

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА
ШЕВЧЕНКА
НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ІНСТИТУТ ВИСОКИХ ТЕХНОЛОГІЙ

Завідувач кафедри нанофізики конденсованих середовищ

проф. Валерій Антонович Скришевський

Протокол № ____ засідання кафедри

від “ ____ ” _____ 2023 р.

**Використання концепції ефективної сприйнятливості для моделювання
оптичних властивостей металевих плівок з наноструктурованим
приповерхневим шаром**

Випускна кваліфікаційна робота магістра
студента спеціальності
105 Прикладна фізика та наноматеріали
ОП «Високі технології
(Прикладна фізика та наноматеріали)»
Железняк Романа Олександровича

Науковий керівник:
кандидат фіз.-мат. наук,
Васильєв Тарас Анатолійович

Оцінка захисту роботи

Київ, 2023 р.

Зміст

1 Вступ	5
2 Застосування теоретичної моделі метода трансфер-матриць до золотої наноплівки, обробленої воднем в імпульсному режимі	7
2.1 Модель на основі методу трансфер-матриць	7
2.2 Переваги і вади моделі на основі методу трансфер-матриць	9
3 Моделювання на основі концепції ефективної сприйнятливості	11
3.1 Основи засади концепції ефективної сприйнятливості	11
3.2 Ефективна сприйнятливість тонкої плівки	13
3.4 Ефективна сприйнятливість плівки з одним шаром порожнин	18
3.5 Ефективна сприйнятливість плівки з порожнинами	21
3.6 Відносне поглинання і коефіцієнт відбиття в залежності від кута падіння	26
4 Результати обчислень	28
5 Висновки	32
6 Використана література	33

АНОТАЦІЯ

Железняк Р. О. Використання концепції ефективної сприйнятливості для моделювання оптичних властивостей металевих плівок з наноструктурованим приповерхневим шаром. – Випускна кваліфікаційна робота магістра за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали ОП «Високі технології (Прикладна фізика та наноматеріали)»

У дипломній роботі на основі концепції ефективної сприйнятливості запропоновано модель металевої плівки з порожнинами, що заповнені воднем. Зокрема, розглянуто плівки з приповерхневим моношаром порожнин. При побудові моделі враховані форма, розмір і орієнтація порожнин. Ефективні сприйнятливості отримані за допомогою згортання ітераційної схеми розв'язання системи інтегральних рівнянь Фредгольма другого роду. Результати теоретичного моделювання співставлялися із експериментальними даними щодо дослідження плазмонного резонансу, збудженого за методом Кречмана, в золотій плівці, обробленій воднем. Результати представленого в дипломі теоретичного дослідження якісно узгоджуються з експериментами. Криві плазмонного резонансу після обробки воднем зміщуються в бік більших кутів за рахунок появи порожнин, заповнених воднем. Ефект зсуву кривих резонансного поглинання залежить від характеру розподілу порожнин в плівці. Що більшою є концентрація порожнин поблизу поверхні золото-повітря, то більшим є зсув резонансних кривих. Розрахунки були проведені для випадку малих порожнин циліндричної форми. Чисельне дослідження ефектів форми і розміру порожнин планується провести у майбутньому.

Ключові слова: ефективна сприйнятливість, воднева обробка, золота плівка на склі, поверхневий моношар нанопорожнин, поверхневий плазмонний резонанс.

SUMMARY

Zhelezniak R. O. Application of the concept of effective susceptibility to the modelling of the optical properties of metal films with a nanostructured near-surface layer. – Master’s final qualification work in specialty 105 Applied physics and nanomaterials EP “High technologies (Applied physics and nanomaterials)”

In the thesis, based on the concept of effective susceptibility, a model of a metal film with cavities filled with hydrogen is proposed. In particular, films with a near-surface monolayer of cavities were considered. When building the model, the shape, size and orientation of the cavities were taken into account. The expressions for effective susceptibility were obtained using the convolution of the iterative scheme for solving the system of Fredholm integral equations of the second kind. The results of the theoretical modeling were compared with the experimental data on the study of plasmon resonance excited by the Kretschmann method in a gold film treated with hydrogen. The results of the theoretical research presented in the diploma are qualitatively consistent with the experiments. After treatment with hydrogen, the plasmon resonance curves shift toward larger angles due to the appearance of cavities filled with hydrogen. The effect of shifting the resonant absorption curves depends on the nature of the distribution of cavities in the film. The greater the concentration of cavities near the gold-air surface, the greater is the shift of the resonance curves. The calculations were carried out for the case of small cylindrical cavities. Numerical studies of the effects of the shape and size of the cavities are planned to be carried out in the future.

Key words: effective susceptibility, hydrogen treatment, gold film on glass, surface monolayer of nanocavities, surface plasmon resonance.

1 Вступ

Об'єктом дослідження даної роботи є сенсор на основі поверхневого плазмонного резонансу (ППР). ППР сенсор є багат шаровою структурою, основним елементом якої є металева плівка, осаджена на склі. Плівка має товщину кілька десятків нанометрів, і в ній методом Кречмана збуджується поверхневий плазмон. Поверхневий плазмон - це електромагнітне збудження, що поширюється у тонкому шарі на межі розділу між діелектриком (в даній роботі – повітрям) і провідником (в даній роботі – золото) [1]. Ці електромагнітні поверхневі хвилі виникають через взаємодію електромагнітних полів з коливаннями електронної плазми провідника, тобто металевої плівки. Дія ППР сенсора базується на тому факті, що на поверхневий плазмон впливають умови, що створені поблизу межі провідника і діелектрика. Наявність дефектів поверхні, присутність в діелектрику наночастинок, зокрема вірусів, бактерій, призводить до зсувів кривих ППР, які фіксує сенсор. Через це важливим є створення моделей, які теоретично моделюють цей зсув.

У своїх дослідженнях автор дипломної роботи спільно з науковим керівником моделював зміни, які відбуваються в сенсорі ППР під впливом водневої обробки [2]. Водень легко проникає в середину металевої плівки [3] під час електролізу. За певного режиму електролізу в золотій плівці утворюються порожнини з воднем. Причому за імпульсної обробки водень переважно в поверхневому шарі плівки утворює порожнини, які суттєво впливають на плазмонний резонанс. При виконанні більш ранніх робіт з моделювання фізичного об'єкта використовували метод трансфер-матриць для обчислення коефіцієнту відбиття електромагнітної хвилі від плівки. Фізичні ж властивості неоднорідної плівки з порожнинами при цьому

оцінювалися за допомогою наближення ефективного середовища за формулами Максвелла Гарнетта та Бруггемана [4, 5]. Але цей підхід не дозволяв врахувати вплив на оптичні властивості ППР сенсора розмірів і форми порожнин, заповнених воднем, та розподіл цих порожнин вздовж товщини плівки. Це обмежувало можливості теоретичної моделі у плануванні експериментів.

Воднева обробка легко контролюється. Значне накопичення водню в поверхневому шарі викликає водневу крихкість поверхневого шару плівки. Це може стати основою технології створення наноструктурної поверхні золотої наноплівки, що корисно для практичного застосування у біології та медицині. Створення моделі, що описує результати водневої обробки [6, 7] є важливим. Через це основною метою досліджень автора роботи є моделювання плівки з наноструктурованим приповерхневим шаром з порожнинами певної форми і розміру та їх розподіл у шарі. Створення такої моделі дозволило б цілеспрямовано проводити експерименти з модифікації ППР сенсора на основі контрольованого імпульсного режиму обробки воднем.

Перед початком даних досліджень було зроблене припущення, що концепція ефективної сприйнятливості, що детально висвітлена в огляді [8], дозволить здолати вади моделі, що основана на методах трансфер-матриць і ефективного середовища. Саме тому в цій роботі будується модель на основі концепції ефективної сприйнятливості.

2 Застосування теоретичної моделі метода трансфер-матриць до золотої наноплівки, обробленої воднем в імпульсному режимі

Проілюструємо моделювання лінійного відгуку сенсора ППР на основі метода трансфер матриць. Проаналізуємо теоретично передбачені зміни оптичних властивостей, що пов'язані з обробкою поверхневого шару золотої плівки під час імпульсної обробки воднем, і співставимо їх з результатами експериментів.

2.1 Модель на основі методу трансфер-матриць

Розглянемо модель золотої плівки на основі методу трансфер-матриць [1, 9, 10]. Маємо електромагнітну хвилю, що падає під певним кутом на поверхню однорідної металевої плівки. Зв'язок між амплітудами x -компонент електричного і магнітного полів на вході і на виході з плівки буде виглядати наступним чином

$$\begin{bmatrix} E_x^0 \\ E_y^0 \end{bmatrix} = \mathbf{M} \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix}, \quad (2.1)$$

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \cos\beta & -\frac{i}{q} \sin\beta \\ -iq \sin\beta & \cos\beta \end{bmatrix}, \quad (2.2)$$

де \mathbf{M} – трансфер-матриця шару металевої плівки, $\beta = \frac{2\pi}{\lambda} \tilde{n} d \cos\theta$, $q = \frac{1}{\tilde{n}} \cos\theta$, $\tilde{n} = n + ik = \sqrt{\tilde{\epsilon}}$ – комплексний показник заломлення, θ – кут падіння на поверхню плівки, d – товщина плівки. Комплексний коефіцієнт заломлення, або діелектрична стала, визначаються в нашій моделі за допомогою наближення ефективного середовища Максвела Гарнета

$$\varepsilon_{MG} = \varepsilon_h \frac{\varepsilon_h + \frac{1+2f}{3}(\varepsilon_i - \varepsilon_h)}{\varepsilon_h + \frac{1-f}{3}(\varepsilon_i - \varepsilon_h)}. \quad (2.3)$$

і Бруггемана

$$\varepsilon_{BG} = \frac{b \pm \sqrt{8\varepsilon_1\varepsilon_2 + b^2}}{4}, \quad b = (2f_1 - f_2)\varepsilon_1 + (2f_2 - f_1)\varepsilon_2. \quad (2.4)$$

Де $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ – це діелектричні сталі золота і водню, а f_1, f_2 – це відповідно об'ємні концентрації. З наближень ефективного середовища (2.3), (2.4) стає видно, що форма і розміри порожнин не враховані при створенні цієї моделі.

