-19.82669	-12.03255	-15.32002	-35.71998	12.009577	19.506502	12.009577	19.506502	-5.763807	-28.68391	0	0
0.65	-19.55339	-19.75332	-19.55339	-19.75332	-10.54195	-45.41472	8.009541	25.824875	8.009541	25.824875	-0.272175	-35.05284	0	0
0.7	-17.12909	-29.08684	-17.12909	-29.08684	-2.431386	-56.72265	1.648324	32.225468	1.648324	32.225468	7.945946	-41.92448	0	0
0.75	-11.48016	-40.15597	-11.48016	-40.15597	10.646864	-69.76545	-7.690986	38.397979	-7.690986	38.397979	20.034007	-49.1867	0	0
0.8	-0.820285	-53.08578	-0.820285	-53.08578	31.534696	-84.66922	-21.05837	44.004296	-21.05837	44.004296	38.049846	-56.7111	0	0
0.85	18.262484	-67.99962	18.262484	-67.99962	65.9146	-101.5566	-40.66184	48.683903	-40.66184	48.683903	66.341487	-64.34748	0	0
0.9	53.934857	-85.02079	53.934857	-85.02079	128.05056	-120.5503	-72.52253	52.066067	-72.52253	52.066067	116.58451	-71.9299	0	0
0.95	136.51213	-104.2641	136.51213	-104.2641	273.57054	-141.7558	-142.1371	53.772781	-142.1371	53.772781	237.77984	-79.26291	0	0
0.99	465.15956	-120.8544	465.15956	-120.8544	892.07916	-159.4191	-440.5444	53.203409	-440.5444	53.203409	806.08221	-83.84608	0	0
0.995	702.33487	-122.4791	702.33487	-122.4791	1355.3037	-160.6194	-668.8962	52.474147	-668.8962	52.474147	1254.1303	-83.27823	0	0
0.999	1661.0572	-156.5323	1661.0572	-156.5323	3314.282	-186.411	-1608.746	46.170972	-1608.746	46.170972	3187.1548	-63.48297	0	0
1	10000	10000	10000	10000	14000	14000	-10000	-10000	-10000	-10000	20000	20000	0	0
1.001	-63.37252	1635.1336	-63.37252	1635.1336	-205.3812	3342.9773	119.49986	-1697.577	119.49986	-1697.577	-347.9945	3401.6655	0	0
1.005	-74.05965	676.65733	-74.05965	676.65733	-225.2767	1410.2013	130.01857	-727.8309	130.01857	-727.8309	-364.3939	1444.735	0	0
1.01	-74.8163	449.07044	-74.8163	449.07044	-224.9265	943.9966	130.508	-492.3985	130.508	-492.3985	-359.6591	961.4008	0	0
1.05	-78.38616	147.22426	-78.38616	147.22426	-217.4786	301.86256	130.39031	-160.9193	130.39031	-160.9193	-317.9537	258.89494	0	0

1.1	-79.3597	67.994685	-79.3597	67.994685	-202.2625	124.50981	123.34646	-62.53292	123.34646	-62.53292	-262.6297	54.108241	0	0
1.15	-75.40312	22.615293	-75.40312	22.615293	-178.9133	26.577016	108.61829	-6.089515	108.61829	-6.089515	-203.4982	-49.83411	0	0
1.2	-64.15696	-14.59757	-64.15696	-14.59757	-143.4958	-47.68566	85.44658	35.230141	85.44658	35.230141	-138.5206	-115.7434	0	0
1.25	-41.2416	-49.9214	-41.2416	-49.9214	-88.42592	-112.4273	51.844462	67.334797	51.844462	67.334797	-62.9595	-160.4617	0	0
1.3	3.213479	-85.76115	3.213479	-85.76115	4.024214	-173.2012	1.832056	91.93634	1.832056	91.93634	35.96299	-190.8921	0	0
1.35	100.89332	-123.3051	100.89332	-123.3051	192.85008	-232.767	-88.49293	109.49223	-88.49293	109.49223	206.11165	-210.5841	0	0
1.4	538.37432	-162.8973	538.37432	-162.8973	1033.536	-292.0137	-477.1787	119.6846	-477.1787	119.6846	955.10884	-220.9466	0	0
1.41	1207.8361	-170.0992	1207.8361	-170.0992	2350.7665	-301.9112	-1114.33	119.82873	-1114.33	119.82873	2212.4691	-220.0245	0	0
1.415	-215.5282	3200	-215.5282	3200	-526.9304	6400	355.23364	-3200	355.23364	-3200	-753.723	6500	0	0
1.45	-228.8838	337.97122	-228.8838	337.97122	-529.484	632.86378	335.80895	-264.1636	335.80895	-264.1636	-662.9674	477.77402	0	0
1.5	-234.4114	143.13954	-234.4114	143.13954	-507.2085	214.93737	288.63562	-18.22014	288.63562	-18.22014	-518.5957	-2.141056	0	0

Кут падіння 15°

a/λ	$\text{Re}(A_1)$	$\text{Im}(A_1)$	$\text{Re}(B_1)$	$\text{Im}(B_1)$	$\text{Re}(D_1)$	$\text{Im}(D_1)$	$\text{Re}(A_2)$	$\text{Im}(A_2)$	$\text{Re}(B_2)$	$\text{Im}(B_2)$	$\text{Re}(D_2)$	$\text{Im}(D_2)$	$\text{Re}(E_2)$	$\text{Im}(E_2)$
0	4.51679	0	4.51679	0	-9.03347	0	-3.17977	0	-3.17977	0	-6.35891	0	0	0
0.05	4.232868	1.886802	4.230494	2.023852	-9.232445	0.117994	-2.828997	-1.873753	-2.817316	-2.009861	-6.538135	0.117083	-0.059807	0.348891
0.1	3.396401	3.647289	3.378427	3.920952	-9.813763	0.106973	-1.807948	-3.544715	-1.753133	-3.810874	-7.055895	0.100443	-0.237586	0.672619
0.15	2.025524	5.162136	1.987831	5.571302	-10.75402	-0.148416	-0.179082	-4.82612	-0.059908	-5.210104	-7.876328	-0.166221	-0.528437	0.946222
0.2	0.168508	6.30371	0.106297	6.851618	-11.99412	-0.775032	1.938361	-5.54069	2.142037	-6.029387	-8.921179	-0.803271	-0.924301	1.145089
0.25	-2.10889	6.949426	-2.197217	7.634278	-13.45237	-1.89905	4.386238	-5.542209	4.689151	-6.112608	-10.08526	-1.919431	-1.414134	1.24501
0.3	-4.726914	6.975168	-4.831142	7.796572	-15.02829	-3.643292	6.977926	-4.71636	7.380665	-5.342487	-11.24382	-3.605839	-1.984136	1.222035
0.35	-7.570652	6.256142	-7.671157	7.215014	-16.57384	-6.131998	9.48606	-2.987971	9.977888	-3.641386	-12.22845	-5.937867	-2.618029	1.05203
0.4	-10.49824	4.670368	-10.55313	5.765241	-17.89828	-9.48749	11.661657	-0.329651	12.208973	-0.976446	-12.83823	-8.969197	-3.297405	0.709703
0.45	-13.33635	2.090729	-13.26382	3.322804	-18.75993	-13.83732	13.24268	3.242428	13.774357	2.635805	-12.83988	-12.73685	-4.002112	0.166701
0.5	-15.85305	-1.604936	-15.50132	-0.236205	-18.8085	-19.30351	13.942663	7.656255	14.326013	7.126594	-11.92163	-17.24879	-4.710673	-0.61206
0.55	-17.75557	-6.538247	-16.82984	-5.033959	-17.55268	-26.00585	13.467694	12.787895	13.447746	12.373132	-9.677899	-22.48606	-5.400752	-1.675694
0.6	-18.65763	-12.84118	-16.56262	-11.19843	-14.23832	-34.08025	11.508629	18.473567	10.576843	18.207323	-5.515788	-28.42069	-6.04963	-3.103012
0.65	-18.01205	-20.62838	-13.43329	-18.84472	-7.511914	-43.63244	7.708938	24.484886	4.746018	24.400004	1.62633	-34.96933	-6.634696	-5.040646
0.7	-15.00097	-30.02437	-4.475731	-28.1076	5.652398	-54.79767	1.613866	30.56068	-6.368634	30.698099	14.213411	-42.05369	-7.133947	-7.817088
0.75	-8.127058	-41.16708	21.945645	-39.15103	36.708315	-67.75381	-7.605237	36.416782	-32.78808	36.840375	42.32701	-49.61471	-7.526515	-12.4496
0.79	3.804306	-51.40802	211.19339	-48.73566	227.70506	-78.85904	-19.88557	40.710393	-214.7123	40.802504	224.06836	-55.28202	-7.753424	-22.40736

