Письма в ЖЭТФ, том 124, вып. 1, с. 9 – 17

Роль беспорядка в решетке в резонансном излучении Смита–Парселла

Д. Ю. Сергеева[+], *А. А. Тищенко*[+*1)]

[+]*Национальный исследовательский ядерный университет "НИЯУ МИФИ 115409 Москва, Россия*

[*]*Международная научно-образовательная лаборатория радиационной физики, Национальный исследовательский университет "БелГУ", 308034 Белгород, Россия*

Поступила в редакцию 19 апреля 2026 г.
После переработки 18 мая 2026 г.
Принята к публикации 22 мая 2026 г.

Излучение Смита–Парселла от метаповерхностей становится все более популярным объектом для теоретических и экспериментальных исследований. Решетки, состоящие из резонансных элементов, являются наиболее привлекательными мишенями в этой области, поскольку они генерируют излучение с повышенной интенсивностью. Несмотря на быстрый прогресс в нанотехнологиях, при изготовлении метаповерхностей возникают статистические ошибки, которые могут приводить к значительным изменениям свойств излучения. В данной работе мы теоретически анализируем резонансное излучение Смита–Парселла от разупорядоченного массива димеров взаимодействующих субволновых частиц. Рассматриваются два источника статистических ошибок: разупорядоченность решетки, т.е. отклонения положений димеров от строгой периодичности, и смещение частиц внутри каждого димера. Мы показываем, что спектральные характеристики излучения сильно зависят от отношения двух частот – частоты гармоники излучения Смита–Парселла и резонансной частоты. Разупорядоченность может привести к сдвигу частоты, на которой испускается наиболее интенсивное излучение, в зависимости от того, какой процесс доминирует – когерентный или резонансный. Мы показываем, что резонансное излучение Смита–Парселла, когда резонансная частота близка к одной из гармоник излучения Смита-Парселла, гораздо более устойчиво к разупорядоченности решетки, чем обычное излучение Смита–Парселла. Наша теория позволяет оценить точность, с которой необходимо создавать дифракционные решетки для целей фотоники и наноэлектроники, а также важна для планирования и интерпретации результатов экспериментов по излучению Смита–Парселла от двумерных плоских структур, включая метаповерхности, плоские фотонные и плазмонные кристаллы, которые сегодня активно исследуются в оптике.

DOI: 10.7868/S3034576626070026

1. Введение. Существуют различные методы генерации когерентного излучения, основанные на взаимодействии электронов с периодическими мишенями, включая параметрическое рентгеновское излучение, переходное излучение, излучение Смита–Парселла (ИСП) и др. Интерференция, являющаяся ключевым явлением в перечисленных методах, может быть очень чувствительна к разупорядоченности в расположении элементов в периодических мишенях. Разупорядоченность является неизбежным следствием изготовления мишеней. Роль разупорядоченности в макроскопических периодических мишенях изучалась, например, в [1–3]. В основном, эта разупорядоченность проявляется в подавлении интенсивности и сглаживании пиков излучения.

1)e-mail address: tishchenko@mephi.ru

ИСП от упорядоченных массивов малых объектов (субволнового размера или порядка длины волны) может сопровождаться резонансными эффектами, вызванными, например, возникновением плазмонов или другими явлениями. Резонансные эффекты потенциально более сильные, чем когерентные, и более чувствительны к смещениям излучающих элементов.

В оптике и фотонике, где подобные структуры изучаются и используются в контексте их взаимодействия со светом, проблема разупорядоченности в периодических мишенях также актуальна. Например, различные типы ошибок, возникающих при изготовлении реальных наноструктур, обсуждались в [4]. Среди прочего, авторы [4] различают систематические и статистические ошибки (которые являются основной темой нашего исследования). Они приходят к выводу, что "отклонения существенно влияют на оптические характеристики реальных наноструктур, но отсутствуют в традиционной вычислительной нанофотонике", и были вынуждены разработать собственный компьютерный код для прогнозирования результата взаимодействия света с реальными периодическими структурами.

Влияние разупорядоченности в массиве частиц на свойства ИСП было теоретически изучено, например, вне резонансных условий в [5]. Также искажение продольного (т.е., в направлении движения электрона) периода может объяснить расхождения между экспериментальными и теоретическими данными в [6].