У нас є кілька послідовних шарів плівок в сенсорі ППР. Кожному m -тому шару ставимо у відповідність матрицю

$$\mathbf{M}_m = \begin{bmatrix} \cos\beta_m & -\frac{i}{q_m}\sin\beta_m \\ -iq_m\sin\beta_m & \cos\beta_m \end{bmatrix}, \quad (2.5)$$

яка буде поєднувати поле на вході в цей шар і на виході з нього.

Тоді результуючу матрицю всієї системи, що описує ППР, можна розрахувати, як добуток матриць для кожного шару

$$\mathbf{M} = \prod_{m=1}^N \mathbf{M}_m, \quad (2.6)$$

де N – кількість шарів у системі.

З даної матриці маємо коефіцієнти відбиття та проходження для нашої системи

$$r = \frac{[\mathbf{M}_{11} + \mathbf{M}_{12}p_l]p_1 - [\mathbf{M}_{21} + \mathbf{M}_{22}p_l]}{[\mathbf{M}_{11} + \mathbf{M}_{12}p_l]p_1 + [\mathbf{M}_{21} + \mathbf{M}_{22}p_l]}, \quad (2.7)$$

$$t = \frac{2p_1}{[\mathbf{M}_{11} + \mathbf{M}_{12}p_l]p_1 + [\mathbf{M}_{21} + \mathbf{M}_{22}p_l]}, \quad (2.8)$$

$$p_1 = \frac{1}{\tilde{n}_1} \cos\theta_1, \quad p_l = \frac{1}{\tilde{n}_l} \cos\theta_l \quad (2.9)$$

де \tilde{n}_1 і \tilde{n}_l – показники заломлення першого та останнього шару відповідно.

Повне відбиття і проходження є квадратами модулів цих коефіцієнтів

$$R = |r|^2 \quad (2.10)$$

$$T = \frac{p_l}{p_1} |t|^2 \quad (2.11)$$

2.2 Переваги і вади моделі на основі методу трансфер-матриць

Проаналізуємо можливості моделі на основі методу трансфер-матриць. Для цього розглянемо золоту плівку, оброблену воднем в імпульсному режимі.

В експериментальних дослідженнях [11] підбирали режим імпульсної обробки, виходячи з міркувань створення умов, за яких оброблюється лише приповерхневий шар плівки. Для цього розв'язувалась одновимірна задача дифузії водню по товщині плівки. В тій роботі було зроблено висновок, що якщо застосовувати електроліз для водневої обробки плівки, то через дві секунди концентрація водню в зразку як функція відстані x від поверхні плівки швидко зменшується. Спираючись на оцінки, припустили, що у середині товщини плівки відносна концентрація водню становить від 2,6% до 23,2% від концентрації на поверхні. Отже, ми вибрали в якості розподілу водню в плівці при розрахунках на основі моделі трансфер-матриць неоднорідну функцію об'ємної концентрації. Ми припускали, що водень зосереджувався в приповерхневому шарі товщиною 10 нм. За таких умов розрахунки показали, що теоретичні криві ППР майже не змінюють своєї форми у порівнянні з кривими ППР необробленої плівки. Інтенсивність відбитого світла трохи зменшується зі збільшенням відносної концентрації

порожнин з воднем. Це якісно відповідає експерименту, а саме експериментально спостережуваним змінам спектра ППР протягом 5-15 імпульсів. Після 20 імпульсів струму електролізу в експериментах зразок істотно змінював властивості поверхні. Припускалось, що в разі двадцяти імпульсної обробки водневій порожнини, які були у верхньому шарі плівки, не витримують тиску водню і відкриваються на поверхню. В результаті змінюється шорсткість поверхні.

Теоретичне моделювання збільшення шорсткості поверхні на основі методу трансфер-матриць передбачає значне зменшення амплітуди резонансу та збільшення півширини кривої ППР. Результати, отримані на основі моделювання якісно підтвердили експериментальні спостереження, але, на жаль, отримати кількісну відповідність між теоретичним моделюванням і експериментом не вдалося. Ба більше того, якісний вплив на зсув резонансних кривих неоднорідності розподілу порожнин з воднем вздовж товщини виявити також не вдалося.

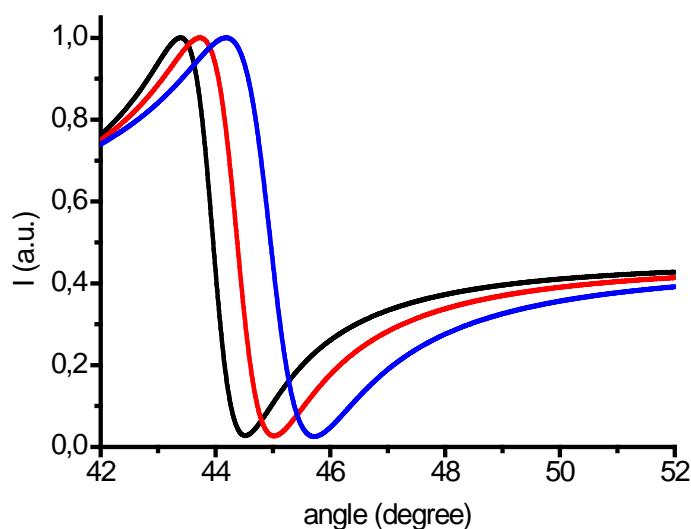


Рис. 3. Теоретичні криві ППР. Чорна крива відповідає гладкій поверхні плівки; червона крива відповідає випадку 15% об'ємної концентрації нанопорожнин у верхньому шарі товщиною 10 нм; синя крива відповідає

випадку 30% об'ємної концентрації нанопорожнин у верхньому шарі товщиною 10 нм.

3 Моделювання на основі концепції ефективної сприйнятливості

З попереднього розділу зрозуміло, що треба побудувати модель, яка б враховувала конфігурацію обробленого воднем сенсора. Таке моделювання має брати до уваги розмір, форму і характер розподілу по товщині плівки порожнин з воднем. З цією метою в цьому розділі будується модель плівки з порожнинами на основі концепції ефективної сприйнятливості [5, 12].

3.1 Основи засади концепції ефективної сприйнятливості

Для простоти розглянемо об'єкт, поміщений в деяке середовище, електродинамічні властивості якого описуються функцією Гріна $G_{ij}(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \omega)$. Таким об'єктом може бути однорідна плівка, наночастинка, і в тому числі плівка, яка є робочим елементом ППР сенсора. На цей об'єкт діє зовнішнє довгохвильове поле $E_i^{(0)}(\mathbf{R}, \omega)$, яке індукує в ньому локальні струми $J_l(\mathbf{R}', \omega)$. Ці струми зв'язуються з локальним полем матеріальним співвідношенням

$$j_i(\mathbf{R}, \omega) = -i\omega\chi'_{ij}(\omega)E_j(\mathbf{R}, \omega). \quad (3.1)$$

Якби можна було на експерименті виміряти локальне поле всередині наночастинки, то ми б знали струми, але на практиці цього зробити неможливо. В експерименті можна контролювати лише зовнішнє поле

$E_i^{(0)}(\mathbf{R}, \omega)$. Тому в концепції ефективної сприйнятливості намагаються встановити співвідношення між локальними струмами і зовнішнім полем

$$j_i(\mathbf{R}, \omega) = -i\omega X'_{ij}(\omega) E_j^{(0)}(\mathbf{R}, \omega). \quad (3.2)$$

Тензор $X'_{ij}(\omega)$ називають ефективною сприйнятливістю об'єкта, що досліджується. Він є лінійним відгуком нашого об'єкта на зовнішнє довгохвильове поле.

Щоби розв'язати цю задачу спочатку записують локальне поле, як суперпозицію зовнішнього поля і полів, що виникають завдяки індукованим в об'єкті струмам. Для цього використовують функцію Гріна, яка є полем точкового струму

$$E_i(\mathbf{R}, \omega) = E_i^{(0)}(\mathbf{R}, \omega) - i\omega\mu_0 \int_V d\mathbf{R}' G_{ij}(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \omega) J_l(\mathbf{R}', \omega) . \quad (3.3)$$

В останній вираз, як правило, підставляють матеріальне співвідношення (3.1). В результаті таких дій отримують рівняння самоузгодження для визначення локального поля

$$E_i(\mathbf{R}, \omega) = E_i^{(0)}(\mathbf{R}, \omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \int_V d\mathbf{R}' G_{ij}(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \omega) \chi_{jl} E_l(\mathbf{R}', \omega) \quad (3.4)$$

Рівняння самоузгодженого поля (3.4) має назву рівняння Ліпмана-Швінгера. Якщо припустити, що існує тензор ефективної сприйнятливості, то замість локального поля зовнішнього поля в рівняння самоузгодження можна підставити його вираз через локальне поле і тензор ефективної сприйнятливості. Також можливий підхід, коли ми навпаки заміняємо локальне поле зовнішнім через використання тензора ефективної сприйнятливості. В результаті ми отримаємо рівняння для тензора ефективної сприйнятливості, вигляд якого залежить від конкретної

конфігурації об'єкту, який ми досліджуємо. В даній дипломній роботі відповідні перетворення виконано для плівки, що є робочим елементом ППР сенсора.

