

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего  
образования «Московский физико-технический институт  
(национальный исследовательский университет)»  
Кафедра электродинамики сложных систем и нанофотоники

*На правах рукописи*

Пузько Роман Сергеевич

**Исследование распространения, рассеяния и  
андерсоновской локализации света в слоистых  
структурах.**

Специальность 01.04.05 - Оптика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
доктор физико-математических наук,  
Мерзликин Александр Михайлович

Москва 2020

Работа прошла апробацию на кафедре электродинамики сложных систем и нанофотоники федерального автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,  
Мерзликин Александр Михайлович

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт спектроскопии Российской академии наук»

Защита состоится «24» декабря 2020 г. в 12:00 на заседании диссертационного совета ЛФИ.01.04.05.005 по адресу: 141701, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, д. 9.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Московского физико-технического института (национального исследовательского университета): <https://mipt.ru/education/post-graduate/soiskateli-fizikomatematicheskie-nauki.php>.

Работа представлена «15» октября 2020 г. в Аттестационную комиссию федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)» для рассмотрения советом по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, доктора наук в соответствии с п.3.1 ст. 4 Федерального закона «О науке и государственной научно-технической политике».

## **Общая характеристика работы**

### **Актуальность и степень разработанности темы исследования.**

Взаимодействие света с периодическими и неупорядоченными микро- и наноструктурами представляет интерес как с точки зрения прикладных исследований, так и с точки зрения фундаментальной науки. С одной стороны современное развитие технологической базы позволяет изготавливать структуры, характерные размеры которых порядка или даже меньше длины волны. Стремительный технологический прогресс открывает новые возможности для создания композитных материалов с уникальными оптическими свойствами. С другой стороны в результате свойственной технологическому процессу неточности в изготавливаемых структурах присутствуют случайные дефекты (неоднородности материалов, шероховатости поверхности и др.), приводящие к рассеянию и локализации излучения.

Интерес к исследованию распространения света в периодических микро- и наноструктурах обусловлен возможностью управления когерентным распространением излучения (величиной групповой скорости, частотной дисперсией, направлением распространения света и т.д.). Специфический дизайн периода определяет форму зонной структуры для электромагнитных блоховских волн в соответствующем бесконечном фотонном кристалле. При этом распространяющиеся в периодических структурах электромагнитные волны вследствие отражения/рассеяния на элементах периода остаются когерентными (в отсутствии случайных дефектов).

Характер распространения света в неоднородных неупорядоченных структурах зависит от соотношения между расстоянием, проходимым волной от когерентного источника, и длиной свободного пробега (определяемой рассеянием) [1]. В частности, можно выделить три режима распространения. Если расстояние, проходимое излучением в структуре, мало по сравнению с длиной свободного пробега, то главную роль играют пространственно когерентные эффекты, поскольку излучение остается преимущественно когерентным. С увеличением пройденного расстояния часть излучения становится

пространственно некогерентной, поскольку рассеянное излучение приобретает дополнительный случайный фазовый сдвиг относительно когерентной части излучения. При этом когерентная часть излучения уменьшается с распространением волны. Дальнейшее увеличение расстояния, проходимого светом в неупорядоченных слоистых структурах, приводит к андерсоновской локализации света [2].

В данной работе последовательно изучены три режима распространения света в слоистых структурах: когерентное распространение в периодических и неупорядоченных структурах, рассеяние на неоднородностях и андерсоновская локализация света.

Численное моделирование когерентного распространения света в композитных материалах даже на самых современных суперкомпьютерах быстро сталкивается с недостатком вычислительных мощностей. Для преодоления этой проблемы, как правило, используют эффективные параметры, характеризующие оптические свойства макроскопически однородного композитного материала. При этом образец из композитного материала заменяется однородным образцом с такими эффективными оптическими параметрами, что распределение электромагнитного поля вокруг однородного образца максимально близко (или совпадает) с распределением поля вокруг исходного неоднородного. Такая процедура замены называется гомогенизацией уравнений Максвелла и широко исследуется в литературе. Однако корректная процедура гомогенизации разработана только для магнито- и электростатики. Имеющиеся подходы к гомогенизации в электродинамике имеют ограниченную применимость и, зачастую, приводят к нефизическим результатам [3]. Для создания теории гомогенизации в электродинамике необходимо установить: какие эффективные параметры необходимо использовать, и каким образом эти параметры должны вводиться?

Несмотря на то, что за пределами статического приближения нельзя корректно ввести эффективные диэлектрические и магнитные проницаемости, в длинноволновом пределе удастся ввести эффективный показатель

преломления [3]. Расчеты показывают, что в длинноволновом приближении эффективный волновой вектор с увеличением размера структуры стремится к волновому вектору блоховской волны в периодической среде. Однако остается вопрос о самоусреднении эффективного волнового вектора за пределами длинноволнового приближения.

Микроструктура слоистых оптических покрытий (размер кристаллитов, наличие шероховатостей поверхности и объемных включений и т.д.) во многом обуславливает их оптические свойства. Поэтому оптические параметры покрытий, изготавливаемых в конкретном технологическом процессе, необходимо восстанавливать по данным измерений [4].

Методы восстановления оптических параметров слоистых покрытий основаны на анализе спектров отражения и/или прохождения и разделяются на нерезонансные и резонансные методы. Нерезонансные методы, такие как эллипсометрия [5], дают большие ошибки в определении показателя преломления для тонких (по сравнению с длиной волны в материале) пленок. Однако точность восстановления параметров можно значительно увеличить путем измерения резонансных спектров отражения и/или прохождения [7]. Поэтому разработка резонансных методов имеет большое значение для прикладных исследований слоистых покрытий.

Рассеяние на неоднородностях, присутствующих в слоистой структуре, приводит к ослаблению интенсивности когерентного излучения и, таким образом, оказывает влияние на восстановление оптических параметров. В литературе исследуются задачи рассеяния света на шероховатостях границы полупространства [8,9] или на неоднородностях слоистых структур [10,11]. В последнем случае на рассеяние света оказывают влияние резонансные моды структуры. Экспериментальные исследования спектров рассеяния на шероховатостях поверхности [12] показали наличие эффекта резонансного рассеяния в слоистой структуре с волноводными модами. Однако этот эффект изучен недостаточно, в частности, отсутствует теоретическое описание резонансного рассеяния в слоистых структурах.