0.795	8.208345	-51.40248	-55.15295	672.81543	-40.98167	641.1263	-24.08199	39.845683	57.677419	-679.0095	-50.74586	662.90416	-5.127357	-28.69836
0.8	8.971355	-49.97477	-55.26669	186.15668	-39.68988	151.46615	-24.54533	37.658666	56.978792	-187.8982	-48.6582	168.84967	0.180704	-27.78156
0.85	20.298165	-55.7985	-54.70275	17.633679	-22.39774	-28.1053	-32.87144	36.996479	47.928438	-10.5217	-24.69639	-16.81016	14.611301	-19.03058
0.9	41.856718	-67.66214	-50.85998	-15.83775	5.93984	-68.75697	-50.41372	41.543679	35.401425	22.356733	7.131362	-52.77405	19.680777	-10.90503
0.95	84.955601	-82.74604	-41.54945	-41.2894	57.272916	-100.3248	-86.03923	46.949638	18.292307	42.08053	56.601774	-74.41959	21.679869	-3.157907
1	202.37866	-100.5584	-20.2316	-65.67304	186.98225	-130.1354	-186.2923	51.725934	-7.973332	55.743743	173.29203	-89.90297	21.914474	5.113027
1.05	-73.97494	357.29193	-12.68483	-43.22879	-111.9315	338.96525	137.86452	-383.3502	-12.07314	21.250623	-169.114	355.97943	12.429688	17.369372
1.1	-57.37601	103.09341	3.712157	-71.80267	-71.48164	44.813737	111.51506	-102.6687	-24.82333	40.542877	-111.4589	41.493015	2.121685	13.998919
1.15	-11.06492	29.774185	39.183973	-94.49588	11.952781	-49.19764	60.167217	-21.88718	-53.52668	51.133931	-21.34278	-49.73572	-4.503999	7.740053
1.2	226.89386	-19.87497	175.3372	-119.392	372.163	-115.1398	-162.7669	24.702656	-170.7304	59.720165	315.57519	-100.9425	-9.521953	-7.423052
1.25	-185.7379	205.56375	18.859337	-10.52354	-207.1493	181.70476	258.36138	-133.8881	7.963271	-30.50831	-271.2024	115.56798	24.515853	-11.13069
1.3	-188.1571	91.797454	91.180574	-69.68697	-121.6251	-0.834835	222.46674	7.778067	-59.08623	31.352282	-140.5872	-78.19079	33.130165	10.064141
1.35	-179.7741	28.116676	64.568469	2230.2367	-140.7322	2233.8894	174.7283	80.854727	10.372311	-2267.249	-161.1024	2165.2517	28.839355	49.481795
1.4	-179.3063	-14.96391	-105.5401	90.658559	-288.8362	37.588716	136.26025	122.36492	156.99998	-81.8469	-252.1784	-54.09433	-7.044237	41.922326
1.45	-172.976	-60.93066	-79.59199	-8.848625	-238.4301	-103.9434	92.005332	155.59422	109.81278	23.295599	-157.7238	-171.1358	-22.51212	31.884398
1.5	-158.8953	-108.0529	-30.39494	-75.97957	-161.6903	-206.6614	42.934864	177.72528	46.33487	79.664221	-53.64381	-229.5832	-32.91838	18.777617

Кут падіння 30°

a/λ	Re(A ₁)	Im(A ₁)	Re(B ₁)	Im(B ₁)	Re(D ₁)	Im(D ₁)	Re(A ₂)	Im(A ₂)	Re(B ₂)	Im(B ₂)	Re(D ₂)	Im(D ₂)	Re(E ₂)	Im(E ₂)
0	4.51679	0	4.51679	0	-9.03359	0	-3.17977	0	-3.17977	0	-6.35915	0	0	0
0.05	4.247938	1.689683	4.232642	2.259519	-9.250571	0.550935	-2.868329	-1.680294	-2.818278	-2.246979	-6.579661	0.547816	-0.103637	0.675327
0.1	3.456814	3.252873	3.390792	4.393461	-9.883593	0.973849	-1.962632	-3.179422	-1.758745	-4.294879	-7.21843	0.949691	-0.412256	1.309878
0.15	2.163391	4.570506	2.021939	6.28021	-10.90784	1.152037	-0.518626	-4.331934	-0.071227	-5.957207	-8.235431	1.074983	-0.919021	1.862832
0.2	0.418096	5.514966	0.182618	7.794586	-12.26033	0.956758	1.356212	-4.980127	2.125393	-7.060905	-9.544308	0.78889	-1.612662	2.29314
0.25	-1.709013	5.963405	-2.042818	8.81288	-13.85114	0.265487	3.519018	-4.994895	4.667326	-7.459231	-11.0262	-0.025579	-2.477663	2.559061
0.3	-4.13186	5.79201	-4.536985	9.211103	-15.56517	-1.045572	5.802315	-4.276764	7.348891	-7.037092	-12.53565	-1.471607	-3.494525	2.617121
0.35	-6.725916	4.87584	-7.129849	8.865008	-17.22589	-3.10157	8.001063	-2.761545	9.914265	-5.717186	-13.87025	-3.63551	-4.640085	2.419996
0.4	-9.333126	3.092668	-9.575607	7.651107	-18.587	-6.024197	9.889822	-0.428834	12.050161	-3.465932	-14.77102	-6.579169	-5.887906	1.912249
0.45	-11.7528	0.316062	-11.49653	5.444571	-19.28537	-9.940699	11.229621	2.701575	13.352933	-0.294959	-14.88883	-10.34676	-7.208727	1.021339
0.5	-13.70176	-3.576841	-12.23589	2.121798	-18.69154	-14.97351	11.750299	6.560012	13.220326	3.734232	-13.65941	-14.95257	-8.570947	-0.363029
0.55	-14.77485	-8.707683	-10.42512	-2.44036	-15.52916	-21.24338	11.146057	11.028937	10.498838	8.51052	-9.977813	-20.38298	-9.941173	-2.444644