3.2 Ефективна сприйнятливість тонкої плівки

Розглянемо тепер плівку, яка є робочим елементом в сенсорі ППР, з точки зору концепції ефективної сприйнятливості. З плівкою пов'яжемо декартову систему координат, вісь z якої напрямимо перпендикулярно до плівки, а серединну площину плівки сумістимо з площиною xOy . Враховуючи симетрію задачі, а саме те, що плівка є ізотропною в площині xOy , ми можемо виконати перетворення Фур'є з рівнянням самоузгодження

$$E_i(\mathbf{k}, z, \omega) = E_i^{(0)}(\mathbf{k}, z, \omega) - k_0^2 \int_h dz' G_{ij}(\mathbf{k}, z, z', \omega) \chi_{jl}(z', \omega) E_l(\mathbf{k}, z', \omega) \quad (3.5)$$

У підручнику [12] далі ефективна сприйнятливість плівки будується наступним чином. При виводі співвідношення припускається, що плівка настільки тонка, що не можна казати, що світло поширюється вздовж її товщини. За такого підходу виражають зовнішнє поле через локальне поле і ефективну сприйнятливість. Тоді рівняння Ліпмана-Швінгера набуває вигляду

$$E_j(\mathbf{k}, z, \omega) = \left(X_{kj}(\mathbf{k}, z, \omega) \right)^{-1} \chi_{ki}(z, \omega) E_i(\mathbf{R}, \omega) - k_0^2 \int_h dz' G_{ij}(\mathbf{k}, z, z', \omega) \chi_{jk}(z', \omega) E_k(\mathbf{k}, z', \omega) \quad (3.6)$$

Розкладають локальне поле в ряд Фур'є по товщині плівки

$$E_i(\mathbf{k}, z, \omega) = \sum_q E_i(\mathbf{k}, q, \omega) e^{iqz} \quad (3.7)$$

це призводить до рівняння, з якого знаходять ефективну сприйнятливість

$$\sum_{\mathbf{k}} \int_V dz \left\{ - \left(X_{kj}^{uf}(k, z, \omega) \right)^{-1} \chi_{ki}(z, \omega) + \omega^2 \int_h dz' G_{ik}(k, z', z, \omega) \chi_{kj}(z, \omega) + \delta_{ij} \right\} E_j(\mathbf{k}, q, \omega) e^{iqz} = 0 \quad (3.8)$$

Сама ж ефективна сприйнятливість має вигляд

$$X_{ij}^{(uf)}(\mathbf{k}, z, \omega) = \chi_{il}(z, \omega) \left[\delta_{jl} + k_0^2 \int_{-h/2}^{h/2} dz' G_{jk}(k, z', z, \omega) \chi_{kl}(z, \omega) \right]^{-1} \quad (3.9)$$

де змінна z лежить в інтервалі $-h/2 < z < h/2$, де h – товщина плівки.

В даній же дипломній роботі також використовується інший підхід. Оскільки локальне поле сильно змінюється по товщині плівки, перейдемо до зовнішнього поля за допомогою ефективної сприйнятливості

$$\mathbf{E}(\mathbf{k}_\square, z, \omega) = \hat{\chi}^{-1}(z, \omega) \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_\square, z, \omega) \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_\square, z, \omega). \quad (3.10)$$

Підставляючи (3.10) в (3.5), отримаємо

$$\hat{\chi}^{-1}(z, \omega) \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_\square, z, \omega) \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_\square, z, \omega) = \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_\square, z, \omega) - k_0^2 \int_0^d \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_\square, z, z', \omega) \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_\square, z', \omega) \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_\square, z', \omega) dz'. \quad (3.11)$$

Зовнішнє поле можна записати у вигляді

$$\mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_\square, z, \omega) = \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_\square, k_\perp, \omega) e^{ik_\perp z}. \quad (3.12)$$

Тоді з (3.11) можна виключити $\mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_\square, k_\perp, \omega)$

$$\hat{\chi}^{-1}(z, \omega) \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) = \hat{\mathbf{I}} - k_0^2 \int_0^d \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z', \omega) \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z', \omega) e^{ik_{\perp}(z'-z)} dz'. \quad (3.13)$$

В результаті для компонент ефективної сприйнятливості отримаємо систему інтегральних рівнянь Фредгольма другого роду [13]:

$$\hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) = \hat{\chi}(z, \omega) - k_0^2 \int_0^d \hat{\chi}(z, \omega) \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z', \omega) \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z', \omega) e^{ik_{\perp}(z'-z)} dz'. \quad (3.14)$$

Систему можна розв'язувати методом послідовних наближень і також за схемою Ністрьома [14]:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{X}}^{(0)}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) &= \hat{\chi}(z, \omega); \\ \hat{\mathbf{X}}^{(1)}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) &= \hat{\chi}(z, \omega) - k_0^2 \hat{\chi}(z, \omega) \int_0^d \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z', \omega) e^{ik_{\perp}(z'-z)} \hat{\mathbf{X}}^{(0)}(\mathbf{k}_{\square}, z', \omega) e^{ik_{\perp}(z'-z)} dz'; \\ &\dots\dots\dots \\ \hat{\mathbf{X}}^{(n+1)}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) &= \hat{\chi}(z, \omega) - k_0^2 \hat{\chi}(z, \omega) \int_0^d \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z', \omega) e^{ik_{\perp}(z'-z)} \hat{\mathbf{X}}^{(n)}(\mathbf{k}_{\square}, z', \omega) e^{ik_{\perp}(z'-z)} dz'; \\ &\dots\dots\dots \end{aligned}$$

Згортання ітерацій за допомогою підходу роботи [15] дає наступний вираз для ефективної сприйнятливості

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) &= \hat{\chi}(\omega) - k_0^2 \hat{\chi}(\omega) \cdot \\ &\cdot \int_{-d/2}^{d/2} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z', \omega) e^{ik_{\perp}(z'-z)} [\hat{\mathbf{I}} + k_0^2 \hat{\chi}(\omega) \int_{-d/2}^{d/2} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z', z'', \omega) e^{ik_{\perp}(z''-z')} dz'']^{-1} \hat{\chi}(\omega) dz'. \end{aligned}$$

Або

$$\hat{\mathbf{\Omega}}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) = \hat{\mathbf{I}} - k_0^2 \int_{-d/2}^{d/2} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z', \omega) e^{ik_{\perp}(z'-z)} [\hat{\mathbf{I}} + k_0^2 \hat{\chi}(\omega) \int_{-d/2}^{d/2} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z', z'', \omega) e^{ik_{\perp}(z''-z')} dz'']^{-1} \hat{\chi}(\omega) dz'.$$

Можливо також розкласти ефективну сприйнятливість в ряд Фур'є по товщині плівки

$$\hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) = \sum_{m=0}^{+\infty} \hat{\mathbf{A}}_m \exp(-i2\pi mz / d). \quad (3.15)$$

Підставляючи (3.15) в (3.13), маємо

$$\hat{\chi}^{-1}(z, \omega) \sum_{m=0}^{+\infty} \hat{\mathbf{A}}_m \exp(-i2\pi mz/d) = \hat{\mathbf{I}} - k_0^2 \int_0^d \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_\square, z, z', \omega) \sum_{s=0}^{+\infty} \hat{\mathbf{A}}_s \exp(-i2\pi sz'/d) e^{ik_\perp(z'-z)} dz'. \quad (3.16)$$

Помножимо праву і ліву частину (44) на $\exp(i2\pi kz/d)$ і проінтегруємо по z . Нехай також $\hat{\chi}(\omega)$ залежить тільки від частоти хвилі. В результаті отримаємо

$$\hat{\chi}^{-1}(\omega) \hat{\mathbf{A}}_m = \hat{\mathbf{I}} \delta_{m0} - k_0^2 \sum_{s=0}^{+\infty} \int_0^d \left(\int_0^d \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_\square, z, z', \omega) e^{ik_\perp(z'-z)} e^{i2\pi(mz-sz')/d} dz' \right) dz \hat{\mathbf{A}}_s. \quad (3.17)$$

Введемо позначення

$$\int_0^d \left(\int_0^d \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_\square, z, z', \omega) e^{ik_\perp(z'-z)} e^{i2\pi(mz-sz')/d} dz' \right) dz = \hat{\mathbf{G}}^{ms}(\mathbf{k}_\square, k_\perp, \omega). \quad (3.18)$$

Тоді (3.17) матиме вигляд

$$\hat{\chi}^{-1}(\omega) \hat{\mathbf{A}}_m = \hat{\mathbf{I}} \delta_{m0} - k_0^2 \sum_{s=0}^{+\infty} \hat{\mathbf{G}}^{ms}(\mathbf{k}_\square, k_\perp, \omega) \hat{\mathbf{A}}_s. \quad (3.19)$$

або

$$\hat{\mathbf{A}}_m + k_0^2 \hat{\chi}(\omega) \sum_{s=0}^{+\infty} \hat{\mathbf{G}}^{ms}(\mathbf{k}_\square, k_\perp, \omega) \hat{\mathbf{A}}_s = \hat{\chi}(\omega) \delta_{m0}. \quad (3.20)$$

$$\sum_{s=0}^{+\infty} \left(\hat{\mathbf{I}} \delta_{ms} + k_0^2 \hat{\chi}(\omega) \hat{\mathbf{G}}^{ms}(\mathbf{k}_\square, k_\perp, \omega) \right) \hat{\mathbf{A}}_s = \hat{\chi}(\omega) \delta_{m0}. \quad (3.21)$$