Наконец, распространение света в протяженных неупорядоченных слоистых структурах вызывает огромный интерес для теории андерсоновской локализации. Существенной особенностью андерсоновской локализации является наличие масштаба локализации – длины локализации. Другими словами, распространение излучения в неоднородных структурах характеризуется самоусредняющимся параметром (обратной длиной локализации – индексом Ляпунова). Несмотря на то, что явление андерсоновской локализации было открыто более полувека назад, до сих пор существуют лишь феноменологические подходы к описанию этого явления (скейлинговый подход [13], метод случайных Т-матриц [14] и др.). По существу, ни один из них не объясняет механизма локализации, не обладает физической ясностью и не может объяснить все эффекты, связанные с андерсоновской локализацией. Однако установлен ряд значимых результатов для одномерной задачи. Доказана формальная математическая теорема (теорема Фурстенберга [15]), устанавливающая необходимые условия для наблюдения андерсоновской локализации в марковских процессах. Кроме того, в работе [16] показано, что андерсоновская локализация в неупорядоченных структурах объясняется случайным формированием особых кусочков структуры (брэгговских отражателей), эффективно отражающих распространяющееся излучение. В связи с этим возникает вопрос о том, может ли распространение света в системе со случайными брегговскими отражателями описываться с помощью самоусредняющегося параметра. При этом отдельного внимания заслуживает вопрос о возможной связи между таким параметром и длиной локализации.

### **Цели и задачи.**

Целью данной работы является последовательное описание распространения, рассеяния и андерсоновской локализации света в слоистых структурах. Для этого решались следующие задачи:

1. Поиск самоусредняющегося эффективного параметра, описывающего распространение излучения через периодические слоистые структуры. В

частности, исследовалось самоусреднение эффективного волнового вектора при различных соотношениях длины волны и толщины слоев структуры.

2. Разработка методов восстановления эффективных параметров тонких пленок на основе спектров отражения/прохождения.

3. Изучение влияния собственных мод диэлектрических структур на рассеяние света неоднородностями.

4. Поиск самоусредняющегося эффективного параметра для неупорядоченной слоистой структуры. Выяснение физического смысла самоусредняющегося эффективного параметра, установление связи эффективного параметра с длиной локализации.

### **Научная новизна.**

Впервые показано наличие самоусредняющегося эффективного параметра слоистой структуры (как периодической, так и неупорядоченной) – эффективного волнового вектора за пределами длинноволнового приближения. Использование данного параметра позволяет рассматривать в рамках единого подхода распространение и андерсоновскую локализацию света в слоистых структурах.

Впервые предложен резонансный метод определения диэлектрической проницаемости тонких металлических пленок на основе эллипсометрических измерений в конфигурации Отто.

Впервые исследовано влияние излучательных мод диэлектрической пленки на величину коэффициента рассеяния и индикатрису рассеяния. Построена модель рассеяния в неоднородных диэлектрических пленках.

### **Теоретическая и практическая значимость работы.**

1. В работе впервые показано существование самоусредняющегося эффективного параметра, что является важным шагом к построению теории гомогенизации в электродинамике. Более того, открывается возможность построения единого подхода к описанию распространения и андерсоновской локализации электромагнитных волн.

2. Предложена перспективная методика восстановления оптических свойств тонких плазмонных пленок. Продемонстрировано, что использование

эллипсометрических измерений в конфигурации Отто позволяет однозначно определить толщину и комплексную диэлектрическую проницаемость тонкой плазмонной пленки в отличие от метода эллипсометрии. Высокая чувствительность эллипсометрических углов  $\Psi$  и  $\Delta$  к параметрам пленки позволяет избавиться от дополнительных предположений о диэлектрической проницаемости (использования специальной модели дисперсии, соотношений Крамерса - Кронига).

3. Показано, что моды слоистых структур значительно влияют на рассеяние волны в пленке. Компьютерное моделирование показывает существование углов падения лазерного луча, когда рассеивание и поглощение увеличиваются одновременно при возбуждении мод структуры. Обнаруженный эффект позволяет управлять рассеянием и отражением от диэлектрических пленок, может использоваться для оптической диагностики покрытий.

#### **Методология и методы исследования.**

Исследования проводились с помощью аналитического и численного подходов к решению уравнений Максвелла в слоистых системах. В частности, был широко использован метод матриц переноса (Т-матриц) для определения коэффициентов отражения и прохождения слоистых систем, распределения электромагнитных полей внутри рассмотренных систем. Метод Т-матриц позволяет точно решать уравнения Максвелла в случае слоистых структур. Точность численных расчетов методом Т-матриц проверялась с помощью инвариантов Т-матриц, библиотек повышенной точности.

#### **Положения, выносимые на защиту.**

1. В одномерной задаче эффективный показатель преломления самоусредняется не только в длинноволновом пределе, но и при длине волны порядка/значительно меньше размера неоднородности.

2. Мнимая часть волнового вектора соответствует обратной длине локализации, а производная от действительной части соответствует плотности состояний.



3. Для эффективного волнового вектора выполняется соотношение вида Крамерса-Кронига. Постоянные в этих соотношениях являются высокочастотными пределами усредненного по образцу показателя преломления.

4. Предложена методика эллипсометрии в конфигурации Отто, позволяющая значительно повысить точность эллипсометрии при восстановлении оптических параметров тонких металлических пленок. Представленная методика восстановления оптических параметров позволяет восстанавливать оптические параметры без использования дополнительных предположений (выбора модели дисперсии диэлектрической проницаемости и т.д.).

5. Показано, что рассеяние и поглощение в диэлектрической пленке возрастают одновременно и достигают максимума при углах падения света, соответствующих возбуждению излучательных мод пленки. Энергия рассеянного излучения высвечивается в направления, соответствующие излучательным модам пленки.

#### **Степень достоверности и апробация результатов.**

Материалы работы были представлены на конференциях:

1. А.М. Мерзликин, А.П. Виноградов, Р.С. Пузько: Самоусреднение показателя преломления, 13-я ежегодная конференция ИТПЭ РАН, Москва, 14-16 мая 2012 г.