0.6	-14.28195	-15.20621	-2.003465	-8.367605	-6.033816	-28.88176	8.983426	15.953511	1.737422	13.877287	-0.532741	-26.60808	-11.28479	-5.720785
0.65	-10.21504	-23.19175	44.87118	-15.76445	40.165544	-37.98839	3.911716	21.125889	-42.47441	19.611391	43.111428	-33.53931	-12.56658	-12.4327
0.66	-8.028652	-24.97637	101.44159	-17.31439	95.502217	-39.87803	1.769075	22.167632	-96.88769	20.664575	96.517343	-34.88383	-12.81261	-15.54365
0.67	-3.8582	-23.60462	-49.59737	199.00361	-58.64246	172.87091	-2.080768	20.049165	58.92404	-191.9527	-61.91544	174.25512	-7.877283	-21.5536
0.7	-4.60065	-22.52934	-51.53393	49.654312	-55.92968	15.46717	-0.279954	18.02208	57.137291	-34.59442	-54.06792	10.698182	1.391774	-17.36318
0.75	-4.116802	-27.75685	-55.26678	17.990575	-50.69636	-24.01989	-0.31085	22.476908	53.541212	2.664437	-41.12945	-29.3761	6.05411	-11.40662
0.8	-0.655613	-36.42753	-57.48685	-0.450251	-41.9291	-48.6929	-4.534156	29.691661	47.266627	23.155492	-26.01935	-50.17589	7.038342	-6.705112
0.85	7.174912	-47.77517	-57.50941	-17.2406	-28.04166	-71.00863	-13.61821	37.798711	38.069268	38.852559	-7.670637	-65.38788	6.289164	-3.223245
0.9	21.690111	-61.66335	-54.31143	-34.63965	-6.376777	-93.53944	-28.78087	45.791792	25.601041	51.712271	15.749666	-77.86324	4.58828	-0.928796
0.95	47.248685	-78.05235	-46.18479	-53.47818	28.105527	-117.2233	-52.66277	52.862145	9.168838	62.099759	47.902982	-88.5423	2.389175	0.182
1	93.92464	-96.95856	-29.71943	-74.18578	87.116202	-142.5348	-92.36892	58.325828	-13.04529	69.931547	97.916728	-97.77721	0	0
1.05	197.19646	-118.6714	5.157368	-97.11693	212.20329	-170.0896	-176.8469	61.834122	-48.198	75.047515	201.09503	-105.9922	-2.352643	-2.130076
1.1	52.445035	783.8782	9.800826	70.729066	21.914121	906.56075	41.936853	-843.9908	-35.11537	-111.8191	-71.57469	969.30742	2.92751	-17.53781
1.15	675.26694	63.798069	235.8929	-84.46077	858.66659	8.345456	-562.3993	-80.12058	-243.6244	36.415943	754.05605	25.263663	20.296358	9.017146
1.2	-188.0042	292.29151	-34.78009	7.641382	-269.9307	286.07827	289.55572	-232	39.664188	-42.39717	-351.1976	219.6622	-7.399384	15.860798
1.25	-192.4801	162.87484	-12.61057	-38.75809	-235.8817	99.440013	259.19484	-72.4343	23.387411	5.76123	-273.9907	15.461645	-20.60244	7.620589
1.3	-190.8731	88.354558	60.283408	-73.09541	-151.2911	-9.810057	222.69253	15.108933	-35.7828	36.21538	-160.9343	-89.16298	-30.86433	-8.255778
1.35	-178.3135	39.517933	-120.2431	171.8035	-323.5001	172.64781	181.02704	65.211246	186.39996	-165.7649	-335.1324	62.043115	-8.043138	-38.62439
1.4	-173.3877	-3.803078	-109.5679	7.385113	-286.3055	-42.93277	148.45399	107.44801	140.86252	31.770437	-232.2973	-159.4141	4.557758	-24.4522
1.45	-157.5935	-49.25241	-85.47388	-59.03004	-229.0263	-150.1848	104.64339	142.96169	85.629701	101.9396	-126.955	-236.7988	2.612323	-18.79039
1.5	-119.8762	-96.49578	-32.82248	-112.9346	-127.9867	-239.1492	44.704179	168.77894	11.952372	141.62865	-1.799442	-275.9489	-3.433945	-22.37288

Кут падіння 45°

a/λ	Re(A ₁)	Im(A ₁)	Re(B ₁)	Im(B ₁)	Re(D ₁)	Im(D ₁)	Re(A ₂)	Im(A ₂)	Re(B ₂)	Im(B ₂)	Re(D ₂)	Im(D ₂)	Re(E ₂)	Im(E ₂)
0	4.51679	0	4.51679	0	-9.03359	0	-3.17977	0	-3.17977	0	-6.35915	0	0	0
0.05	4.270043	1.375568	4.240364	2.774816	-9.269013	1.37959	-2.923639	-1.370483	-2.824385	-2.764585	-6.630135	1.374475	-0.119739	0.957609
0.1	3.538086	2.626553	3.412454	5.416399	-9.975506	2.625256	-2.173641	-2.587408	-1.771259	-5.336162	-7.438029	2.585139	-0.477204	1.872736
0.15	2.352594	3.628715	2.067619	7.809662	-11.11843	3.621851	-0.988118	-3.505177	-0.086143	-7.547867	-8.731718	3.490971	-1.067117	2.702198
0.2	0.764932	4.259712	0.279694	9.840072	-12.62716	4.256523	0.54026	-3.995084	2.1088	-9.249133	-10.41525	3.961184	-1.880739	3.401129
0.25	-1.150913	4.395281	-1.841057	11.376595	-14.3992	4.397995	2.287346	-3.948387	4.644578	-10.2959	-12.35501	3.858266	-2.90598	3.921377
0.3	-3.289538	3.909971	-4.140182	12.286676	-16.29098	3.912274	4.096842	-3.283221	7.307608	-10.57213	-14.37543	3.057207	-4.12753	4.208597