Загальний розв'язок системи нескінченних лінійних матричних рівнянь (3.21)

відносно $\hat{\mathbf{A}}_s$ можна знайти методом послідовних наближень:

$$\hat{\mathbf{A}}_s = \hat{\mathbf{M}}^{ss} \left(\hat{\mathbf{I}} \delta_{s0} - k_0^2 \hat{\mathbf{G}}^{s0} \left(\hat{\mathbf{I}} - k_0^2 \left(\hat{\mathbf{G}}^{s0} \right)^{-1} \sum_{m_1 \neq s} \hat{\mathbf{G}}^{sm_1} \hat{\mathbf{M}}^{m_1 m_1} \hat{\mathbf{G}}^{m_1 0} \left(\hat{\mathbf{I}} - k_0^2 \left(\hat{\mathbf{G}}^{m_1 0} \right)^{-1} \sum_{m_2 \neq m_1} \hat{\mathbf{G}}^{m_1 m_2} \hat{\mathbf{M}}^{m_2 m_2} \hat{\mathbf{G}}^{m_2 0} (\dots) \right) \right) \hat{\mathbf{M}}^{00} \right),$$

$$\hat{\mathbf{M}}^{kk} = \left(\hat{\mathbf{I}} + k_0^2 \hat{\chi} \hat{\mathbf{G}}^{kk} \right)^{-1} \hat{\chi}. \quad (3.22)$$

Формулу (3.22) можна розгорнути наступним чином

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{A}}_s^0 &= \hat{\mathbf{M}}^{ss} \delta_{s0}, \quad \hat{\mathbf{A}}_s^1 = \hat{\mathbf{M}}^{ss} \delta_{s0} - k_0^2 \hat{\mathbf{M}}^{ss} \hat{\mathbf{G}}^{s0} \hat{\mathbf{M}}^{00}, \quad \hat{\mathbf{A}}_s^2 = \hat{\mathbf{M}}^{ss} \delta_{s0} - k_0^2 \hat{\mathbf{M}}^{ss} \hat{\mathbf{G}}^{s0} \hat{\mathbf{M}}^{00} + k_0^4 \hat{\mathbf{M}}^{ss} \left(\sum_{m_1 \neq s} \hat{\mathbf{G}}^{sm_1} \hat{\mathbf{M}}^{m_1 m_1} \hat{\mathbf{G}}^{m_1 0} \right) \hat{\mathbf{M}}^{00}, \\ \hat{\mathbf{A}}_s^4 &= \hat{\mathbf{M}}^{ss} \left(\hat{\mathbf{I}} \delta_{s0} - k_0^2 \hat{\mathbf{G}}^{s0} \left(\hat{\mathbf{I}} - k_0^2 (\hat{\mathbf{G}}^{s0})^{-1} \sum_{m_1 \neq s} \hat{\mathbf{G}}^{sm_1} \hat{\mathbf{M}}^{m_1 m_1} \hat{\mathbf{G}}^{m_1 0} \left(\hat{\mathbf{I}} - k_0^2 (\hat{\mathbf{G}}^{m_1 0})^{-1} \sum_{m_2 \neq m_1} \hat{\mathbf{G}}^{m_1 m_2} \hat{\mathbf{M}}^{m_2 m_2} \hat{\mathbf{G}}^{m_2 0} \right) \right) \right) \hat{\mathbf{M}}^{00}, \dots\end{aligned}\quad (3.23)$$

Систему (3.21) можна розв'язати точно, якщо вдасться знайти асимптотичну поведінку матричних коефіцієнтів $\hat{\mathbf{A}}_s$

$$\hat{\mathbf{A}}_s \square f(s) \hat{\mathbf{A}}, \quad s \geq N_1, \quad (3.24)$$

де $f(s)$ - скалярна функція, а $\hat{\mathbf{A}}$ - матриця, яка не залежить від s . Адже тоді вона зводиться до скінченної системи лінійних матричних рівнянь відносно матриць $\hat{\mathbf{A}}_s$, $0 \leq s \leq N_1 - 1$ і $\hat{\mathbf{A}}$

$$\sum_{s=0}^{N_1-1} \left(\hat{\mathbf{I}} \delta_{ms} + k_0^2 \hat{\chi}(\omega) \hat{\mathbf{G}}^{ms}(\mathbf{k}_{\square}, k_{\perp}, \omega) \right) \hat{\mathbf{A}}_s + \hat{\mathbf{A}} \sum_{s=N_1}^{+\infty} \left(\hat{\mathbf{I}} \delta_{ms} + k_0^2 \hat{\chi}(\omega) \hat{\mathbf{G}}^{ms}(\mathbf{k}_{\square}, k_{\perp}, \omega) \right) f(s) = \hat{\chi}(\omega) \delta_{m0}. \quad (3.25)$$

Оскільки ряд в (3.25) має збігатися, то

$$f(s) \square s^{-\alpha} \exp(-\beta s), \quad \beta \geq 0. \quad (3.26)$$

З подальшого асимптотичного головної частини (3.25) можна знайти поки невідомі параметри α , β .

Таким чином, в цьому розділі було отримано ефективну сприйнятливність тонкої плівки, що є робочим елементом ППР сенсора. Наступні розділи присвячені моделюванню плівки з порожнинами, заповненими воднем.

3.4 Ефективна сприйнятливість плівки з одним шаром порожнин

Розглянемо плівку лише з одним шаром порожнин. Будемо припускати, що порожнини розміщені так, що їхні центри знаходяться на площині $z=z_l$ (Рис. 3.1). Також для спрощення буде вважати, що порожнини мають однакову форму і розміри. Будемо вважати, що вони або циліндричної форми, або сфероїдної. Розміри частинок визначаються параметрами $a_x = a_y = r_p$, $a_z = \kappa r_p$, які визначають радіус кола серединного перерізу і висоту частинки.

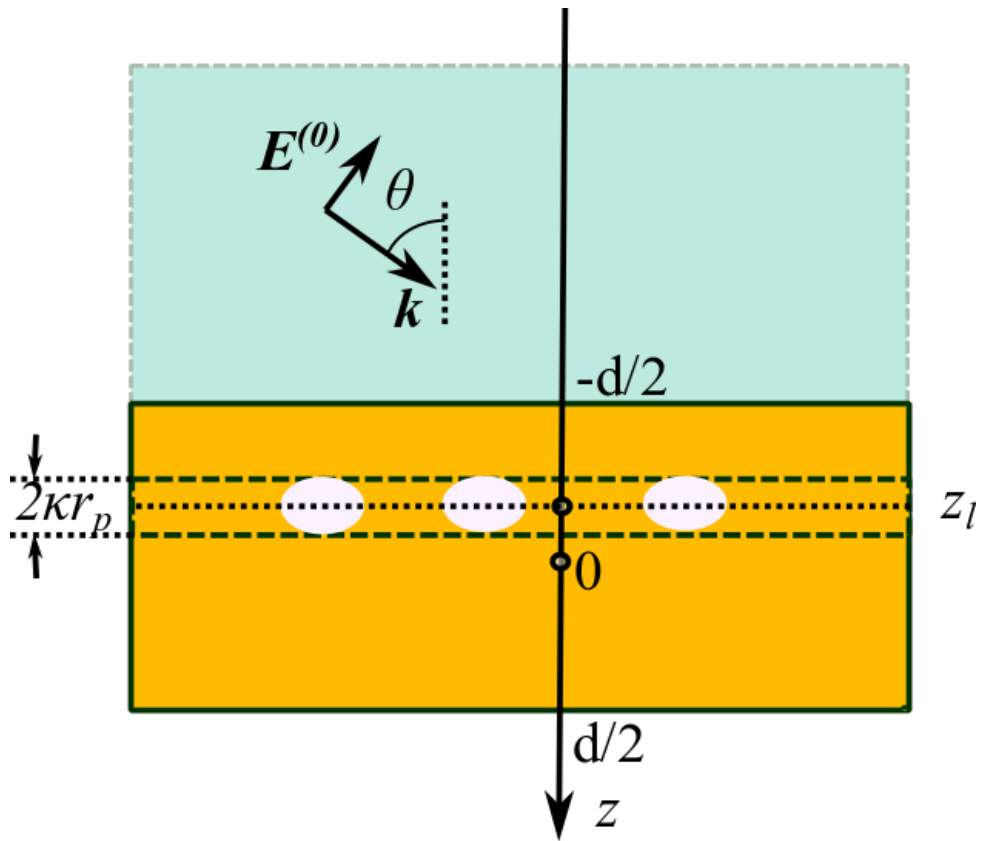


Рис. 3.1. Поперечний переріз плівки на склі з моношаром порожнин

Напишемо рівняння поля в плівці

$$\mathbf{E}(\mathbf{R}, \omega) = \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{R}, \omega) - k_0^2 \int_{\bigcup_{a=1}^N V_a} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{R}', \omega) d\mathbf{R}', \quad (3.27)$$

де інтегрування відбувається по об'єму півки за виключенням N порожнин V_a . Оскільки порожнини розміщено в моношарі, то співвідношення (3.27) можна також переписати у вигляді

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{R}, \omega) = & \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{R}, \omega) - k_0^2 \int_V \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{R}', \omega) d\mathbf{R}' + \\ & + k_0^2 \sum_{a=1}^N \int_{-kr_p}^{kr_p} \int_{S_a(z')} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, z, \mathbf{r}_a, z_l + z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}_a, z_l + z', \omega) d\mathbf{r}_a dz'. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Де $S_a(z')$ - площа поперечного перерізу нанопорожнини площиною $z=z_l+z'$. Для циліндричної порожнини $S_a(z') = \pi r_p^2$, для сфероїдної $S_a(z') = \pi (r_p^2 - z'^2 / \kappa^2)$ тощо.