2. Р.С. Пузько, А.М. Мерзликин: Самоусреднение показателя преломления, 56-я научная конференция МФТИ, Москва-Долгопрудный-Жуковский, 25-30 ноября 2013 г.

3. Р.С. Пузько, А.М. Мерзликин: Осаждение наночастиц в поле поверхностного плазмона, 15-я ежегодная конференция ИТПЭ РАН, Москва, 12-15 мая 2014 г.

4. Р.С. Пузько, А.М. Мерзликин: Соотношения вида Крамерса-Кронига для эффективного волнового вектора слоистой системы, 57-я научная конференция МФТИ, Москва-Долгопрудный-Жуковский, 24-29 ноября 2014 г.

5. Р.С. Пузько, А.М. Мерзликин: Особенности некогерентного рассеяния на случайных неоднородностях в диэлектрическом слое, 58-я научная конференция МФТИ, Москва-Долгопрудный-Жуковский, 23-28 ноября 2015 г.

6. Р.С. Пузько, А.М. Мерзликин: Самоусреднение эффективного показателя преломления, ВНИИА-2016, Москва, 2016 г.
7. A.M. Merzlikin, R.S. Puzko: Self-averaging of effective refractive index in layered system, Days on Diffraction 2016, St. Petersburg, June 27- July 1, 2016.
8. Р.С. Пузько, А.М. Мерзликин: Самоусреднение эффективных параметров в слоистой системе, 59-я научная конференция МФТИ, Москва-Долгопрудный-Жуковский, 21-26 ноября 2016 г.
9. Р.С. Пузько, А.М. Мерзликин: Особенности некогерентного рассеяния электромагнитной волны на включениях в слоистой системе, ВНИИА-2017, Москва, 2017 г.
10. Р.С. Пузько и др.: Особенности некогерентного рассеяния электромагнитной волны на неоднородностях слоистой системы, 18-я ежегодная конференция ИТПЭ РАН, Москва, 15-19 мая 2017 г.
11. Р.С. Пузько, А.М. Мерзликин: Самоусреднение эффективных параметров в слоистой системе, 18-я ежегодная конференция ИТПЭ РАН, Москва, 15-19 мая 2017 г.
12. R. Puzko, A. Merzlikin: Self-averaging of the effective refractive index and Anderson localization of light, METAMATERIALS'2017, Marseille, Aug 28- 2 Sept, 2017.
13. Р.С. Пузько: Особенности некогерентного рассеяния на случайных неоднородностях в слоистой системе, 60-я научная конференция МФТИ, Москва-Долгопрудный-Жуковский, 20-26 ноября 2017 г.
14. Р.С. Пузько, А.М. Мерзликин: Особенности некогерентного рассеяния электромагнитной волны на случайных неоднородностях слоистой системы, ВНИИА-2018, Москва, 2018 г.
15. Р.С. Пузько, А.М. Мерзликин: Отто-эллипсометрия тонких металлических пленок, 61-я научная конференция МФТИ, Москва-Долгопрудный-Жуковский, 19-25 ноября 2018 г.
16. Р.С. Пузько, А.М. Мерзликин: Отто-эллипсометрия тонких металлических пленок, ВНИИА-2019, Москва, 2019 г.

17. R.S. Puzko, et al.: Modification of Incoherent Scattering from the Metafilm under the Influence of System Eigenmodes, ICMAT 2019, Singapore, 23-28 June 2019.

## Основное содержание

**Глава 1.** Первая глава посвящена распространению электромагнитной волны через периодические слоистые структуры. Проведен обзор методов гомогенизации, используемых для описания периодических систем. На данный момент за пределами статистики отсутствует единая теория гомогенизации, а имеющиеся подходы приводят к противоречивым результатам. Численные расчеты [17] показали, что для слоистой системы даже в длинноволновом приближении некорректно вводить эффективные диэлектрическую и магнитную проницаемости. Однако в длинноволновом приближении корректно введение эффективного показателя преломления (эффективного волнового вектора). В первой главе исследован вопрос о самоусреднении эффективного волнового вектора для периодической структуры в широком диапазоне длин волн.

Рассмотрена периодическая структура, состоящая из конечного числа слоев. Основываясь на коэффициенте прохождения  $t$ , можно ввести эффективный волновой вектор. При больших толщинах системы  $L$  эффективный волновой вектор, описывающий прохождение волны через толщину образца, можно определить как  $k_{eff} = -i \operatorname{Im}(\ln t)/L$ .

Известно, что в бесконечной периодической среде из чередующихся слоев волновой вектор блоховской волны  $k_{Bl}^{Ryt}$  описывается уравнением Рытова. Результаты численного эксперимента, представленные в работе, показывают стремление  $k_{eff}$  к волновому вектору Рытова  $k_{Bl}^{Ryt}$  даже в высокочастотном случае.

Проведены исследования аналитических свойств эффективного волнового вектора. В рамках метода матриц переноса (Т-матриц) показано, что коэффициент прохождения слоистой системы является аналитической функцией частоты, поскольку является аналитической функцией элементов Т-матриц отдельных

слоев. Используемое определение эффективного волнового вектора позволяет связать его производную с коэффициентом прохождения

$$\frac{\partial k_{eff}}{\partial \omega}(\omega_0) = -i \frac{1}{L} \frac{\partial}{\partial \omega} \ln(t) = -i \frac{1}{L} \frac{1}{t} \frac{\partial t}{\partial \omega}, \quad (1)$$

где  $L$  - длина системы. Будучи аналитической функцией частоты, производная эффективного волнового вектора (1) удовлетворяет соотношениям Крамерса-Кронига. Численные расчеты соотношений Крамерса-Кронига подтвердили аналитические свойства эффективного волнового вектора.

Соотношения Крамерса-Кронига получены на основе рассуждений об аналитических свойствах волнового вектора и проверены в численном эксперименте. Однако в случае эквиимпедансной структуры данные соотношения могут быть получены аналитически.