Наиболее полное экспериментальное исследование ИСП от неупорядоченного массива с учетом резонансов было проведено в [7]. Авторы рассматривали нерелятивистские электроны, движущиеся под малым углом к поверхности двухпериодического плазмонного кристалла. Предполагалось, что кристалл был строго периодический в направлении, перпендикулярном движению электрона, и имел отклонения в периодичности вдоль движения электрона. Кристалл состоял из коротких наностержней, в которых возникал локализованный плазмонный резонанс, и имел средний продольный период 145 нм. К сожалению, по данным, приведенным в [7], невозможно восстановить степень разупорядочения. Авторы пришли к выводу, что, несмотря на разупорядочение, спектральный пик ИСП остается на той же частоте, что и для строго периодической решетки. Согласно рисункам из [7], также наблюдалось некоторое разупорядочение в ориентации наностержней. Однако, несмотря на то, что данное разупорядочение может также влиять на резонансный пик, в статье этот эффект не обсуждался.

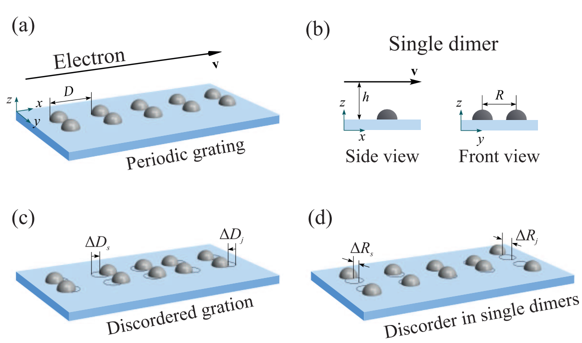

Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Электрон движется над периодической цепочкой из димеров; (b) – вид сбоку и спереди. (c) – Смещение димеров приводит к разупорядоченности решетки. (d) – Строго периодическая решетка из различных димеров

Все это показывает необходимость прогнозирования свойств резонансного ИСП от структур, имеющих нарушенную упорядоченность, чтобы знать, как выбрать способ изготовления структуры в зависимости от требуемой точности, как оценить эту точность и т.д. Главная цель данной работы – восполнить пробел в теоретическом описании этих эффектов.

В настоящей работе мы теоретически изучаем ИСП от разупорядоченной решетки, состоящей из конечного числа резонансных элементов – пар взаимодействующих частиц, и показываем, что выводы, сделанные в [7], являются лишь частным случаем, зависящим от параметров решетки. Мы также показываем, как точность изготовления отдельного димера влияет на свойства излучения.

2. ИСП от цепочки димеров. Теория резонансного ИСП от цепочки димеров была представлена в [8]. Для удобства читателя в этом разделе приведем итоговые формулы, на которые будем опираться в этом исследовании.

Итак, пусть электрон движется над сложной периодической (или квазипериодической) структурой и генерирует излучение (см. рис. 1a). Рассматриваемая структура состоит из N димеров, расположенных в плоскости. Димер представляет собой пару субволновых частиц, рис. 1b. Для простоты предполагается, что каждая частица имеет сферическую форму, что позволяет описать ее отклик на внешнее поле с помощью скалярной функции поляризуемости $\alpha \equiv \alpha(\omega)$. Для частиц более сложных форм поляризуемость должна быть тензором. Две частицы в димере взаимодействуют друг с другом через поле излучения. Степень взаимодействия сильно зависит от расстояния между двумя частицами R_s, которое может быть произвольным. Здесь нижний индекс s обозначает номер димера (от 1 до N). Для краткости будем называть димер *перпендикулярным*, если его ось, т.е. воображаемая линия, соединяющая центры двух частиц, перпендикулярна траектории электрона, и *симметричным*, если две частицы идентичны и расположены на одинаковом расстоянии по обе стороны от траектории электрона.

На далеких расстояниях $r \gg \lambda$, где λ – длина волны, распределение излученной энергии по частотам и углам имеет вид [8]

$$\frac{dW(\mathbf{n},\omega)}{d\hbar\omega d\Omega} = \frac{\omega^2}{\hbar c}\left|\mathbf{k}\times\sum_{s=1}^{N}\mathbf{P}_s\right|^2, \tag{1}$$

где c – скорость света в вакууме, $\hbar$ – постоянная Планка, ω – частота излучения, суммирование проводится по N димерам, $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) \equiv \mathbf{n}\omega/c \equiv \mathbf{n}k$ –