Цілком розумно припустити, що під час водневої обробки порожнини виникають випадковим чином. Усереднимо другий інтеграл в (3.28) за положеннями порожнин

$$\frac{1}{S} \int_S d\mathbf{r}' \int_{S_a(z')} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a - \mathbf{r}', z, z_l + z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}_a + \mathbf{r}', z_l + z', \omega) d\mathbf{r}_a. \quad (3.29)$$

У співвідношенні (3.29) ми інтегруємо за положенням осі симетрії порожнини в товщині півки і результат ділимо на площу поверхні півки. Подальші перетворення виглядають наступним чином

$$\begin{aligned} & \frac{1}{S} \int_{S_a} d\mathbf{r}_a \int_S d\mathbf{r}' \int \frac{d\mathbf{k}_\square}{(2\pi)^2} e^{-i\mathbf{k}_\square \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_a - \mathbf{r}')} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_\square, z, z_l + z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \int \frac{d\mathbf{k}'_\square}{(2\pi)^2} e^{-i\mathbf{k}'_\square \cdot (\mathbf{r}_a + \mathbf{r}')} \mathbf{E}(\mathbf{k}'_\square, z_l + z', \omega) = \\ & \frac{1}{S} \int_{S_a} e^{i\mathbf{r}_a \cdot (\mathbf{k}_\square - \mathbf{k}'_\square)} d\mathbf{r}_a \underbrace{\int_S \frac{e^{i\mathbf{r}' \cdot (\mathbf{k}_\square - \mathbf{k}'_\square)}}{(2\pi)^2} d\mathbf{r}'}_{\delta(\mathbf{k}_\square - \mathbf{k}'_\square)} \int \frac{d\mathbf{k}_\square d\mathbf{k}'_\square}{(2\pi)^2} e^{-i\mathbf{k}_\square \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_\square, z, z_l + z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{k}'_\square, z_l + z', \omega) = \\ & = \frac{S_a(z')}{S} \int \frac{d\mathbf{k}_\square}{(2\pi)^2} e^{-i\mathbf{k}_\square \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_\square, z, z_l + z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{k}_\square, z_l + z', \omega). \end{aligned} \quad (3.30)$$

Оскільки порожнини мають однакову форму, розмір і орієнтацію в просторі, то для кожної порожнини маємо однаковий результат усереднення (3.30). Підставляючи (3.30) в (3.28) і переходячи до Фур'є-образу, маємо

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) = & \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) - k_0^2 \int_{-d/2}^{d/2} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{k}_{\square}, z', \omega) dz' + \\ & + k_0^2 \int_{-kr_p}^{kr_p} n(z') \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z_l + z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{k}_{\square}, z_l + z', \omega) dz', \end{aligned} \quad (3.31)$$

де $n(z') = \frac{NS_a(z')}{S}$ - поверхнева концентрація порожнин у плівці в перерізі площиною $z = z_l + z'$. Якщо маємо циліндричні порожнини, то ця концентрація не залежить від z' і збігається з об'ємною концентрацією порожнин в моношарі. Оскільки локальне поле сильно змінюється по товщині плівки, перейдемо до зовнішнього поля за допомогою ефективної сприйнятливості

$$\mathbf{E}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) = \hat{\chi}^{-1}(\omega) \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega). \quad (3.32)$$

Тоді матимемо

$$\begin{aligned} \hat{\chi}^{-1}(\omega) \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) = & \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) - k_0^2 \int_{-d/2}^{d/2} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z', \omega) \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z', \omega) \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_{\square}, z', \omega) dz' + \\ & + k_0^2 \int_{-kr_p}^{kr_p} n(z') \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z_l + z', \omega) \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z_l + z', \omega) \mathbf{E}(\mathbf{k}_{\square}, z_l + z', \omega) dz'. \end{aligned} \quad (3.33)$$

З останнього співвідношення, враховуючи $\mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) = \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_{\square}, k_{\perp}, \omega) e^{ik_{\perp}z}$, отримаємо

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) = & \hat{\chi}(\omega) - k_0^2 \hat{\chi}(\omega) \int_{-d/2}^{d/2} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z', \omega) \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z', \omega) e^{ik_{\perp}(z'-z)} dz' + \\ & + k_0^2 \hat{\chi}(\omega) \int_{-kr_p}^{kr_p} n(z') \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z_l + z', \omega) \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z_l + z', \omega) e^{ik_{\perp}(z_l+z'-z)} dz'. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Система інтегральних рівнянь (3.34) розв'язується методом послідовних наближень

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{X}}^{(0)}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) &= \hat{\chi}(\omega), \\
\hat{\mathbf{X}}^{(1)}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) &= \hat{\chi}(\omega) - k_0^2 \hat{\chi}(\omega) \int_{-d/2}^{d/2} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z', \omega) \hat{\chi}(\omega) e^{ik_{\perp}(z'-z)} dz' + \\
&\quad + k_0^2 \hat{\chi}(\omega) \int_{-k\tau_p}^{k\tau_p} n(z') \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z_l + z', \omega) \hat{\chi}(\omega) e^{ik_{\perp}(z_l+z'-z)} dz', \\
&\dots \\
\hat{\mathbf{X}}^{(n+1)}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) &= \hat{\chi}(\omega) - k_0^2 \hat{\chi}(\omega) \int_{-d/2}^{d/2} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z', \omega) \hat{\mathbf{X}}^{(n)}(\mathbf{k}_{\square}, z', \omega) e^{ik_{\perp}(z'-z)} dz' + \\
&\quad + \int_{-k\tau_p}^{k\tau_p} n(z') \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z_l + z', \omega) \hat{\mathbf{X}}^{(n)}(\mathbf{k}_{\square}, z_l + z', \omega) e^{ik_{\perp}(z_l+z'-z)} dz'.
\end{aligned} \tag{3.35}$$

3.5 Ефективна сприйнятливість плівки з порожнинами

У попередньому розділі розглянуто випадок моношару порожнин. Насправді ж порожнини розподіляються в плівці і в площині плівки і по товщині плівки випадковим чином. Рівняння самоузгодженого поля в плівці

$$\mathbf{E}(\mathbf{R}, \omega) = \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{R}, \omega) - k_0^2 \int_{V \setminus \bigcup_{a=1}^{N_0} V_a} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{R}', \omega) d\mathbf{R}', \tag{3.36}$$

де інтегрування відбувається по об'єму плівки за виключенням N_0 порожнин V_a , які розміщено випадковим чином в плівці. Співвідношення (3.36) можна також переписати у вигляді

$$\mathbf{E}(\mathbf{R}, \omega) = \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{R}, \omega) - k_0^2 \int_V \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{R}', \omega) d\mathbf{R}' + k_0^2 \sum_{a=1}^{N_0} \int_{V_a} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{R}', \omega) d\mathbf{R}'. \tag{3.37}$$

Локальне поле в порожнинах є формальним аналітичним продовженням поля в плівці. Оскільки ми маємо один і той самий інтеграл за порожнинами двічі, але з різними знаками, то вираз (3.37) не відрізняється від (3.36). Усереднимо другий інтеграл за положеннями порожнин

$$\mathbf{E}(\mathbf{R}, \omega) = \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{R}, \omega) - k_0^2 \int_V \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{R}', \omega) d\mathbf{R}' + k_0^2 \left\langle \sum_{m=1}^{N_0} \int_{V_0} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{R}', \omega) d\mathbf{R}' \right\rangle.$$

Для спрощення задачі уявно розіб'ємо плівку на моношари з порожнинами циліндричної форми (Рис. 3.2).

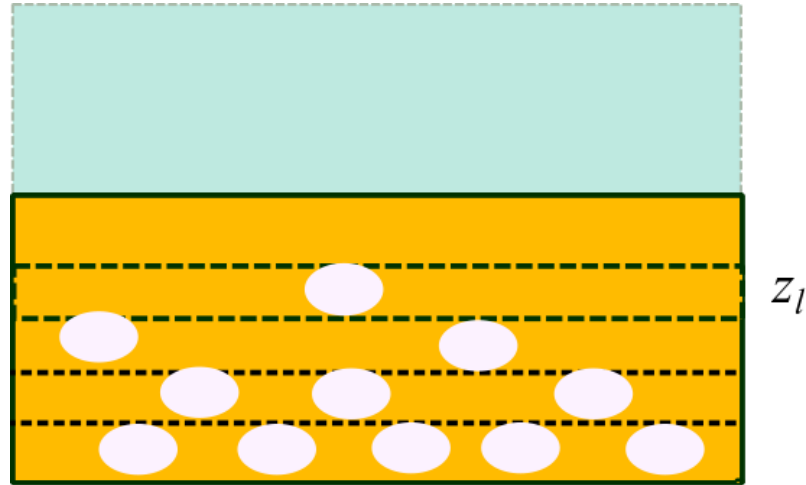


Рис. 3.2. Схематичний рисунок, який показує моделювання плівки з порожнинами за допомогою моношарів з порожнинами