0.35	-5.507275	2.68037	-6.378419	12.451433	-18.08388	2.681085	5.784884	-1.953103	9.814329	-10.01061	-16.23292	1.467117	-5.527026	4.196476
0.4	-7.608107	0.582813	-8.145863	11.750517	-19.41126	0.584443	7.142329	0.0512	11.750161	-8.582306	-17.55652	-0.983387	-7.083254	3.794132
0.45	-9.306346	-2.507442	-8.65547	10.056322	-19.57683	-2.505976	7.92304	2.699563	12.410082	-6.293793	-17.69425	-4.350465	-8.772388	2.854523
0.5	-10.13098	-6.713519	-5.943458	7.244444	-16.83997	-6.713681	7.796452	5.918271	10.116245	-3.199532	-15.0756	-8.660046	-10.56826	1.074732
0.55	-9.003742	-12.15901	8.938067	3.171975	-3.01792	-12.18115	6.057568	9.592015	-3.105985	0.619506	-2.175602	-13.93032	-12.44263	-2.504979
0.58	-5.175221	-16.07422	84.360429	0.221445	69.198171	-15.96939	2.493248	11.95299	-74.62226	3.051025	67.213722	-17.39456	-13.59275	-8.177955
0.59	-1.682417	-13.86701	-40.3886	148.26189	-58.71428	128.16595	-0.521133	9.2212	53.730424	-141.528	-63.55801	123.27143	-8.887256	-12.82784
0.6	-2.396658	-12.30182	-41.65002	81.885843	-58.86602	58.468618	0.731827	7.452708	54.305132	-72.16577	-62.22357	50.9355	-5.298221	-11.3933
0.65	-5.293959	-13.008	-47.03783	37.056327	-58.17658	4.650336	5.108338	8.536759	55.45276	-19.82167	-54.65082	-6.693679	0.10422	-5.182349
0.7	-6.663407	-18.04438	-51.78121	22.270545	-55.76409	-16.40629	6.15991	14.280426	54.680418	-0.713878	-46.31932	-26.92874	0.185531	-0.536582
0.75	-5.769371	-25.74442	-55.47507	10.087455	-50.82099	-33.93453	3.587578	21.747537	51.767929	13.683601	-36.57352	-41.12372	-1.774429	2.599582
0.8	-1.48506	-35.81436	-57.59145	-2.395842	-42.13137	-51.2536	-3.08846	29.771714	46.518273	26.090943	-24.50263	-53.03322	-4.789052	4.271469
0.85	8.112773	-48.19664	-57.38787	-16.09688	-27.64157	-69.45528	-14.82839	37.553214	38.711501	37.028423	-8.607062	-63.82109	-8.333074	4.49809
0.9	26.83623	-62.91681	-53.7231	-31.46149	-3.334517	-89.0774	-33.93364	44.446259	28.000894	46.473895	14.114436	-73.93998	-12.06471	3.235437
0.95	64.67874	-80.09214	-44.42379	-48.78176	41.269374	-110.5211	-67.68766	49.950365	13.455035	54.228413	52.055013	-83.6168	-15.73878	0.268736
1	168.63896	-99.73504	-23.06405	-68.25157	155.23369	-133.945	-156.2444	53.510924	-9.100537	59.996864	148.29984	-92.77866	-19.17039	-5.30078
1.05	-78.06905	308.20977	-11.10741	-47.50067	-114.2803	283.11233	140.38989	-330.3292	-11.86128	25.402367	-170.0829	294.88283	-13.15164	-16.48348
1.1	-72.9261	81.803134	16.651516	-72.97792	-73.81661	19.161396	118.98112	-75.32238	-28.45795	41.182826	-109.0444	6.947819	-10.26054	-14.76134
1.15	-59.40421	14.985317	111.20268	-93.65177	33.528606	-65.64975	90.810029	-1.357882	-101.1816	49.88713	3.911545	-75.93023	-12.51456	-21.61887
1.2	-35.71816	-18.65845	-52.63483	51.058169	-114.3765	28.513517	60.016547	31.852919	91.969002	-56.99959	-145.894	-16.72333	17.148893	-29.1364
1.25	-10.76311	-51.67185	-25.43629	-34.11831	-50.73566	-92.31296	28.219885	63.48364	49.010645	41.404194	-48.94884	-134.4826	23.368671	-8.530767
1.3	37.943341	-86.51792	25.561898	-81.08394	54.556643	-166.9118	-25.12171	89.722323	-11.58343	83.726411	70.974099	-183.6868	19.071262	5.066472
1.35	145.40331	-123.4785	135.86747	-122.2198	267.74941	-231.2156	-126.417	108.70328	-117.5636	107.59099	270.4654	-209.1381	11.168496	12.474024
1.4	630.40979	-162.7716	625.73269	-162.7305	1210.8071	-291.693	-566.0088	119.51172	-561.6018	119.4887	1126.6694	-220.6431	2.418092	11.942047
1.45	-228.6652	394.01622	-228.6233	402.0741	-529.2404	756.87304	335.20664	-325.5589	336.62462	-335.0339	-665.3721	615.24603	14.5336	21.718418
1.5	-233.368	177.37151	-233.0858	191.25217	-506.2862	304.44283	286.48294	-63.27421	293.81821	-80.16805	-531.6829	111.77346	-1.879295	38.84529

Кут падіння 50°

a/λ	Re(A ₁)	Im(A ₁)	Re(B ₁)	Im(B ₁)	Re(D ₁)	Im(D ₁)	Re(A ₂)	Im(A ₂)	Re(B ₂)	Im(B ₂)	Re(D ₂)	Im(D ₂)	Re(E ₂)	Im(E ₂)
0	4.51679	0	4.51679	0	-9.03359	0	-3.17977	0	-3.17977	0	-6.35915	0	0	0
0.05	4.276888	1.248274	4.248407	3.040599	-9.270703	1.772026	-2.942032	-1.244469	-2.831868	-3.031304	-6.642967	1.766566	-0.117943	1.038376

0.1	3.567467	2.37242	3.402623	5.980197	-10.02369	3.442668	-2.248339	-2.343485	-1.75827	-5.907403	-7.530844	3.399782	-0.470369	2.036484
0.15	2.419274	3.248423	2.084186	8.656043	-11.19009	4.849717	-1.153444	-3.159185	-0.09212	-8.419158	-8.904029	4.709447	-1.052932	2.953049
0.2	0.885728	3.752398	0.324878	10.959355	-12.74326	5.884214	0.25249	-3.568541	2.091299	-10.42677	-10.71094	5.566452	-1.858543	3.744605
0.25	-0.954031	3.760308	-1.77527	12.769228	-14.59237	6.425256	1.846862	-3.469836	4.640441	-11.80075	-12.83032	5.841318	-2.877328	4.363443
0.3	-2.989385	3.148064	-4.002026	13.962069	-16.53971	6.349295	3.477476	-2.788814	7.29229	-12.43777	-15.03376	5.416976	-4.096711	4.753885
0.35	-5.067638	1.791668	-6.107175	14.407627	-18.36763	5.526041	4.96434	-1.483968	9.769559	-12.26211	-17.08148	4.187809	-5.501613	4.844832
0.4	-6.972943	-0.43288	-7.617057	13.979655	-19.66257	3.829252	6.097128	0.449496	11.618496	-11.24065	-18.56224	2.07323	-7.074529	4.532859
0.45	-8.37682	-3.649513	-7.489489	12.571031	-19.51313	1.151954	6.616788	2.976777	11.9267	-9.401136	-18.62801	-0.964758	-8.795679	3.636474
0.5	-8.681204	-7.982617	-2.734568	10.043079	-15.27654	-2.644917	6.124901	6.022544	8.120606	-6.783163	-14.87911	-4.971112	-10.64324	1.73032