Рассмотрена эквиимпедансная структура с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon(\omega, x)$  и магнитной проницаемостью  $\mu(\omega, x)$ , которые удовлетворяют соотношениям  $\varepsilon(\omega, x) = \alpha \mu(\omega, x)$  в любой точке системы ( $\alpha$  не зависит от координаты и частоты). Простой расчет показывает, что в такой структуре отсутствует отражение между слоями для падающей по нормали волны. При этом фаза коэффициента прохождения слоистой структуры равна сумме оптических толщин слоев, составляющих структуру. Исходя из этого, получено явное аналитическое выражение для эффективного волнового вектора в случае эквиимпедансной структуры. Приведенные аналитические расчеты полезны тем, что позволяют явно получить постоянные величины, фигурирующие в соотношениях Крамерса-Кронига для эффективного волнового вектора.

Расчеты для эквиимпедансной структуры приводят к соотношениям следующего вида

$$\frac{\partial k'_{eff}(\omega)}{\partial \omega} = C_{Re} + \frac{1}{\pi} v.p. \int \frac{1}{\tilde{\omega} - \omega} \left[ \frac{\partial k''_{eff}}{\partial \tilde{\omega}}(\tilde{\omega}) \right] d\tilde{\omega}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial k''_{eff}(\omega)}{\partial \omega} = C_{Im} - \frac{1}{\pi} v.p. \int \frac{1}{\tilde{\omega} - \omega} \left[ \frac{\partial k'_{eff}}{\partial \tilde{\omega}}(\tilde{\omega}) \right] d\tilde{\omega}, \quad (3)$$

где  $C_{\text{Re}} = \text{Re}\langle\sqrt{\varepsilon\mu}\rangle_{\omega\rightarrow\infty}$  и  $C_{\text{Im}} = \text{Im}\langle\sqrt{\varepsilon\mu}\rangle_{\omega\rightarrow\infty}$ . Т.е., постоянные коэффициенты в соотношениях Крамерса-Кронига возникают как высокочастотные пределы для функций от диэлектрической и магнитной проницаемостей слоев структуры.

**Глава 2.** Вторая глава посвящена исследованию неоднородных пленок с собственными модами. Наличие собственных мод в пленках приводит к концентрации падающего на пленку излучения внутри пленки. В результате этого эффективное расстояние, проходимое излучением, может значительно превышать толщину пленки. Наличие неоднородностей в таких пленках заметно влияет на рассеяние света. Рассмотрены два типа пленок: тонкие плазмонные пленки и диэлектрическая пленка, в которой возбуждаются моды Фабри-Перо резонатора.

Сначала рассмотрены тонкие плазмонные пленки. Оптические свойства металлических пленок толщиной менее 100 нм заметно отличаются для пленок, изготовленных в различных технологических процессах [4]. Плазмонная пленка, изготовленная с использованием специального технологического оборудования, подложек и режима осаждения, является уникальной и требует детальной характеристики.

Проведен краткий обзор методов восстановления оптических параметров пленочных покрытий по спектрам отражения/пропускания. Рассмотрены нерезонансные методы на примере эллипсометрии и резонансные методы на примере конфигурации Отто для наблюдения плазмона. Метод эллипсометрии, часто используемый для исследования диэлектрической проницаемости пленок, оказывается нечувствительным к параметрам тонких пленок: коэффициент отражения является плавной функцией параметров тонких пленок и демонстрирует низкую чувствительность к их изменению.

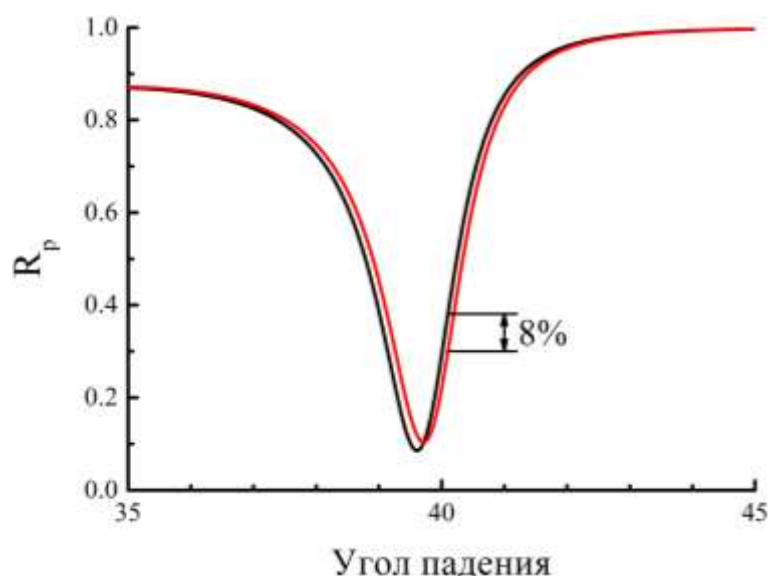


Рис. 1. Угловые зависимости коэффициента отражения

р-поляризованного света в конфигурации Отто. Черная кривая соответствуют 35-нм пленке серебра с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon = -18,998 + 0,149i$  (данные эллипсометрического метода), красная кривая - 37-нм пленки с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon = -18,295 + 0,481i$  [18]. Толщина слоя ПММА составляет 350 нм.

Низкая чувствительность метода эллипсометрии к параметрам тонкой металлической пленки продемонстрирована в работе на примере восстановления параметров тонкой серебряной пленки.

Для увеличения чувствительности предложено использовать резонансные зависимости коэффициентов отражения/пропускания. В качестве основы для резонансного метода восстановления параметров тонкой металлической пленки рассмотрена конфигурация Отто. Расчеты показывают, что метод обладает более высокой точностью восстановления параметров по сравнению с эллипсометрией. При некоторых углах отражения измеряемые коэффициенты отражения от двух пленок, не различимых методом эллипсометрии, отличаются более чем на 8% (см. Рис. 1). Даже небольшой сдвиг кривой отражения из-за изменения параметров пленки приводит к заметной разнице в наблюдаемых значениях. Кроме того, подобная резонансная зависимость существует и между эллипсометрическими углами, что позволяет восстанавливать диэлектрическую проницаемость на основе эллипсометрических измерений в конфигурации Отто.