волновой вектор излучения, $\mathbf{n}$ – единичный волновой вектор. Следуя [8], нетрудно получить, что для s-го перпендикулярного и симметричного димера величина имеет вид

$$\mathbf{P}_s = \alpha \frac{e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{1s}} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{2s}}}{1 - \alpha e^{iR_s k} A_s} (E_x^0(\mathbf{R}_{1s}, \omega)\mathbf{e}_x + E_z^0(\mathbf{R}_{1s}, \omega)\mathbf{e}_z) + $$

$$+ \alpha \frac{e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{1s}} - e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{2s}}}{1 - \alpha e^{iR_s k} B_s} E_y^0(\mathbf{R}_{1s}, \omega)\mathbf{e}_y. \qquad (2)$$

Физический смысл величины $\mathbf{P}_s$ заключается в том, что она определяет поле излучения:

$$\mathbf{E}^{\mathrm{rad}}(\mathbf{r}, \omega) = -i \frac{e^{ikr}}{r} \mathbf{k} \times \mathbf{k} \times \sum_{s=1}^{N} \mathbf{P}_s. \qquad (3)$$

Здесь E_x^0, E_y^0 и E_z^0 – соответствующие компоненты Фурье-образа кулоновского поля движущегося электрона в точке, определяемой радиус-вектором $\mathbf{R}_{1s}$ (см., например, выражение (3.5) в [9]):

$$\mathbf{E}^0(\mathbf{R}_{1s}, \omega) = -\frac{ie}{\pi \nu} e^{i\frac{\omega}{\nu} X_{1s}} \frac{\omega}{\nu \gamma} \times$$

$$\times \left[\frac{\mathbf{e}_x}{\gamma} K_0 \left(\frac{\omega b_s}{\nu \gamma} \right) + i \frac{\mathbf{b}_s}{b_s} K_1 \left(\frac{\omega b_s}{\nu \gamma} \right) \right], \qquad (4)$$

$\mathbf{b}_s = Y_{1s}\mathbf{e}_y - h\mathbf{e}_z$, $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$ и $\mathbf{e}_z$ – орты, K_0 и K_1 – функции Макдональда 0-го и 1-го порядков, e, $\mathbf{v} = (\nu, 0, 0)$ и γ – заряд, скорость и Лоренц-фактор электрона, h – импакт-параметр, т.е. кратчайшее расстояние между траекторией электрона и поверхностью мишени. Это поле берется в точках $\mathbf{R}_{1s} = (X_s, Y_s, 0)$, где расположена первая частица s-го димера. При этом $\mathbf{R}_{2s} = (X_s - Y_s, 0)$ – это радиус-вектор второй частицы, составляющей s-й димер, и ниже мы будем использовать обозначение $R_s \equiv |\mathbf{R}_s| = |\mathbf{R}_{2s} - \mathbf{R}_{1s}|$ в качестве расстояния между отдельными частицами s-го димера.

Функции A_s и B_s, стоящие в знаменателях в формуле (2), имеют вид

$$A_s = (k^2 R_s^2 + ikR_s - 1)/R_s^3, \qquad (5)$$

$$B_s = 2(ikR_s - 1)/R_s^3, \qquad (6)$$

и отвечают учету взаимодействия между частицами, составляющими димер. В условиях минимума знаменателей в формуле (2) излучение имеет резкие резонансные пики интенсивности в спектрах. Эти резонансы преимущественно определяются лишь одним знаменателем:

$$V_s = 1 - \alpha e^{iR_s k} A_s. \qquad (7)$$

Уравнение на параметры R_s и ω, получаемое из условия $V_s = \min$, является трансцендентным и не может быть решено аналитически в общем случае. Однако, несложный численный анализ позволяет найти нужные решения для конкретных параметров задачи.

3. Строго периодическая решетка. Если все димеры одинаковы, то разность $Y_{2s} - Y_{1s}$ не зависит от номера s. Тогда, для строго периодической решетки с периодом D, см. рис. 1a, общие формулы из раздела 2 существенно упрощаются. Прежде всего, векторы $\mathbf{R}_s$ для всех димеров становятся одинаковыми и не зависят от индекса суммирования s: $\mathbf{R}_s \to \mathbf{R}$. Далее, аргумент суммы в выражении (1) сводится к $\exp(i\phi X_s)$, где $X_s = sD$. В результате, формула (1) принимает вид

$$\frac{dW(\mathbf{n}, \omega)}{d\hbar\omega d\Omega} = I_1 F, \qquad (8)$$

где I_1 – распределение энергии, излученной одним димером, по углам и частотам, и F – обычный для ИСП фактор:

$$F = \left| \sum_{s=1}^{N} \exp[-i(s-1)D\phi] \right|^2 = \frac{\sin^2(ND\phi/2)}{\sin^2(D\phi/2)}, \qquad (9)$$