Кут падіння 55°

a/λ	Re(A ₁)	Im(A ₁)	Re(B ₁)	Im(B ₁)	Re(D ₁)	Im(D ₁)	Re(A ₂)	Im(A ₂)	Re(B ₂)	Im(B ₂)	Re(D ₂)	Im(D ₂)	Re(E ₂)	Im(E ₂)
0	4.51679	0	4.51679	0	-9.03359	0	-3.17977	0	-3.17977	0	-6.35915	0	0	0
0.05	4.283702	1.111685	4.245971	3.394732	-9.282394	2.262725	-2.960052	-1.108999	-2.828891	-3.386443	-6.665468	2.257153	-0.112567	1.111349
0.1	3.595578	2.099173	3.416862	6.731782	-10.04707	4.467508	-2.320518	-2.079169	-1.769457	-6.667008	-7.597635	4.423712	-0.44919	2.185617
0.15	2.483778	2.838524	2.103266	9.771904	-11.25672	6.375415	-1.31424	-2.779311	-0.10098	-9.561902	-9.068953	6.232003	-1.006571	3.184391
0.2	1.004001	3.205861	0.340557	12.433231	-12.88304	7.904437	-0.029695	-3.092795	2.102333	-11.96375	-11.02709	7.578989	-1.779333	4.06666
0.25	-0.76107	3.077056	-1.697988	14.626234	-14.76495	8.965206	1.412872	-2.923898	4.622699	-13.77948	-13.28191	8.365683	-2.759888	4.786198
0.3	-2.694781	2.328177	-3.860656	16.181026	-16.77218	9.387792	2.863585	-2.204209	7.269771	-14.86386	-15.67474	8.427325	-3.938668	5.287001
0.35	-4.633484	0.835215	-5.858394	17.003653	-18.65553	9.078229	4.143398	-0.897412	9.740672	-15.18107	-17.93824	7.693031	-5.304105	5.494125
0.4	-6.339806	-1.525961	-7.068809	16.950392	-19.87167	7.8928	5.038391	0.996792	11.458436	-14.68323	-19.53999	6.062832	-6.842668	5.291454
0.45	-7.433636	-4.879112	-6.224647	15.895924	-19.33202	5.706361	5.26866	3.439459	11.339005	-13.38152	-19.47889	3.478226	-8.539095	4.457244
0.5	-7.134144	-9.348895	1.385989	13.747972	-12.84758	2.426041	4.322477	6.352283	5.260017	-11.36248	-13.91499	-0.062269	-10.3764	2.390806

Кут падіння 60°

a/λ	Re(A ₁)	Im(A ₁)	Re(B ₁)	Im(B ₁)	Re(D ₁)	Im(D ₁)	Re(A ₂)	Im(A ₂)	Re(B ₂)	Im(B ₂)	Re(D ₂)	Im(D ₂)	Re(E ₂)	Im(E ₂)
0	4.51679	0	4.51679	0	-9.03359	0	-3.17977	0	-3.17977	0	-6.35915	0	0	0
0.05	4.290085	0.966269	4.271623	3.896087	-9.265455	2.909378	-2.976956	-0.96451	-2.854035	-3.888869	-6.658682	2.90395	-0.103747	1.175923
0.1	3.621802	1.808726	3.392578	7.743776	-10.10672	5.769819	-2.388206	-1.796126	-1.74232	-7.687536	-7.698137	5.727153	-0.414319	2.318562
0.15	2.544244	2.402801	2.116658	11.289253	-11.32389	8.328441	-1.465635	-2.368503	-0.104825	-11.10791	-9.228999	8.188769	-0.929288	3.393076

0.2	1.115232	2.624922	0.401691	14.462485	-12.96776	10.514717	-0.296532	-2.570667	2.066151	-14.06042	-11.27929	10.197878	-1.644949	4.361561
0.25	-0.578861	2.351019	-1.66062	17.153907	-14.96153	12.219121	1.000151	-2.31211	4.640988	-16.43755	-13.7452	11.635744	-2.556017	5.180079
0.3	-2.415231	1.456902	-3.741188	19.226619	-17.00248	13.304906	2.275599	-1.52906	7.261629	-18.13211	-16.29859	12.370971	-3.65564	5.793246
0.35	-4.219135	-0.181356	-5.584249	20.547069	-18.88387	13.638397	3.350252	-0.189861	9.673226	-19.07308	-18.71954	12.292778	-4.935694	6.123018
0.4	-5.730032	-2.687744	-6.55028	20.98986	-20.06543	13.094199	4.003709	1.701441	11.307354	-19.2345	-20.48884	11.318908	-6.38663	6.040755
0.45	-6.507666	-6.186477	-4.879289	20.467517	-19.02139	11.584805	3.926786	4.10259	10.645384	-18.6682	-20.19709	9.42752	-7.99749	5.278752
0.5	-5.512596	-10.80121	6.878901	18.822225	-9.076009	8.95268	2.430153	6.930984	1.057754	-17.39689	-11.66997	6.550922	-9.756146	2.983532
0.53	-1.890206	-14.15755	68.619754	17.228949	48.9729	6.767184	-0.874746	8.784239	-56.88782	-16.31925	43.695804	4.331641	-10.8768	-1.506576
0.54	1.559731	-11.80358	-34.79463	143.65672	-57.82492	129.42098	-3.835999	5.930716	49.782567	-139.9137	-65.60195	124.02002	-6.672109	-5.553088
0.55	0.750683	-10.0205	-35.90859	86.98356	-58.0122	69.491316	-2.478388	3.974922	50.535041	-80.72987	-64.6122	61.801366	-3.439305	-3.971273
0.6	-2.778612	-9.683765	-41.65882	51.200768	-58.72397	25.165274	2.512271	4.230082	53.825056	-38.56108	-60.11787	14.107968	0.874221	2.904799
0.65	-5.104762	-13.58998	-47.0188	40.585854	-58.21133	8.762574	4.392835	9.144152	55.678246	-24.10002	-55.49843	-1.807206	0.100274	8.135741
0.7	-5.614297	-20.05394	-51.66913	31.959603	-55.84494	-4.703589	2.962683	15.781102	55.914637	-13.28503	-50.15503	-12.85284	-2.64978	11.816969
0.75	-3.382124	-28.78374	-55.15889	22.951947	-50.64543	-18.03048	-2.123651	23.011488	54.351253	-3.925156	-43.26819	-22.25077	-6.435856	14.026719
0.8	3.088086	-39.71018	-56.85511	12.708576	-41.02663	-32.23996	-11.53723	30.064791	50.792587	4.47226	-33.61184	-31.10807	-10.7651	14.815358
0.85	16.609014	-52.87818	-55.80534	0.847307	-24.0241	-47.82895	-26.8626	36.356087	44.963551	11.864421	-18.92832	-39.85361	-15.32544	14.183666
0.9	43.561436	-68.34079	-50.37534	-12.83803	7.04456	-65.05088	-52.464	41.359199	36.288232	18.008828	6.043745	-48.58288	-19.90024	12.029745
0.95	105.52814	-86.11417	-36.91272	-28.59187	74.621577	-84.12063	-105.7999	44.556285	22.910062	22.699025	60.333811	-57.293	-24.3317	7.980221
1	1489.82457	-107.317	0.431118	-46.57482	469.95352	-106.2475	-456.7111	46.577077	-7.020247	25.658233	418.78367	-66.93195	-28.50231	0.203478
1.05	-86.7622	152.01252	69.613495	-40.4987	-56.89869	130.41224	137.63784	-162.2425	-52.68803	7.187684	-128.3513	115.7763	-27.4642	-9.496637
1.1	-78.18181	67.442493	-79.08345	88.707753	-201.5273	147.53475	121.4334	-62.16336	124.42408	-88.22316	-265.4298	82.742707	-2.243344	-17.42611
1.15	-75.39108	22.612484	-75.39803	22.651652	-178.9023	26.622891	108.60423	-6.091224	108.62434	-6.147432	-203.5125	-49.7673	0.424448	-1.090171
1.2	-62.45918	-14.8011	-63.47485	-12.06804	-141.8204	-44.51949	83.942661	34.863725	85.952505	31.258102	-139.2143	-111.4669	-6.865982	6.722726
1.25	-27.00355	-50.77141	-33.88719	-42.58892	-71.0729	-102.955	40.944237	65.300721	50.951759	55.091468	-57.32098	-148.2954	-17.44147	5.776523
1.3	123.19151	-87.526	81.417518	-73.3587	184.37821	-156.6891	-96.37977	86.598144	-52.77244	70.55736	174.19022	-171.625	-28.63999	-9.736581
1.35	-152.4226	119.5238	-114.5904	72.593315	-301.9684	157.81085	200.79309	-56.4992	162.71215	-33.88298	-331.3293	46.26926	11.659875	-19.8626
1.4	-155.0204	13.752277	-103.6728	-11.16595	-268.1091	-42.65334	157.09662	76.437841	125.31602	62.473797	-222.0384	-162.0155	13.634006	4.685974
1.45	-152.1011	-47.02824	-83.01799	-61.79325	-222.5959	-150.6477	105.48041	139.06848	81.253123	106.80811	-122.2356	-238.117	2.760491	17.176348
1.5	-141.9714	-100.3607	-46.448	-107.3629	-158.8632	-237.2584	48.833092	174.51475	29.178445	131.68995	-26.48201	-271.9462	-11.47665	19.269661