В работе также приведены результаты исследований оптических свойств одинарных и бинарных пленок серебра или/и золота при измерениях в схеме Кретчмана для возбуждения поверхностного плазмона. Для определения эффективных параметров пленки решалась обратная задача восстановления параметров по спектрам отражения от пленок. Для этого минимизировалась невязка между экспериментальной и теоретической зависимостями коэффициента отражения. В качестве меры невязки была использована мера  $L_2$  между экспериментальной и теоретической зависимостями в диапазоне углов  $[\beta_{\min}; \beta_{\max}]$ , задаваемых геометрией эксперимента. Расчет теоретического коэффициента отражения производился с помощью метода Т-матриц.

Рассмотрено рассеяние электромагнитного излучения на включениях неоднородной пленки. Приведены результаты теоретического исследования рассеяния когерентного света внутри пленки диоксида церия ( $\text{CeO}_2$ ), помещенной на металлический слой. Пленки  $\text{CeO}_2$  могут быть получены методом электронно-лучевого осаждения в вакууме. Пленка  $\text{CeO}_2$  имеет фасеточную структуру [19], особенности которой существенно влияют на оптические свойства покрытия [20]. В частности, излучение рассеивается неоднородностях структуры. Неоднородная структура пленки  $\text{CeO}_2$  вкупе с большим для оптического материала показателем преломления делает пленки  $\text{CeO}_2$  прекрасными объектами для исследования рассеяния.

В работе рассеяние на неоднородностях пленки рассмотрено в дипольном приближении, т.е. полагается, что некогерентное рассеяние на неоднородностях можно рассматривать как излучением диполей, индуцированных на неоднородностях когерентным внешним полем. В расчетах предполагалось, что диполи, моделирующие неоднородности (флуктуации показателя преломления), равномерно распределены по объему пленки. Также не учитывались многократные процессы рассеяния, т.е. рассеяние рассмотрено в приближении однократного рассеяния. Это приближение справедливо, когда когерентная волна проходит расстояние в структуре меньше длины свободного пробега.

Сначала рассмотрена модельная система, в которой рассеяние незначительно, т.е. энергия рассеянного излучения при распространении в слое мало по сравнению с энергией когерентной волны. Показано, что на рассеяние света значительно влияют излучательные моды (ИМ) системы – моды Фабри-Перо резонатора. Возбуждение мод диэлектрического слоя при определенном угле падения приводит к концентрации излучения падающей волны внутри пленки, что значительно увеличивает как рассеяние, связанное с наличием неоднородностей, так и поглощение, обусловленное омическими потерями в металлическом слое структуры. Поэтому при определенных углах падения, наблюдаются одновременно как максимумы коэффициента рассеяния, так и максимумы коэффициента поглощения.

Затем рассмотрен случай сильного рассеяния, когда эффективно проходимое волной расстояние становится соизмеримым с длиной свободного пробега. В этом случае необходимо учитывать ослабление когерентного излучения за счет рассеяния на неоднородностях. С этой целью введено эффективное поглощение когерентного излучения в пленке  $\text{CeO}_2$  с помощью дополнительной мнимой части эффективного показателя преломления  $\text{CeO}_2$

$$n_{\text{CeO}_2}^{\text{eff}} = n_{\text{CeO}_2} + in_{sc}, \quad (4)$$

В первом порядке транспортного уравнения мнимая часть связана с имеющимися в среде центрами рассеяния как

$$n_{sc} = \frac{1}{2k_0} \sigma_{eff} N_{eff}, \quad (5)$$

где  $k_0$  - волновое число падающей волны в вакууме, а  $\sigma_{eff}$  и  $N_{eff}$  - эффективное сечение рассеяния и концентрация центров рассеяния в слое. При принятых приближениях задача рассеяния становится однопараметрической.

Характерные для случая сильного рассеяния угловые зависимости отражения, поглощения и рассеяния показаны на Рис. 2 для s-поляризованного света.



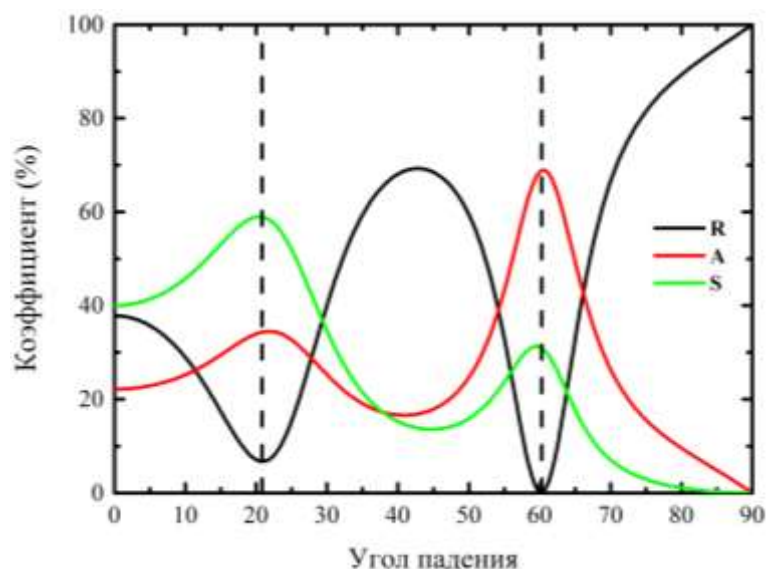


Рис. 2. Зависимости коэффициентов зеркального отражения (R), поглощения (A) и рассеяния (S) от угла падения s-поляризованного излучения. Параметры пленки  $\text{CeO}_2$ :  $d_{\text{CeO}_2} = 2100$  нм,  $n_{\text{CeO}_2} = 2,2 + 0.01i$ . Параметры слоя алюминия  $d_{\text{Al}} = 200$  нм,  $n_{\text{Al}} = 1.26 + 7.28i$ . Показатель преломления подложки  $n_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 1,70$ . Длина волны 632,8 нм. Вертикальные пунктирные линии показывают угол возбуждения мод слоя.

В той же модели рассмотрена индикатриса рассеяния. Оказывается, что излучение, рассеянное неоднородностями пленки, сосредоточено в определенных направлениях (см. Рис. 3). Данное явление также объясняется возбуждением излучательных мод слоя при рассеянии света. В результате на индикатрисе рассеяния появляются гало, соответствующие модам пленки.

Таким образом, излучательные моды проявляются не только в коэффициенте рассеянии, но и влияют на вид индикатриссы рассеяния.