где фаза ϕ имеет вид

$$\phi = \frac{\omega}{\nu}(1 - \beta n_x), \qquad (10)$$

$\beta = \nu/c$. В дальнейшем анализе будет удобно представить компоненты единичного волнового вектора через полярный θ и азимутальный φ углы: $n_x = \cos\theta$, $n_y = \sin\theta \sin\varphi$, $n_z = \sin\theta \cos\varphi$.

Заметим, что излучение от димера, расположенного в начале координат, и описываемое величиной I_1, является резонансным, т.е. его спектр содержит один высокий максимум на частоте, для которой V_s минимально.

Ввиду периодичности структуры естественно ожидать проявления когерентных эффектов в излучении, которые проявятся в возникновении набора гармоник в спектре. Когерентные эффекты определяются условиями, когда фактор F принимает свое максимальное значение N^2:

$$D\phi = 2\pi m, \quad m = 1, 2, ... \qquad (11)$$

Это соотношение определяет спектр ИСП.

Наибольшая интенсивность достигается, когда частота одной гармоники ИСП совпадает с резонансной частотой. Это означает, что излучение становится резонансным. Причина такого резонансного усиления интенсивности излучения на резонансной частоте заключается во взаимодействии между частицами в димере. Если элементы решетки не являются парами взаимодействующих частиц, природа резонанса может быть иной. Например, ИСП в [7] является резонансным из-за локализованных плазмонов в каждом наностержне.

В данной работе мы различаем когерентные и резонансные эффекты. Так, ИСП является когерентным и дает наибольшую интенсивность при условии (11). Коэффициент усиления ограничен N^2, где N – число источников излучения. В случае ИСП это число элементов в решетке вдоль траектории электрона. Спектральная ширина каждой гармоники обратно пропорциональна N и квадрату номера гармоники. Таким образом, суть когерентного усиления заключается в согласованности фаз излучения, исходящего от соседних элементов.

В свою очередь, резонансное усиление излучения значительно меньше ограничено по величине. Ширина спектра зависит от природы резонанса. Природа заключается в совпадении двух частот, в основном между собственной частотой системы и частотой внешнего возбуждения.

Частотные характеристики излучения от отдельного резонансного димера были детально рассмотрены в статье [10]. Для построения спектральных зависимостей здесь и далее мы будем пользоваться формулой Рэлея для поляризуемости отдельных частиц в длинноволновом приближении [11]

$$\alpha(\omega) = r_\alpha \frac{\varepsilon(\omega) - 1}{\varepsilon(\omega) + 2}. \tag{12}$$

Для задания конкретных характеристик материала можно пользоваться известным приближением Друде–Лоренца

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_1^2}{\omega^2 + i\omega\Gamma}. \tag{13}$$

Более детально вопросы возможности использования этой формулы мы обсуждали в работе [8].

Сравнение формулы (13) с экспериментальными данными работы [12] дает феноменологическое значение нужных параметров: так, для меди параметры $\omega_1 = 13$ эВ и $\Gamma = 25$ мэВ обеспечивают отличное совпадение экспериментальной и теоретических спектральных зависимостей в диапазоне как минимум от 0.5 до 3 ТГц. Ниже при построении спектральных зависимостей мы будем пользоваться этими данными.

В рассматриваемой задаче можно ожидать, что когерентные эффекты будут сильно зависеть от периодичности, тогда как резонансные эффекты – нет.

Эффект резонансного усиления ИСП, обусловленный совпадением гармоники ИСП с резонансной частотой отдельного димера, проиллюстрирован на рис. 2. Там сравниваются спектры ИСП от строго периодического массива димеров с учетом взаимодействия между частицами (синяя кривая) и без учета (красная кривая). Резонанс в каждом димере происходит на длине волны около 540 мкм. Именно поэтому четвертая гармоника ИСП, которая также близка к 540 мкм, усиливается, в то время как третья и пятая – нет.