Кут падіння 65⁰

a/λ	Re(A ₁)	Im(A ₁)	Re(B ₁)	Im(B ₁)	Re(D ₁)	Im(D ₁)	Re(A ₂)	Im(A ₂)	Re(B ₂)	Im(B ₂)	Re(D ₂)	Im(D ₂)	Re(E ₂)	Im(E ₂)
0	4.51679	0	4.51679	0	-9.03359	0	-3.17977	0	-3.17977	0	-6.35915	0	0	0
0.05	4.296159	0.81333	4.273002	4.679077	-9.272353	3.845369	-2.992546	-0.812292	-2.854954	-4.672987	-6.674765	3.840348	-0.091757	1.231592
0.1	3.645372	1.502857	3.482311	9.167037	-10.04885	7.498721	-2.449348	-1.496017	-1.829486	-9.119792	-7.677304	7.45929	-0.366683	2.433841
0.15	2.599002	1.944414	2.144223	13.399214	-11.36876	10.896497	-1.603059	-1.929511	-0.123804	-13.24808	-9.358323	10.767644	-0.823304	3.575928
0.2	1.216359	2.013993	0.37355	17.319226	-13.12723	13.982317	-0.539817	-2.005568	2.116748	-16.98837	-11.59181	13.69086	-1.459191	4.623461
0.25	-0.41294	1.587319	-1.625304	20.780514	-15.13707	16.609426	0.622226	-1.637565	4.655818	-20.20226	-14.16592	16.075	-2.270948	5.535194
0.3	-2.159945	0.540414	-3.641623	23.58933	-17.2182	18.58403	1.734082	-0.765882	7.262547	-22.73139	-16.87861	17.733352	-3.254282	6.256959
0.35	-3.838886	-1.250596	-5.357966	25.617595	-19.11115	19.778099	2.614209	0.637328	9.634171	-24.51538	-19.4628	18.5622	-4.404006	6.708468
0.4	-5.165566	-3.909809	-6.02019	26.787782	-20.18145	20.114026	3.033527	2.564598	11.112451	-25.58071	-21.31607	18.528113	-5.714013	6.748949
0.45	-5.633204	-7.561141	-3.493961	26.980364	-18.59086	19.472432	2.646279	4.970089	9.865382	-25.95099	-20.74915	17.577929	-7.177298	6.059882
0.5	-3.83838	-12.32868	14.54029	26.062249	-3.152022	17.720142	0.492544	7.768645	-5.296845	-25.67676	-7.294066	15.668411	-8.786014	3.423785

Кут падіння 70°

a/λ	Re(A ₁)	Im(A ₁)	Re(B ₁)	Im(B ₁)	Re(D ₁)	Im(D ₁)	Re(A ₂)	Im(A ₂)	Re(B ₂)	Im(B ₂)	Re(D ₂)	Im(D ₂)	Re(E ₂)	Im(E ₂)
0	4.51679	0	4.51679	0	-9.03359	0	-3.17977	0	-3.17977	0	-6.35915	0	0	0
0.05	4.301335	0.654486	4.232316	5.753844	-9.319766	5.078673	-3.00594	-0.653964	-2.813872	-5.748925	-6.730109	5.074305	-0.077048	1.277795
0.1	3.666267	1.184914	3.416528	11.38737	-10.14218	10.037014	-2.502748	-1.182201	-1.761483	-11.34949	-7.802678	10.002819	-0.307922	2.530224
0.15	2.646567	1.46717	2.149608	16.762464	-11.42615	14.737149	-1.722353	-1.466178	-0.121788	-16.64287	-9.489036	14.625926	-0.691762	3.730187
0.2	1.303877	1.377502	0.439376	21.740657	-13.17468	19.040161	-0.751211	-1.40198	2.070237	-21.48429	-11.77267	18.790284	-1.227354	4.84677
0.25	-0.268814	0.791743	-1.532066	26.293419	-15.2255	22.917848	0.292282	-0.906076	4.605754	-25.85993	-14.46915	22.464096	-1.912773	5.841811
0.3	-1.937725	-0.414192	-3.539464	30.140852	-17.38751	26.090048	1.25903	0.078353	7.24701	-29.53153	-17.36897	25.377621	-2.745699	6.662453
0.35	-3.506238	-2.364324	-5.153201	33.329233	-19.29749	28.6034	1.964049	1.576489	9.591384	-32.61903	-20.10701	27.604949	-3.723116	7.22712
0.4	-4.667984	-5.182488	-5.57728	35.589807	-20.29867	30.188792	2.168938	3.577896	10.961492	-34.96305	-22.06949	28.923811	-4.841845	7.383568
0.45	-4.846814	-8.993005	-2.126269	36.884997	-18.06671	30.808932	1.486373	6.034562	9.034929	-36.6742	-21.11539	29.365611	-6.097731	6.7602
0.48	-3.894736	-11.80708	6.412036	37.122546	-11.04332	30.641362	0.252499	7.692103	2.152531	-37.39739	-15.2982	29.170498	-6.915463	5.51687
0.5	-2.13123	-13.91965	25.933319	37.031458	6.497974	30.280253	-1.446522	8.858585	-15.37927	-37.75702	0.825944	28.83854	-7.486684	3.618361

Кут падіння 75°

a/λ	Re(A ₁)	Im(A ₁)	Re(B ₁)	Im(B ₁)	Re(D ₁)	Im(D ₁)	Re(A ₂)	Im(A ₂)	Re(B ₂)	Im(B ₂)	Re(D ₂)	Im(D ₂)	Re(E ₂)	Im(E ₂)
-------------	---------------------	---------------------	---------------------	---------------------	---------------------	---------------------	---------------------	---------------------	---------------------	---------------------	---------------------	---------------------	---------------------	---------------------