Будемо вважати, що ми маємо рівномірний розподіл порожнин в площині плівки для кожного $z = \text{const}$, тоді останнє співвідношення можна переписати в вигляді

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, z, \omega) = & \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{r}, z, \omega) - k_0^2 \int_{-d/2}^{d/2} dz' \int_S \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', z, z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}', z', \omega) d\mathbf{r}' + \\ & + k_0^2 \sum_{l=1}^{d/2\kappa r_p} \int_{-\kappa r_p}^{\kappa r_p} dz' \left\langle \sum_{a=1}^{N(z_l)} \int_{S_a} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a - \mathbf{r}', z, z_l + z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}_a + \mathbf{r}', z_l + z', \omega) d\mathbf{r}' \right\rangle, \quad (3.38) \\ z_l = & -d/2 + \kappa r_p (2a + 1). \end{aligned}$$

Звідси

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, z, \omega) = & \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{r}, z, \omega) - k_0^2 \int_{-d/2}^{d/2} dz' \int_S \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', z, z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}', z', \omega) d\mathbf{r}' + \\ & + k_0^2 \sum_{l=1}^{d/2\kappa r_p} \int_{-\kappa r_p}^{\kappa r_p} dz' \frac{1}{S^{N(z_l)}} \prod_{a=1}^{N(z_l)} \int_S d\mathbf{r}_a \sum_{a=1}^{N(z_l)} \int_{S_a} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a - \mathbf{r}', z, z_l + z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}_a + \mathbf{r}', z_l + z', \omega) d\mathbf{r}'. \quad (3.39) \end{aligned}$$

Деталі усереднення наступні

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{S} \int_{S_a} d\mathbf{r}' \int_{S_a} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a - \mathbf{r}', z, z_l + z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}_a + \mathbf{r}', z_l + z', \omega) d\mathbf{r}' = \\
& = \int_{S_a} d\mathbf{r}' \frac{1}{S} \int_{S_a} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a - \mathbf{r}', z, z_l + z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}_a + \mathbf{r}', z_l + z', \omega) d\mathbf{r}' = \\
& = \int_{S_a} d\mathbf{r}' \frac{1}{S} \int_{S_a} d\mathbf{r}_a \int \frac{d\mathbf{k}_\square}{(2\pi)^2} e^{-i\mathbf{k}_\square(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a - \mathbf{r}')} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_\square, z, z_l + z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \int \frac{d\mathbf{k}'_\square}{(2\pi)^2} e^{-i\mathbf{k}'_\square(\mathbf{r}_a + \mathbf{r}')} \mathbf{E}(\mathbf{k}'_\square, z_l + z', \omega) = \quad (3.40) \\
& \frac{1}{S} \int_{S_a} e^{i\mathbf{r}'(\mathbf{k} - \mathbf{k}')} d\mathbf{r}' \underbrace{\int_S \frac{e^{i\mathbf{r}_a(\mathbf{k}_\square - \mathbf{k}'_\square)} d\mathbf{r}_a}{(2\pi)^2}}_{\delta(\mathbf{k}_\square - \mathbf{k}'_\square)} \int \frac{d\mathbf{k}_\square d\mathbf{k}'_\square}{(2\pi)^2} e^{-i\mathbf{k}_\square \mathbf{r}} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_\square, z, z_l + z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{k}'_\square, z_l + z', \omega) = \\
& = \frac{1}{S} \pi r_p^2 \int \frac{d\mathbf{k}_\square}{(2\pi)^2} e^{-i\mathbf{k}_\square \mathbf{r}} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_\square, z, z_l + z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{k}_\square, z_l + z', \omega).
\end{aligned}$$

Підставляючи (3.40) в (3.39), отримаємо

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}(\mathbf{r}, z, \omega) = & \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{r}, z, \omega) - k_0^2 \int_{-d/2}^{d/2} dz' \int \frac{d\mathbf{k}_\square}{(2\pi)^2} e^{-i\mathbf{k}_\square \mathbf{r}} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_\square, z, z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{k}_\square, z', \omega) + \\
& + k_0^2 \sum_{l=1}^{d/2\kappa r_p} \frac{N(z_l) \pi r_p^2}{S} \int_{-\kappa r_p}^{\kappa r_p} dz' \int \frac{d\mathbf{k}_\square}{(2\pi)^2} e^{-i\mathbf{k}_\square \mathbf{r}} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_\square, z, z_l + z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{k}_\square, z_l + z', \omega). \quad (3.41)
\end{aligned}$$

Тоді для перетворень Фур'є в площині плівки матимемо рівняння

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}(\mathbf{k}_\square, z, \omega) = & \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_\square, z, \omega) - k_0^2 \int_{-d/2}^{d/2} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_\square, z, z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{k}_\square, z', \omega) dz' + \\
& + k_0^2 \sum_{l=1}^{d/2\kappa r_p} f_p(z_l) \int_{-\kappa r_p}^{\kappa r_p} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_\square, z, z_l + z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{k}_\square, z_l + z', \omega) dz'. \quad (3.42)
\end{aligned}$$

У співвідношенні (3.42) введено об'ємну концентрацію порожнин в l -му шарі

$f_p(z_l) = \frac{N(z_l) \pi r_p^2}{S}$ У граничному випадку дуже тонких шарів з порожнинами

замість (3.42) маємо

$$\mathbf{E}(\mathbf{k}_\square, z, \omega) = \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_\square, z, \omega) - k_0^2 \int_{-d/2}^{d/2} (1 - f_p(z')) \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_\square, z, z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{k}_\square, z', \omega) dz'. \quad (3.42a)$$

Оскільки локальне поле сильно змінюється по товщині плівки, перейдемо до зовнішнього поля за допомогою ефективної сприйнятливості

$$\mathbf{E}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) = \hat{\chi}^{-1}(\omega) \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega). \quad (3.43)$$

Тоді матимемо

$$\begin{aligned} \hat{\chi}^{-1}(\omega) \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) &= \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) - k_0^2 \int_{-d/2}^{d/2} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z', \omega) \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z', \omega) \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_{\square}, z', \omega) dz' + \\ &+ k_0^2 \sum_{l=1}^{d/2\kappa r_p} f_p(z_l) \int_{-\kappa r_p}^{\kappa r_p} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z_l + z', \omega) \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z_l + z', \omega) \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_{\square}, z_l + z', \omega) dz'. \end{aligned} \quad (3.44)$$

З останнього співвідношення, враховуючи $\mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) = \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{k}_{\square}, k_{\perp}, \omega) e^{ik_{\perp}z}$, отримаємо

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) &= \hat{\chi}(\omega) - k_0^2 \hat{\chi}(\omega) \int_{-d/2}^{d/2} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z', \omega) \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z', \omega) e^{ik_{\perp}(z'-z)} dz' + \\ &+ k_0^2 \hat{\chi}(\omega) \sum_{l=1}^{d/2\kappa r_p} f_p(z_l) \int_{-\kappa r_p}^{\kappa r_p} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z_l + z', \omega) \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z_l + z', \omega) e^{ik_{\perp}(z_l+z'-z)} dz'. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Система інтегральних рівнянь (3.45) розв'язується методом послідовних наближень

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{X}}^{(0)}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) &= \hat{\chi}(\omega), \\ \hat{\mathbf{X}}^{(1)}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) &= \hat{\chi}(\omega) - k_0^2 \hat{\chi}(\omega) \int_{-d/2}^{d/2} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z', \omega) \hat{\chi}(\omega) e^{ik_{\perp}(z'-z)} dz' + \\ &+ k_0^2 \hat{\chi}(\omega) \sum_{l=1}^{d/2\kappa r_p} f_p(z_l) \int_{-\kappa r_p}^{\kappa r_p} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z_l + z', \omega) \hat{\chi}(\omega) e^{ik_{\perp}(z_l+z'-z)} dz', \\ &\dots \\ \hat{\mathbf{X}}^{(n+1)}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) &= \hat{\chi}(\omega) - k_0^2 \hat{\chi}(\omega) \int_{-d/2}^{d/2} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z', \omega) \hat{\mathbf{X}}^{(n)}(\mathbf{k}_{\square}, z', \omega) e^{ik_{\perp}(z'-z)} dz' + \\ &+ k_0^2 \hat{\chi}(\omega) \sum_{l=1}^{d/2\kappa r_p} f_p(z_l) \int_{-\kappa r_p}^{\kappa r_p} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z_l + z', \omega) \hat{\mathbf{X}}^{(n)}(\mathbf{k}_{\square}, z_l + z', \omega) e^{ik_{\perp}(z_l+z'-z)} dz'. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Або

$$\begin{aligned}
\hat{\Omega}^{(0)}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) &= \hat{\mathbf{I}}, \\
\hat{\Omega}^{(1)}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) &= \hat{\mathbf{I}} - k_0^2 \int_{-d/2}^{d/2} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z', \omega) \hat{\chi}(\omega) e^{ik_{\perp}(z'-z)} dz' + k_0^2 \sum_{l=1}^{d/2\kappa r_p} f_p(z_l) \int_{-\kappa r_p}^{\kappa r_p} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z_l + z', \omega) \hat{\chi}(\omega) e^{ik_{\perp}(z_l+z'-z)} dz', \\
&\dots \\
\hat{\Omega}^{(n+1)}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) &= \hat{\mathbf{I}} - k_0^2 \int_{-d/2}^{d/2} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \hat{\Omega}^{(n)} e^{ik_{\perp}(z'-z)} dz' + k_0^2 \sum_{l=1}^{d/2\kappa r_p} f_p(z_l) \int_{-\kappa r_p}^{\kappa r_p} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z_l + z', \omega) \hat{\chi}(\omega) \hat{\Omega}^{(n)} e^{ik_{\perp}(z_l+z'-z)} dz'.
\end{aligned} \tag{3.47}$$