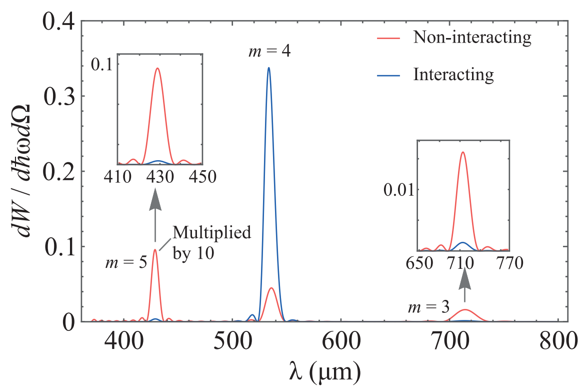

Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектральное распределение ИСП от периодической структуры, состоящей из 10 димеров с учетом взаимодействия между частицами (синяя кривая) и без учета (красная кривая, совпадает с распределением излучения от цепочки отдельных частиц с удвоенным объемом). Здесь $\gamma = 50$, $h = 2$ мм, $d = 6$ мм, $R = 518$ мкм, $\varphi = 0$, $\theta = 50$ градусов, все димеры одинаковы и состоят из двух сферических медных частиц радиуса $r_\alpha = 150$ мкм. Для удобства сравнения, красная кривая умножена на 10

В показанном диапазоне частот красная кривая для невзаимодействующих частиц полностью совпадает со спектральной зависимостью излучения от цепочки одиночных частиц с удвоенным объемом, расположенных непосредственно под траекторией электрона. Поскольку мы не можем включать или выключать взаимодействие между частицами, продемонстрированное усиление излучения на длине волны около 540 мкм (четвертая гармоника ИСП) можно интерпретировать как увеличение относительно структуры, состоящей из нерезонансных элементов. Для параметров рис. 2, резонанс увеличивает излучение в области пика на 540 мкм приблизительно в 77 раз.

4. Разупорядоченная решетка. Пусть, как и выше, димеры являются одинаковыми, симметричными и перпендикулярными, так что все $\mathbf{R}_s$ все еще равны и не зависят от индекса суммирования s: $\mathbf{R}_s \to \mathbf{R}$. Однако теперь рассмотрим их разупорядочение (см. рис. 1c). Тогда, теперь $X_s = sD + \Delta D_s$, где ΔD_s – смещение s-го димера из его позиции в строго упорядоченной решетке. В этом случае вместо выражения (9) имеем

$$F \to \tilde{F} = \left| \sum_{s=1}^{N} \exp[-i((s-1)D + \Delta D)\phi] \right|^2. \qquad (14)$$

Величина ΔD_s может быть положительной или отрицательной; она подчиняется распределению Гаусса, со средним значением, равным нулю, и дисперсией σ:

$$f(\Delta D_s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{\Delta D_s^2}{2\sigma^2}\right]. \qquad (15)$$

После усреднения по всем ΔD_s с весовой функцией (15) правой части в выражении (8), где величина F определена формулой (14), получаем

$$\frac{dW(\mathbf{n},\omega)}{d\hbar\omega d\Omega} = I_1 \langle \tilde{F} \rangle, \qquad (16)$$

где

$$\langle \tilde{F} \rangle = N(1 - e^{-\phi^2\sigma^2}) + e^{-\phi^2\sigma^2} \frac{\sin^2(ND\phi/2)}{\sin^2(D\phi/2)}. \qquad (17)$$

Это усреднение можно выполнить только если $N \gg 1$. Графический анализ уравнения (14) можно провести и без усреднения. Действительно, стохастическую переменную ΔD_s можно сгенерировать с помощью генератора случайных чисел в каком-либо инструменте моделирования, как это было сделано в [13]. Тогда множитель $\tilde{F}$ в (14) можно вычислить путем прямого суммирования. Для небольших N этот метод дает очень разные результаты после каждого запуска генератора случайных чисел. А вот для $N \gg 1$ результаты, полученные методами, основанными на использовании генератора случайных чисел, совпадают с результатами усреднения.

Следует также подчеркнуть, что из-за принципов работы детекторов, измеряющих излучение, усреднять следует интенсивность, т.е. квадрат модуля поля излучения, а не только поле излучения, как было сделано в [7].