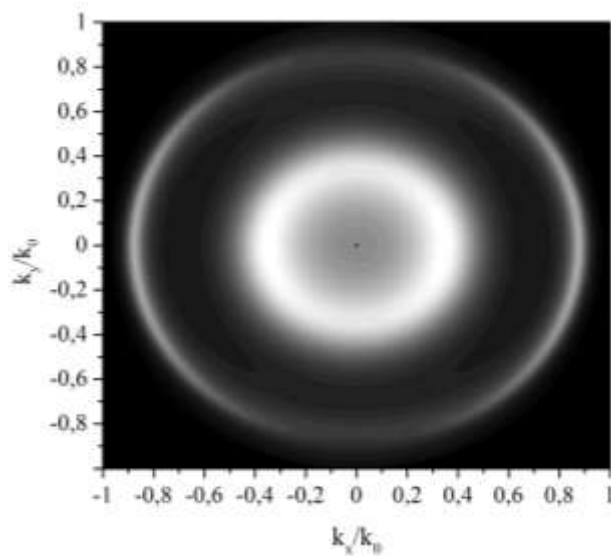


Рис. 3 Интенсивность рассеянного излучения в воздухе на большом удалении от пленки  $\text{CeO}_2/\text{Al}$ . На осях отмечены проекции волнового вектора рассеянной волны. Параметры системы такие же, как на Рис. 2. Длина волны 632,8 нм.

Падающая по нормали волна линейно поляризована

**Глава 3.** В третьей главе рассмотрено самоусреднение эффективного волнового вектора для многослойной неупорядоченной структуры. Приведен краткий обзор работ по локализации света в неупорядоченных слоистых структурах. Стоит отметить, что индекс Ляпунова, описывающий пространственный масштаб локализации излучения, является самоусредняющейся величиной.

Исследовано распространение волны при падении по нормали на слоистую неупорядоченную структуру. Как и для периодических слоистых структур предложено вводить эффективный волновой вектор  $k_{eff}$  с помощью коэффициента прохождения  $t$  структуры длиной  $L$ :  $k_{eff} = -i \text{Im}(\ln t)/L$ .

Мнимая часть введенного эффективного волнового вектора совпадает с обратной длиной локализации - индексом Ляпунова – при увеличении длины структуры. Таким образом, эта величина самоусредняется, а ее распределение является асимптотически гауссовым (см. Рис. 4). Рассмотрен вопрос о самоусреднении действительной части эффективного волнового вектора. Проведенные численные расчеты показывают, что и действительная часть эффективного волнового вектора самоусредняется (см. Рис. 5).

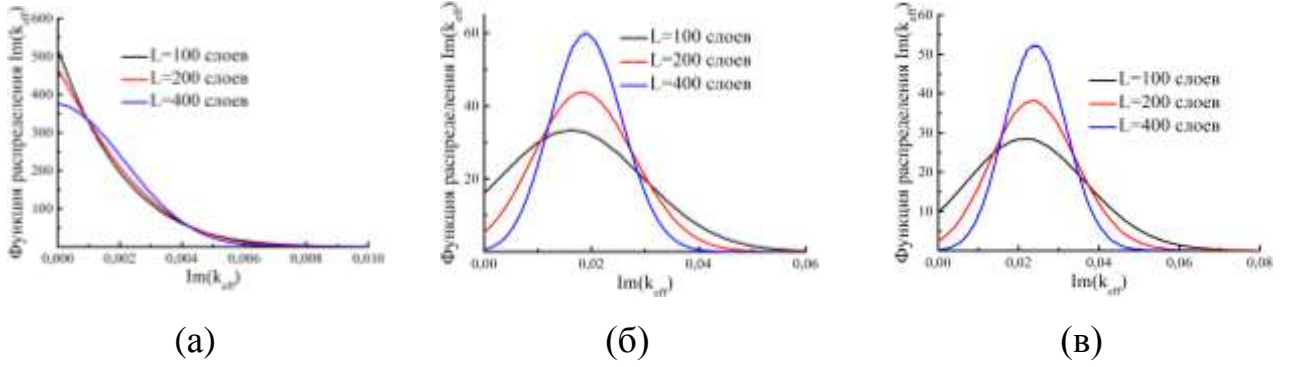


Рис. 4. Распределение  $\text{Im}(k_{eff})$  для неупорядоченной структуры, составленной из 100 (черный), 200 (красный) и 400 (синий) слоев. Диэлектрическая проницаемость слоев  $\varepsilon$  равномерно распределена в интервале  $[1; 11]$ , а диэлектрическая проницаемость внешней среды составляет  $\langle \varepsilon \rangle$ . Толщина каждого слоя (а)  $k_0 d = 0.1$ ; (б)  $k_0 d = 1.0$ ; (в)  $k_0 d = 10.0$ . В вычислениях использовался ансамбль, состоящий из  $10^7$  реализаций.

Для обоснования процесса самоусреднения эффективного волнового вектора рассмотрен коэффициент отражения многослойной структуры, которую можно разделить на многослойные подсистемы. Коэффициент прохождения всей структуры можно приближенно оценить как произведение коэффициентов прохождения подсистем. С помощью данного рассуждения и центральной предельной теоремы качественно показано самоусреднение эффективного волнового вектора. При этом дисперсия эффективного волнового вектора убывает с ростом числа слоев  $N$  как  $\sigma \sim 1/\sqrt{N}$ . Характер данной зависимости подтвержден численными расчетами.

Проведено сравнение введенного эффективного волнового вектора  $k_{eff}$  с определением  $k_B$ , представленным в работе [16]. Эффективный волновой вектор  $k_B$  представляет собой блоховский вектор для периодической среды, элементарная ячейка которой является рассматриваемой неупорядоченной структурой. Как показано в [16] с ростом числа слоев неупорядоченной структуры  $k_B$  почти для любой частоты приобретает мнимую часть, что связано с зонной природой локализации света в неупорядоченных структурах. Внутри запрещенных зон мнимые части  $k_{eff}$  и  $k_B$  сходятся к одной и той же величине –

индексу Ляпунова. При этом с ростом длины структуры сходимость наблюдается почти для всех частот. Расчеты показывают, что сходимость наблюдается и для действительных частей эффективных волновых векторов. Таким образом, имеется соответствие между эффективными волновыми векторами определенными в данной работе и в [16].