0	4.51679	0	4.51679	0	-9.03359	0	-3.17977	0	-3.17977	0	-6.35915	0	0	0
0.05	4.305249	0.490118	4.260851	7.58756	-9.296652	7.076753	-3.016523	-0.489927	-2.842088	-7.583853	-6.713431	7.073268	-0.059925	1.314146
0.1	3.682367	0.855816	3.561441	15.094983	-10.01927	14.073572	-2.545266	-0.855742	-1.904617	-15.0668	-7.705807	14.046435	-0.239506	2.606328
0.15	2.685417	0.974215	2.241423	22.365678	-11.3854	20.833426	-1.819639	-0.982122	-0.207604	-22.27872	-9.508047	20.745943	-0.538573	3.853208
0.2	1.374838	0.720271	0.739979	29.069809	-12.96568	27.026667	-0.923449	-0.765815	1.78523	-28.89062	-11.67273	26.832901	-0.956416	5.026288
0.25	-0.151482	-0.028936	-1.846844	35.556607	-15.68731	33.001753	0.022296	-0.126472	4.955454	-35.27323	-15.10734	32.657038	-1.492743	6.090832
0.3	-1.755846	-1.399639	-3.365578	41.357668	-17.43369	38.292474	0.868119	0.992971	7.143412	-41.00697	-17.68018	37.767835	-2.145187	6.995443
0.35	-3.23361	-3.514055	-4.790634	46.306067	-19.25199	42.730067	1.426725	2.614025	9.360455	-46.00474	-20.44145	42.028299	-2.913509	7.656927
0.4	-4.257283	-6.49615	-5.431222	50.312649	-20.60892	46.225345	1.448978	4.724564	11.054169	-50.29297	-22.91116	45.400449	-3.796386	7.913923
0.45	-4.184659	-10.47099	-0.907193	53.643773	-17.54796	49.045781	0.505661	7.275545	8.263425	-54.29245	-21.34912	48.22494	-4.791082	7.343571
0.5	-0.407366	-15.56192	44.898353	55.570339	23.721793	50.461378	-3.349891	10.176937	-33.03929	-57.46727	16.571318	49.867126	-5.896162	3.469189
0.51	3.93526	-14.6857	-31.62409	254.67333	-57.18837	247.42296	-7.339346	8.765416	47.208686	-255.346	-67.4554	245.36359	-3.62316	-1.34541
0.55	0.777759	-10.53431	-36.11342	97.846746	-58.22974	80.868202	-2.627229	4.605438	50.77231	-92.07068	-64.98884	73.772578	4.797511	5.24694
0.6	-2.35458	-12.68963	-41.67334	88.980405	-58.90632	65.951134	0.533447	7.924389	54.382829	-79.69056	-62.48285	58.932113	5.885246	11.988678
0.65	-4.125868	-17.73425	-46.85979	85.105205	-58.36396	57.42402	0.548238	13.781254	56.83046	-73.97558	-60.04129	52.703273	4.28456	17.198425
0.7	-3.851741	-25.07036	-51.40381	81.259073	-55.98595	49.60563	-2.782616	20.632155	58.050284	-69.95053	-57.09275	48.657045	1.386168	20.997936
0.75	-0.490774	-34.56355	-54.6019	76.431482	-50.47455	41.229403	-9.842105	27.610725	57.688934	-66.90474	-52.53656	45.328583	-2.198226	23.48035
0.8	7.684199	-46.21425	-55.61163	70.260349	-39.88721	31.802345	-21.43502	34.079261	55.45782	-64.86626	-44.86589	42.231386	-6.11673	24.696211
0.85	23.960334	-60.05989	-53.29987	62.389681	-20.75706	20.906491	-39.47908	39.493445	51.089464	-63.9043	-31.47422	39.063838	-10.14321	24.61843
0.9	56.205107	-76.19954	-44.63129	52.601509	16.154502	8.254181	-69.56329	43.414369	42.979927	-64.23811	-4.905335	35.726024	-14.1231	23.047766
0.95	133.22147	-94.82944	-22.12198	40.810958	103.35176	-6.377374	-135.6259	45.541654	26.4429	-66.21402	62.754099	32.23053	-17.94964	19.254983
1	2224.4326	-111.6998	76.006761	26.671316	2247.2777	-19.00922	-2174.779	41.174017	-50.99412	-69.89798	2143.6183	32.824766	-21.54856	8.915777
1.05	-78.31264	147.17364	-78.46191	155.939	-217.5384	311.13443	130.21383	-160.8163	130.5758	-170.631	-318.347	269.34188	4.299666	6.588051
1.1	-77.39146	66.996577	-78.8847	110.74505	-201.0721	171.53038	120.09239	-61.79427	125.23113	-114.4824	-267.6063	111.49274	4.173294	23.1379
1.15	-66.39832	19.975125	-72.57628	86.76143	-171.6949	98.824613	98.038171	-6.219993	114.11684	-89.67105	-215.2452	42.026129	-4.708984	31.304562
1.2	-32.27568	-19.27523	-51.07222	65.444887	-110.5396	44.204409	56.907883	31.861054	92.316661	-75.10652	-145.9854	2.477895	-16.48537	30.972737
1.25	129.70741	-57.15109	49.424945	42.856118	141.13834	-4.320483	-91.03683	58.573346	6.544157	-66.48795	80.346978	-22.76494	-28.7356	16.55156
1.3	-169.4422	147.96283	-125.6126	166.69158	-345.3566	283.56077	225.58687	-76.68775	201.47858	-156.0947	-419.5195	170.0045	5.717843	9.469936
1.35	-176.5211	46.112348	-121.0459	103.60874	-322.5688	107.06158	185.70018	55.196473	181.23224	-82.85986	-329.4836	-16.18305	4.208668	30.030262
1.4	-178.6795	-12.97693	-106.7691	65.188383	-289.0579	11.918131	138.54529	119.92963	154.20271	-49.22564	-248.2758	-86.16105	-8.034965	38.81208
1.45	-174.0513	-64.55415	-72.53068	30.210058	-234.5128	-63.51777	86.897124	158.09679	115.99826	-30.95439	-167.5501	-118.0728	-22.79442	36.841261
1.5	-158.8731	-115.2882	36.962889	-5.704599	-104.6932	-132.0034	32.633639	178.05682	26.254487	-22.87646	-43.65361	-130.9195	-36.80902	21.003992

Поліноміальна апроксимація ґраткових сум $A+B(a/l)+C(a/l)^2+D(a/l)^3$

Re(A₁)

AOI	A	B	C	D
0	4.149252	7.334888	-164.489881	130.084889
15	4.143769	7.472918	-163.294819	132.657111
30	4.098692	8.326882	-162.52629	144.294
45	3.981585	10.46837	-166.941643	170.699111
50	3.931774	11.41792	-169.794333	182.581111
55	3.872725	12.51386	-173.464857	195.702222
60	3.810542	13.662902	-177.599948	209.335111
65	3.746468	14.836382	-182.058771	222.945333
70	3.687865	15.92366	-186.367833	235.590222
75	3.633299	16.910213	-190.3703	246.680222

Im(A₁)

AOI	A	B	C	D
0	0.000328	39.477322	0.0023	-165.371333
15	-0.005071	38.203547	-0.29799	-164.974444
30	-0.004768	34.253941	-0.268752	-165.018444
45	0.004082	27.854772	0.259748	-165.700889
50	0.000381	25.372969	0.011748	-165.380222
55	0.000379	22.641261	0.003129	-165.364667
60	0.000637	19.732062	0.026748	-165.398444
65	-0.000823	16.692277	-0.021724	-165.350444
70	0.000261	13.498834	0.012943	-165.380889
75	-0.002211	10.239793	-0.072914	-165.285778

Re(B₁)