Система рівнянь (3.45) є рівняннями типу Дайсона. Її можна переписати в формі

$$\hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) = \hat{\chi}(\omega) - k_0^2 \hat{\chi}(\omega) \sum_{l=1}^{d/2\kappa r_p} [1 - f_p(z_l)] \int_{-\kappa r_p}^{\kappa r_p} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z_l + z', \omega) \hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z_l + z', \omega) e^{ik_{\perp}(z_l+z'-z)} dz'.$$

з інтегральним оператором

$$\wp(z, z') = -k_0^2 \hat{\chi}(\omega) \sum_{l=1}^{d/2\kappa r_p} [1 - f_p(z_l)] \int_{-\kappa r_p}^{\kappa r_p} dz' \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z_l + z', \omega) e^{ik_{\perp}(z_l+z'-z)} \square \tag{3.48}$$

Тому ітераційні співвідношення (3.46) і (3.47) можна згорнути [15] і записати у компактній формі

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{X}}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) &= \hat{\chi}(\omega) - k_0^2 \hat{\chi}(\omega) \sum_{l=1}^{d/2\kappa r_p} [1 - f_p(z_l)] \int_{-\kappa r_p}^{\kappa r_p} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z_l + z', \omega) e^{ik_{\perp}(z_l+z'-z)} \hat{\mathfrak{S}}(\mathbf{k}_{\square}, z_l + z', \omega) \hat{\chi}(\omega) dz', \\
\hat{\mathfrak{S}}(\mathbf{k}_{\square}, z_l + z', \omega) &= \left[\hat{\mathbf{I}} + k_0^2 \hat{\chi}(\omega) \sum_{m=1}^{d/2\kappa r_p} [1 - f_p(z_l)] \int_{-\kappa r_p}^{\kappa r_p} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z_l + z', z_m + z'', \omega) e^{ik_{\perp}(z_m+z''-z_l-z')} dz' \right]^{-1}.
\end{aligned} \tag{3.49}$$

Або

$$\hat{\Omega}(\mathbf{k}_{\square}, z, \omega) = \hat{\mathbf{I}} - k_0^2 \sum_{l=1}^{d/2\kappa r_p} [1 - f_p(z_l)] \int_{-\kappa r_p}^{\kappa r_p} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_{\square}, z, z_l + z', \omega) e^{ik_{\perp}(z_l+z'-z)} \hat{\mathfrak{S}}(\mathbf{k}_{\square}, z_l + z', \omega) \hat{\chi}(\omega) dz'$$

3.6 Відносне поглинання і коефіцієнт відбиття в залежності від кута падіння

В попередніх розділах було знайдено ефективну сприйнятливість металевої плівки з порожнинами і без порожнин. Тому ми можемо тепер знайти локальне поле і струми, що виникають в плівці, а з них і дисипативну функцію, що показує густину енергії зовнішнього поля, яка поглинається за одиницю часу плівкою [12]

$$Q(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{4} \overline{\langle (J_i(\mathbf{k}, z, \omega) + J_i^*(\mathbf{k}, z, \omega)) (E_i(\mathbf{k}, z, \omega) + E_i^*(\mathbf{k}, z, \omega)) \rangle} \quad (3.50)$$

де $J_i(\mathbf{k}, z, \omega)$ - локальний струм, $E_i(\mathbf{k}, z, \omega)$ – локальне поле всередині плівки, індуковане дією зовнішнього поля $E_i^{(0)}(\mathbf{k}, z, \omega)$. У формулі (3.50) використано усереднення за часом

$$\overline{(\dots)} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt(\dots) \quad (3.51)$$

і усереднення за товщиною плівки

$$\langle \dots \rangle = \frac{1}{h} \int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} dz(\dots) \quad (3.52)$$

Таким чином записуючи ефективну сприйнятливість у вигляді

$$X_{ij}^{(uf)}(\mathbf{k}, z, \omega) = \chi_{il}(z, \omega) \Omega_{lj}(\mathbf{k}, z, \omega) \quad (3.53)$$

$$\Omega_{lj}(\mathbf{k}, z, \omega) = \left[\delta_{jl} + k_0^2 \int_0^h dz' G_{jk}(\mathbf{k}, z', z, \omega) \chi_{kl}(z, \omega) \right]^{-1} \quad (3.54)$$

Проводячи викладки, аналогічні до викладок [12], отримаємо для коефіцієнта поглинання р-поляризованої хвилі наступне співвідношення

$$I(\omega) = \frac{1}{2h} \omega \int_0^h dz \operatorname{Im} \chi_{\parallel}(z, \omega) (|\Omega_{xx}(k, z, \omega)|^2 \cos^2 \theta + |\Omega_{zz}(k, z, \omega)|^2 \sin^2 \theta), \quad (3.55)$$

де $I(\omega) = Q(\omega)/I_0(\omega)$, тут $I_0(\omega) = |E_y^{(0)}(\omega)|^2$ - інтенсивність падаючого випромінювання.

Якщо обчислено коефіцієнт поглинання, то коефіцієнт відбиття для світла, падаючого на золоту плівку, яка знаходиться між напівплощинами скла і повітря виглядає наступним чином [16]

$$R = \left| r_{12} - \frac{t_{12} r_{23} e^{-Id} e^{2i\beta}}{1 + r_{12} r_{23} e^{-Id} e^{2i\beta}} \right|^2 \quad (3.56)$$

тут $\beta = k_0 d \sqrt{\varepsilon_2 - \varepsilon_1 \sin^2 \theta}$, I - це інтенсивність відбитого світла, r_{12} , t_{12} , r_{23} - коефіцієнти Френеля, які виражаються наступними формулами

$$r_{12}(\omega, \theta) = \frac{\varepsilon_2 \sqrt{\varepsilon_1} \cos \theta - \varepsilon_1 e_2}{\varepsilon_2 \sqrt{\varepsilon_1} \cos \theta + \varepsilon_1 e_2}, \quad (3.57)$$

$$t_{12}(\omega, \theta) = \frac{2\sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2} \cos \theta}{\varepsilon_2 \cos \theta + e_2 \sqrt{\varepsilon_1}}, \quad (3.58)$$

$$r_{23}(\omega, \theta) = \frac{\varepsilon_3 e_2 - \varepsilon_2 e_3}{\varepsilon_3 e_2 + \varepsilon_2 e_3}, \quad (3.59)$$

$$e_2(\omega, \theta) = \sqrt{\varepsilon_2 - \varepsilon_1 \sin^2 \theta} \quad (3.60)$$

$$e_3(\omega, \theta) = \sqrt{\varepsilon_3 - \varepsilon_1 \sin^2 \theta}. \quad (3.61)$$

4 Результати обчислень

Розглянемо результати обчислень для побудованої моделі ефективної сприйнятливості. В ході досліджень було використано три розподіли порожнин вздовж товщини плівки. Однорідний розподіл

$$f_p(z) = p = const, \quad (4.1)$$

лінійний розподіл

$$f_p(z) = p(1 + 2z/h) \quad (4.2)$$

і квадратичний розподіл

$$f_p(z) = p(0,5 + (1 + z/h)2z/h). \quad (4.3)$$

Середня концентрація в усіх трьох випадках однакова і складає p . Відмінність розподілів полягає в тому, що концентрація порожнин у приповерхневих шарах на межі повітря-золото зростає від однорідного до квадратичного розподілу.

На Рис. 4.1 побудовано криві для коефіцієнту поглинання золотої плівки без вмісту водню і з концентрацією водню 20% (водень розподілений по плівці рівномірно). Бачимо, що максимум коефіцієнту поглинання золотої плівки зсувається в бік більших кутів приблизно на 0.1° , що відповідає якісному характеру даних отриманих на експерименті. Напівширина і амплітуда кривих суттєво не змінюється.

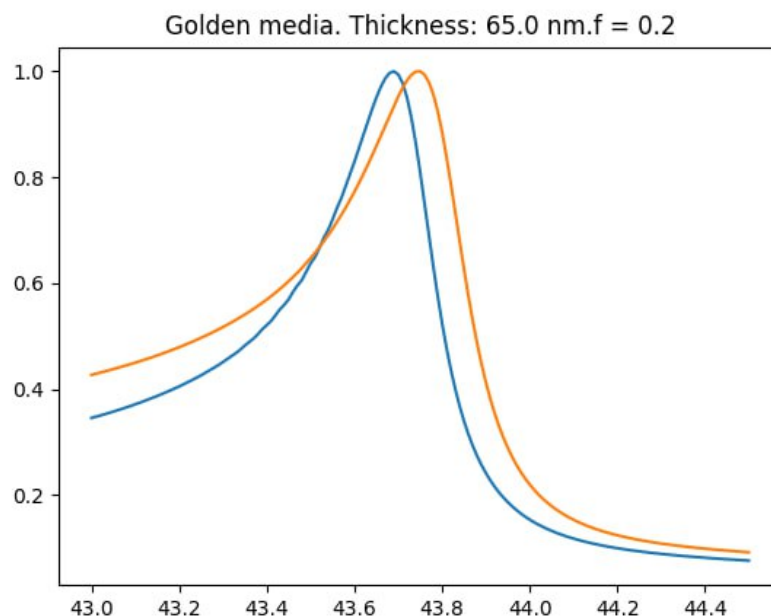


Рис. 4.1. Коефіцієнт поглинання плівки для однорідного розподілу включень водню. Синя крива – без водню; помаранчева крива – концентрація водню 20%

Було проаналізовано залежність кривої поглинання в випадку лінійного розподілу від концентрації. Основні закономірності щодо зсувів виявилися такими ж, що й в однорідному випадку. На Рис. 4.2 побудовано криві для коефіцієнту поглинання золотої плівки без вмісту водню і з концентрацією водню 20% і 30% (водень розподілений в плівці лінійно – максимальна концентрація на поверхні скло-золото). Бачимо, що максимум коефіцієнту поглинання золотої плівки послідовно зсувається в бік більших кутів для синьої кривої - на 0.11° , для червоної кривої – на 0.16° , що відповідає якісному характеру даних отриманих на експерименті.