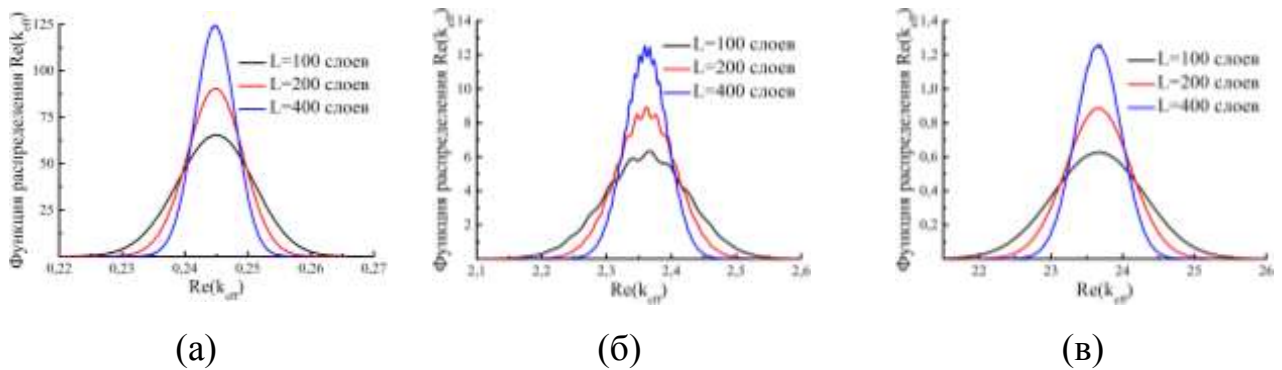


Рис. 5. Распределение  $\text{Re}(k_{eff})$  для случайной структуры, составленной из 100 (черный), 200 (красный) и 400 (синий) слоев. Параметры такие же, как и на Рис.

4. Толщина каждого слоя (а)  $k_0d = 0.1$ ; (б)  $k_0d = 1.0$ ; (в)  $k_0d = 10.0$ .

Рассмотрены также аналитические свойства эффективного волнового вектора. В первой главе показано, что производная эффективного волнового вектора для периодической системы обладает аналитическими свойствами. Поскольку данное утверждение основывается только на анализе коэффициента прохождения с помощью Т-матриц, соответствующие соотношения Крамерса-Кронига распространяются и на неупорядоченные структуры. С помощью (2) и (3) получено соотношение Герберта-Джонса-Таулесса [21,22]

$$\gamma(\omega) = \text{v.p.} \int_0^{+\infty} \left| 1 - \frac{\omega^2}{u^2} \right| \rho(u) du. \quad (6)$$

где  $\gamma(\omega) = \text{Im}(k_{eff}(\omega))$ , а  $\rho = \partial \text{Re}(k_{eff}(\omega)) / \partial \omega$ . Уравнение (6) связывает в теории твердого тела индекс Ляпунова (обратную длину локализации) и плотность состояний. Таким образом, производная от действительной части эффективного волнового вектора по частоте соответствует плотности состояний, что подтверждает физическую состоятельность вводимого эффективного параметра.

Кроме того исследован вопрос о рандомизации фазы в слоистой структуре. Эффективный волновой вектор самоусредняется с длиной структуры в соответствии с дисперсией  $D_k = \sigma_k^2 \sim 1/L$ . Однако дисперсия фазы волны увеличивается с длиной как  $L D_\phi = L^2 \sigma_k^2 \sim L$ . Таким образом, распределение фазы коэффициента прохождения имеет вид, схожий с распределением Гаусса, но с полушириной, увеличивающейся с длиной структуры. Это утверждение подтверждается расчетами (см. Рис. 6). Вместе с тем распределение фазы приведенной к интервалу  $[0, 2\pi]$  должно быть близко к равномерному для достаточно длинной структуры. Однако расчеты показывают, что даже при большой толщине структуры функция распределения неравномерная. Это связано с дополнительным корреляционным масштабом - шириной слоя (см. Рис. 6).

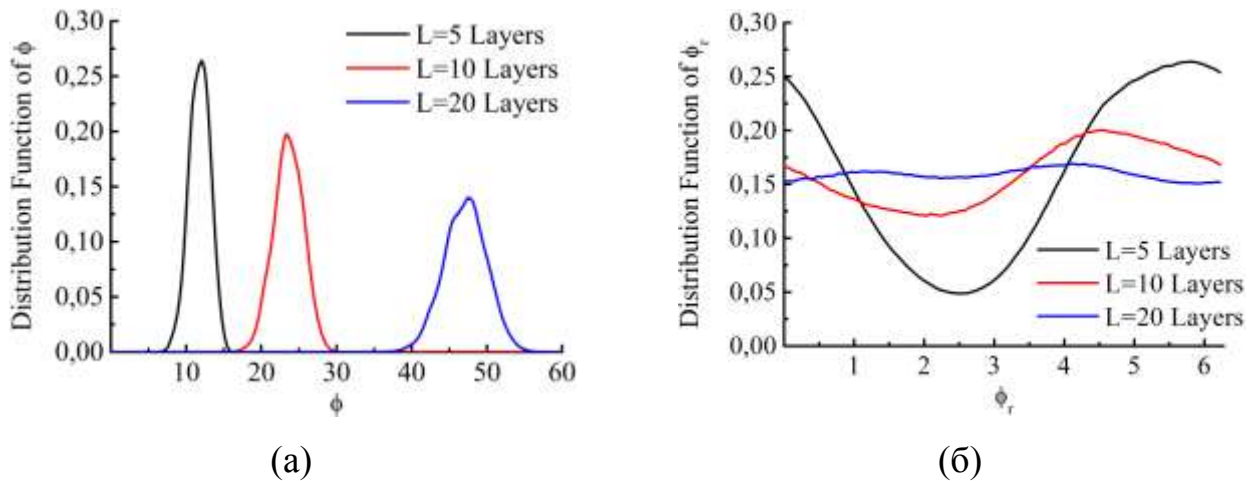


Рис. 6. Распределение (а) полной фазы  $\phi$  и (б) приведенной фазы  $\phi_r$  для неупорядоченной структуры, состоящей из 5 (черный), 10 (красный) и 20 (синий) слоев. Параметры структуры такие же, как и на Рис. 4.