AOI	A	B	C	D
0	4.149252	7.334888	-164.489881	130.084889
15	4.079228	8.67704	-172.28839	147.748889
30	3.845532	13.029037	-196.973438	201.109333
45	3.441794	20.648781	-240.415467	290.577111
50	3.164482	25.206178	-263.762481	333.018889
55	2.987519	28.677684	-283.855029	372.711556
60	2.621677	34.468928	-312.666757	422.428444
65	2.833117	33.559456	-318.590929	447.746889
70	2.173854	42.871138	-359.284129	508.409111
75	2.908317	34.699182	-329.32389	476.655778

Im(B₁)

AOI	A	B	C	D
0	0.000328	39.477322	0.0023	-165.371333
15	-0.001962	40.879783	0.0118	-165.417111
30	-0.000901	45.604558	-0.082533	-165.259778
45	0.017736	55.486309	1.652148	-167.612667
50	0.031455	60.991443	1.797505	-167.742222
55	0.077314	67.913066	3.313586	-169.096444
60	0.098896	77.642281	5.43119	-172.414667
65	0.250846	88.990995	20.463195	-192.831111
70	0.080738	114.3908	3.933938	-169.894889
75	0.592554	143.291957	42.379386	-224.573778

Re(D₁)

AOI	A	B	C	D
0	-9.498107	9.235366	-138.301714	160.784889
15	-9.538199	10.033972	-145.786	170.994
30	-9.697685	12.965921	-169.780048	204.329556
45	-9.990719	18.450324	-211.217476	265.225778
50	-10.217304	22.086201	-233.056	296.691111
55	-10.343358	24.615616	-251.359476	325.188889
60	-10.654976	29.410417	-277.921714	363.553333
65	-10.390171	27.524421	-281.397762	377.946667
70	-10.997542	35.890576	-319.449905	521.973333
75	-10.21643	26.878805	-286.985	387.766667

Im(D₁)

AOI	A	B	C	D
0	0.000653	-0.002114	0.004129	-165.375111
15	-0.006985	2.816308	-0.284181	-165.026889
30	-0.005626	11.479393	-0.349671	-164.913111
45	0.021983	27.508131	1.919305	-167.955111
50	0.031506	35.615957	1.79421	-167.738
55	0.07753	45.268683	3.30821	-169.083778
60	0.098532	57.908168	5.411962	-172.392222
65	0.251712	72.294843	20.511143	-192.891111
70	0.080118	100.896335	3.90291	-169.857778
75	0.593553	133.066974	42.398929	-224.594444

Re(A₂)

AOI	A	B	C	D
0	-2.568052	-12.831242	239.444324	-286.600667
15	-2.598579	-12.233535	229.539533	-274.467111
30	-2.655064	-11.039064	205.005367	-247.408444
45	-2.680737	-10.357802	177.424952	-225.247556
50	-2.680761	-10.336635	169.391448	-221.622889
55	-2.669899	-10.501186	162.650105	-220.446444
60	-2.652704	-10.78726	157.158643	-221.356222
65	-2.629043	-11.191217	153.044838	-224.064889
70	-2.605108	-11.622822	150.056476	-227.768222
75	-2.578513	-12.083589	148.211648	-231.930667

Im(A₂)

AOI	A	B	C	D
0	0.573222	-50.624366	69.998019	129.151333
15	0.557721	-48.94459	67.750862	122.796667
30	0.510382	-44.081913	61.998633	105.963556
45	0.459325	-36.864506	56.352086	83.260222
50	0.453743	-34.202887	55.476995	75.119333
55	0.447085	-31.342269	54.681233	67.883556
60	0.442486	-28.349062	54.133648	61.626222
65	0.441421	-25.260455	53.877929	56.464444
70	0.43908	-22.042699	53.691738	52.688222
75	0.441045	-18.773839	53.716548	50.082889

Re(B₂)

AOI	A	B	C	D
0	-2.568052	-12.831242	239.444324	-286.600667
15	-2.534868	-13.448034	242.64581	-292.070667
30	-2.408621	-15.698167	254.132686	-311.129778
45	-2.172455	-20.078926	277.581305	-350.635556
50	-1.960464	-23.385433	293.310662	-374.645333
55	-1.851068	-25.569333	305.617533	-395.821556
60	-1.552829	-30.078246	326.727633	-427.523333
65	-1.829277	-27.940985	325.323633	-435.963778
70	-1.22946	-36.133967	359.377324	-481.548889
75	-2.014476	-27.013746	323.814014	-437.212222

Im(B₂)

AOI	A	B	C	D
0	0.573222	-50.624366	69.998019	129.151333
15	0.562793	-51.779483	68.433829	128.624444
30	0.528818	-55.864742	64.513833	125.580667
45	0.47042	-64.97508	57.948519	119.910222
50	0.44464	-70.246419	56.341333	115.712222
55	0.38812	-76.961599	53.53619	111.790222
60	0.357598	-86.517786	50.339286	108.865778
65	0.198588	-97.730342	34.460667	122.089333
70	0.363679	-123.032756	50.381333	91.075556
75	-0.151708	-151.866357	11.523048	136.933333

Re(D₂)

AOI	A	B	C	D
0	-6.813782	9.281447	-130.281081	184.085778
15	-6.858545	10.195901	-142.236038	198.317333
30	-7.020693	13.240343	-177.036005	238.571333
45	-7.289152	18.315361	-229.437381	298.420222
50	-7.498087	21.63004	-253.907929	326.416667
55	-7.60191	23.748514	-274.120786	349.907111
60	-7.887668	28.06116	-301.858452	382.030667
65	-7.595085	25.654339	-305.856262	389.446889
70	-8.174649	33.498203	-343.907095	432.769333
75	-7.368482	24.014882	-311.139262	385.666667

Im(D₂)

AOI	A	B	C	D
0	-0.227844	4.431163	-27.760138	-105.058889
15	-0.243672	7.408388	-29.041933	-110.094667
30	-0.256445	16.345159	-30.816538	-123.971111
45	-0.231264	32.420486	-28.834057	-142.376667
50	-0.218954	40.474184	-28.619838	-145.652889
55	-0.168931	50.049384	-26.621019	-148.943111
60	-0.143333	62.599901	-23.962252	-152.299333
65	0.014353	76.899697	-8.3226	-170.716667
70	-0.153452	105.427661	-24.471757	-143.415111
75	0.363032	137.540795	14.374857	-191.839111

Re(E₂)

AOI	A	B	C	D
0	0	0	0	0
15	-0.044573	0.927013	-30.616133	19.912889
30	-0.064691	1.339944	-51.063295	28.283778
45	-0.052573	1.083608	-55.60149	22.366667
50	-0.04365	0.897647	-53.540624	18.375333
55	-0.033751	0.693066	-49.92581	14.086889
60	-0.02412	0.493771	-44.982952	9.952444
65	-0.015163	0.312706	-38.930829	6.325111
70	-0.008649	0.176309	-32.051162	3.505778
75	-0.00309	0.069562	-24.488686	1.517111

Im(E₂)

AOI	A	B	C	D
0	0	0	0	0
15	-0.000713	7.091545	-0.339771	-32.371111
30	0.04248	12.873344	4.289038	-61.949778
45	0.140986	16.698864	14.913829	-84.522222
50	0.182759	17.538259	19.340729	-89.930667
55	0.226747	18.181841	23.942429	-94.275111
60	0.271206	18.65058	28.533514	-97.652
65	0.314292	18.967859	32.926019	-100.206667
70	0.353857	19.16598	36.897938	-102.060444
75	0.387628	19.272982	40.273805	-103.395333

Доданок 3. Копія креслення ванни для гальванопластики