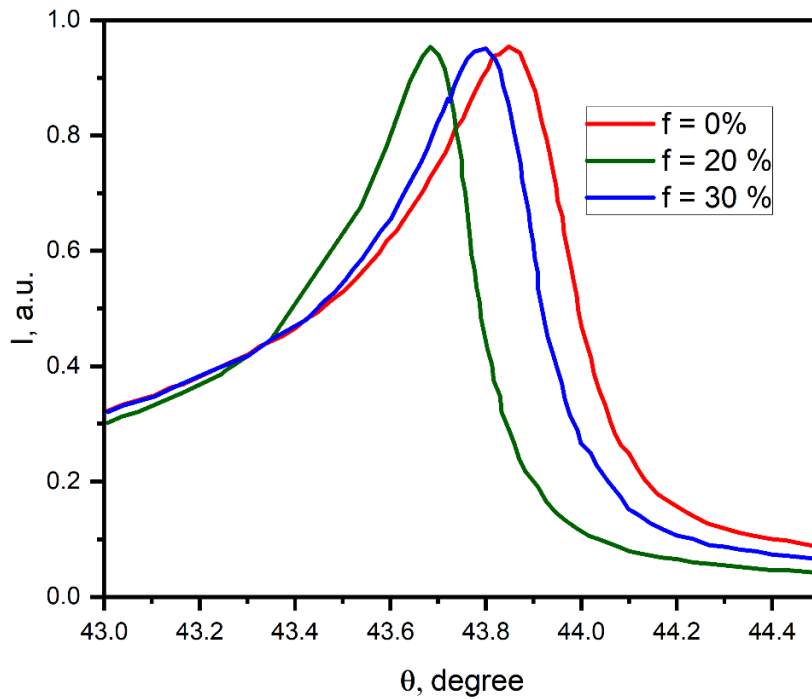


Рис 4.2. Коефіцієнт поглинання плівки для лінійного розподілу включень водню. Зелена крива – без водню; синя крива – концентрація водню 20%; червона крива – концентрація водню 30%

Окремо було проаналізовано вплив розподілу порожнин на криву ППР. Результати представлено на Рис. 4.3.

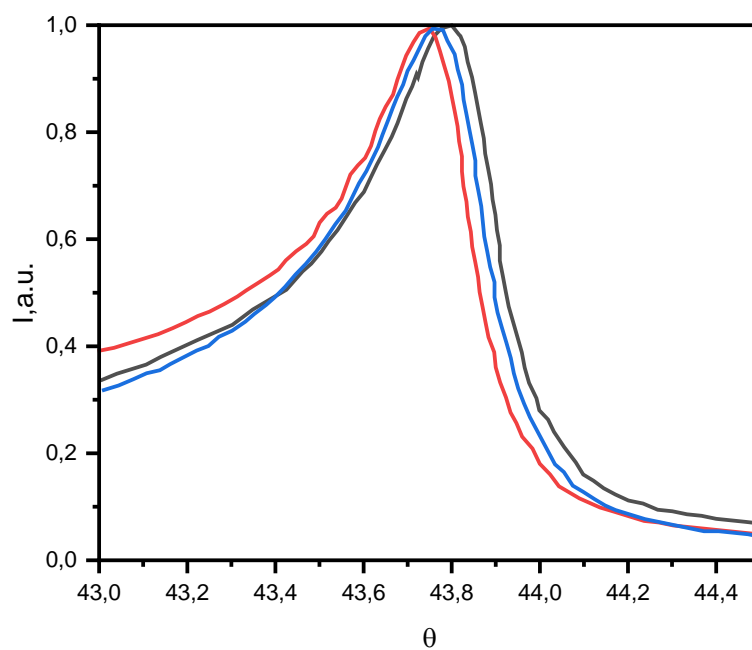


Рис. 4.3. Криві поглинання для різних розподілів порожнин всередині плівки за осередненої концентрації 20%. Червона крива відповідає однорідному розподілу порожнин, блакитна крива відповідає лінійному розподілу і брунатна – квадратичному

З кривих Рис. 4.3 можна зробити висновок, що чим більше порожнин в приповерхневих шарах за незмінної середньої концентрації, то більшим є зсув кривих.

5 Висновки

У дипломній роботі були отримані наступні результати:

- на основі концепції ефективної сприйнятливості було запропоновано модель тонкої золотої плівки з приповерхневим моношаром з порожнинами, заповнених воднем;
- за допомогою осереднення положення порожнини в моношарі отримано ефективну сприйнятливість металевої плівки з приповерхневим наноструктурованим моношаром;
- знайдено співвідношення для ефективної сприйнятливості плівки з порожнинами розподіленими в об'ємі, що враховує розміри і форму порожнин;
- прораховано оптичний відгук золотої плівки, обробленої воднем, за припущення, що водень неоднорідним чином заповнює плівку, зокрема, розглянуто спадаючу від поверхні концентрації порожнин;
- на основі співставлення чисельних даних з експериментальними результатами встановлено, що водень який захоплено золотою плівкою, є причиною зсуву резонансних кривих поглинання;
- в результаті модельних розрахунків виявлено, що зсув резонансних кривих суттєво залежить від характеру розподілу порожнин в плівці. Що більшою є концентрація порожнин поблизу поверхні золото-повітря, то значнішим є зсув кривої;

На жаль, не вдалося проаналізувати детальніше вплив розмірів і форми порожнин через повільну збіжність інтегралів. Ці питання залишаються для майбутніх досліджень.

6 Використана література

1. Kentaro Takagi, Selvakumar V. Nair, Ryosuke Watanabe, Keisuke Seto, Takayoshi Kobayashi , and Eiji Tokunaga. “Surface Plasmon Polariton Resonance of Gold, Silver, and Copper Studied in the Kretschmann Geometry: Dependence on Wavelength, Angle of Incidence, and Film Thickness”. *Journal of the Physical Society of Japan* 86, 124721 (2017)
2. Alefeld and J. Volkl. *Hydrogen in Metals. I* 29, Series Topics in Applied Physics, Berlin, 1978
3. A. G. Vasiljev, T. A. Vasyliiev, T. P. Doroshenko. Hydrogen Treatment of Plasmon Resonance Sensor. *JNEP*, vol. 12 (6), pp. 06011-1 - 06011-6, (2020).
4. V. Markel. Introduction to the Maxwell Garnett approximation: tutorial. *JOSA A*, vol. 33 (7), pp.1244-1256, (2016).
5. W. Theiß. The use of effective medium theories in optical spectroscopy. *Advances in Solid State Physics*, 33, Springer, Berlin, Heidelberg, pp. 149-176, (1994).
6. Vasiliev A., Vasyliiev T., Doroshenko T. Influence of hydrogen ions on the properties of the plasmon resonance sensor/ 2021 IEEE 16th International Conference on the Experience of Designing and Application of CAD Systems, CADSM 2021 - Proceedings, 2021, стр. 21–24, 9385237
7. Vasiliev A., Vasyliiev T., Doroshenko T. Influence of hydrogen ions on the properties of the plasmon resonance sensor/ 2021 IEEE 16th International Conference on the Experience of Designing and Application of CAD Systems, CADSM 2021 - Proceedings, 2021, стр. 21–24, 9385237
8. Lozovski V. The effective susceptibility concept in the electrodynamics of nano-systems. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*. 2010 Oct 1;7(10):2077-93.
9. M. Born, E. Wolf. *Principles of optics*. Cambridge university press, 2019. P. 58-64.

10. Vasiljev, A. G., T. A. Vasyliiev, R. O. Zhelezniak, and T. P. Doroshenko. "Hydrogen Treatment of SPR Film Sensors: Experiments and Theoretical Modeling." (2021).
11. Vasiljev, A. G., T. A. Vasyliiev, R. O. Zhelezniak, V. V. Kryvytskyi, and T. P. Doroshenko. "Hydrogen Treatment of Surface Layer of a Gold Film on Glass." (2023).
12. Третяк О. В., Лозовський В. З. Фізика низьковимірних систем: навч. посіб., 2013 – 372 с
13. K Saeed, Rostam. "Solution of a System of Linear Fredholm Integral Equations of the Second Kind by Iteration Methods." *Kirkuk University Journal-Scientific Studies* 2.1 (2007): 57-68.
14. Pastore, Pietro. "The numerical treatment of Love's integral equation having very small parameter." *Journal of Computational and Applied Mathematics* 236, no. 6 (2011): 1267-1281.
15. Lozovski V. Susceptibilities of nano-particles at the surface of a solid. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2001 Apr 1;9(4):642-51.
16. Lozovski, Valeri, Taras Vasyliiev, and Georgiy Tarasov. "Structure Optimization of Layered Plasmonic Nanocomposite Thin Film." In *2021 IEEE 16th International Conference on the Experience of Designing and Application of CAD Systems (CADSM)*, pp. 10-13.