### Список цитируемой литературы.

1. Sheng P. Introduction to Wave Scattering, Localization and Mesoscopic Phenomena / ed. Intergovernmental Panel on Climate Change. Cambridge: Springer, 2007. 333 p.
2. Anderson P.W. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices // Phys. Rev. 1958. Vol. 109, № 5. P. 1492–1505.
3. Виноградов А.П., Мерзликин А.М. Брэгговское отражение как механизм

- локализации света в одномерных системах // ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК. 2004. Vol. 398, № 1. P. 44–46.
4. Yang H.U. et al. Optical dielectric function of silver // *Phys. Rev. B*. 2015. Vol. 91, № 23. P. 235137.
  5. Fujiwara H. *Spectroscopic Ellipsometry: Principles and Applications*. John Wiley & Sons, 2007. 392 p.
  6. Baburin A.S. et al. Silver-based plasmonics: golden material platform and application challenges [Invited] // *Opt. Mater. Express*. 2019. Vol. 9, № 2. P. 611.
  7. Yankovskii G.M. et al. Structural and optical properties of single and bilayer silver and gold films // *Phys. Solid State*. 2016. Vol. 58, № 12. P. 2503–2510.
  8. Hetland Ø.S. et al. Numerical studies of the transmission of light through a two-dimensional randomly rough interface // *Phys. Rev. A*. 2017. Vol. 95, № 4. P. 043808.
  9. Sinha S.K. et al. X-ray and neutron scattering from rough surfaces // *Phys. Rev. B*. 1988. Vol. 38, № 4. P. 2297–2311.
  10. Déchamps N. et al. Fast numerical method for electromagnetic scattering by rough layered interfaces: Propagation-inside-layer expansion method // *J. Opt. Soc. Am. A*. 2006. Vol. 23, № 2. P. 359.
  11. Kawanishi T., Ogura H., Wang Z.L. Scattering of an electromagnetic wave from a planar waveguide structure with a slightly 2D random surface // *Waves in Random Media*. 1997. Vol. 7, № 1. P. 35–64.
  12. Ramírez-Duverger A. Light scattering from a multimode waveguide of planar metallic walls // *Opt. Commun.* 2003. Vol. 227, № 4–6. P. 227–235.
  13. Abrahams E. et al. Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions // *Phys. Rev. Lett.* 1979. Vol. 42, № 10. P. 673–676.
  14. Lambert C.J., Thorpe M.F. Random T-matrix approach to one-dimensional localization // *Phys. Rev. B*. 1983. Vol. 27, № 2. P. 715–726.
  15. Furstenberg H. Noncommuting Random Products // *Trans. Am. Math. Soc.* 1963. Vol. 108, № 3. P. 377.

16. Vinogradov A.P., Merzlikin A.M. Band theory of light localization in one-dimensional disordered systems // Phys. Rev. E. 2004. Vol. 70, № 2. P. 026610.
17. Виноградов А.П., Мерзликин А.М. К вопросу о гомогенизации одномерных систем // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. 2002. Vol. 121, № 3. P. 565–572.
18. Johnson P.B., Christy R.W. Optical Constants of the Noble Metals // Phys. Rev. B. 1972. Vol. 6, № 12. P. 4370–4379.
19. Kurochkin I. et al. New SERS-active junction based on cerium dioxide facet dielectric films for biosensing // Adv. Electromagn. 2014. Vol. 3, № 1. P. 57.
20. Khawaja E.E., Durrani S.M.A., Al-Kuhaili M.F. Determination of average refractive index of thin CeO<sub>2</sub> films with large inhomogeneities // J. Phys. D: Appl. Phys. 2003. Vol. 36, № 5. P. 545–551.
21. Thouless D.J. A relation between the density of states and range of localization for one dimensional random systems // J. Phys. C Solid State Phys. 1972. Vol. 5, № 1. P. 77–81.
22. Herbert D.C., Jones R. Localized states in disordered systems // J. Phys. C Solid State Phys. 1971. Vol. 4, № 10. P. 1145–1161.

### **Список работ, опубликованных автором по теме диссертации.**

1. Пузько Р. С., Мерзликин А. М. К вопросу об аналитичности эффективного показателя преломления //Радиотехника и электроника. – 2016. – Т. 61. – №. 12. – С. 1190-1195
2. Puzko R. S., Merzlikin A. M. Analytical properties of the effective refractive index //Optics Communications. – 2017. – Т. 383. – С. 323-329
3. Yankovskii G. M., Komarov A. V., Puz'ko R. S., Baryshev A. V., Afanas'ev K. N., Boginskaya I. A., Bykov I. V., Merzlikin A. M., Rodionov I. A., Ryzhikov I. A. Structural and optical properties of single and bilayer silver and gold films// Physics of the Solid State. – 2016. – Т. 58. – №. 12. – С. 2503-2510
4. Puzko R. S., Kozlov D. N., Fabelinsky V. I., Polivanov Y. N., Smirnov V. V., Sarychev A. K., Ryzhikov I. A., Bandarenka H. V., Merzlikin A. M. Incoherent scattering from dielectric metasurfaces under the influence of electromagnetic eigenmodes //Optics express. – 2019. – Т. 27. – №. 15. – С. 21701-21716.
5. Puzko R. S., Ivanov A. I., Lotkov E. S., Rodionov I. A., Ryzhikov I. A., Baryshev A. V., Merzlikin A. M. The retrieval of a thin silver film dielectric constant by resonant approach //Optics Communications. – 2020. – Т. 456. – С. 124636.
6. Merzlikin A. M., Puzko R. S. Homogenization of Maxwell's equations in a layered system beyond the static approximation //Scientific Reports. – 2020. – Т. 10. – №. 1. – С. 1-10.
7. Puzko, R., Tsvirka, V., Gusev, A., Mailyan, K., Mikhailitsyn, A., Glushchenkov, A., Vdovichenko, A., Trofimov, Y., Ryzhikov, I., Merzlikin, A. The influence of the multiple scattering on the optical properties of Ag-poly(p-xylylene) composite coating //Coatings. – 2020. – Т. 10. – С. 976.