Если разупорядоченность в положениях димеров очень мала ($\phi\sigma \ll 1$), то уравнение (17) совпадает с уравнением (9), и изменений в спектрах из-за разупорядоченности не происходит. Это иллюстрируется на рис. 3a практическим совпадением черной (строго периодическая решетка) и зеленой (незначительная разупорядоченность) линий. Мы можем переписать условие $\phi\sigma \ll 1$, учитывая уравнение (11) и тот факт, что $D > r_\alpha$ как: $\sigma \ll r_\alpha$.

Если разупорядоченность слишком велика ($\phi\sigma$ $\sigma \gg 1$), то мы имеем $\langle \tilde{F} \rangle \approx N$. Это естественно: ввиду отсутствия периодичности все димеры излучают некогерентно. Данный случай иллюстрируется на рис. 3a полным совпадением красной и желтой пунктирной линий. Заметим, что такая разупорядоченность может привести к изменениям частоты, на которой излучение имеет наибольшую интенсивность: они различны для черной и красной линий.

В промежуточном случае, начиная с $\sigma \sim \phi^{-1}$, мы можем наблюдать существенные изменения в спектрах. Это условие можно переписать, используя дисперсионное соотношение (11):

$$\sigma \sim \frac{D}{2\pi m}, \qquad (18)$$

где m – дифракционный порядок, или, иными словами, гармоника ИСП. Соотношение (18) означает, что нарушение периодичности решетки по-разному влияет на каждый порядок дифракции. Меньшие порядки дифракции менее чувствительны к ошибкам при изготовлении решетки, чем высшие. Этот промежуточный случай проиллюстрирован синей линией на рис. 3a.

Следует отметить, что авторы [7] не приводят значение меры разупорядоченности решетки, для которого они проводили анализ и пришли к выводу, что разупорядоченность мало влияет на спектры излучения. Как видно из наших результатов, эта разупорядоченность должна была быть очень малой ($\phi\sigma \ll 1$), иначе авторы наблюдали бы сдвиг частоты максимума интенсивности излучения.

Итак, рис. 3a показывает, что в резонансном ИСП разупорядочение в первую очередь влияет на интенсивность излучения и лишь незначительно влияет на центральную частоту. К аналогичному выводу пришли авторы [7]. Причина такого эффекта заключается в различии между когерентностью и резонансом.

Теперь рассмотрим случай, когда гармоника ИСП не так близка к резонансной частоте отдельного димера. Этого можно достичь, например, изменив расстояние между двумя частицами в димере так, чтобы резонансная частота сместилась.

Если резонансная частота не совпадает с одной из гармоник ИСП, разупорядочение может резко изменить спектр. Пример этого показан на рис. 3b. Видно, что, например, при степени разупорядоченности $\sigma \sim \phi^{-1}$ (синяя линия) четвертая гармоника ИСП практически подавляется, и в полном спектре доминирует резонансная частота от отдельного димера.

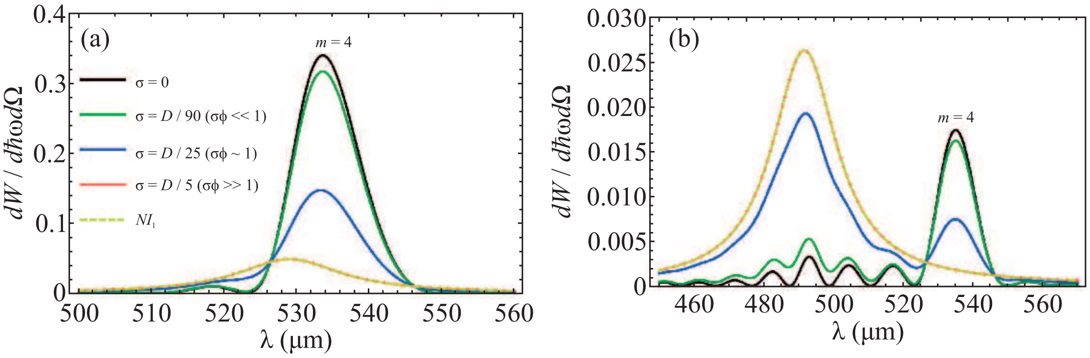

Рис. 3. Спектральное распределение четвертой гармоники ИСП от неупорядоченной цепочки димеров для различных значений стандартного отклонения σ (сплошные линии) в сравнении с полностью некогерентным излучением от строго периодической цепочки димеров (пунктирная линия). (a) – для $R = 518$ мкм (резонансная частота почти совпадает с 4-й гармоникой ИСП. "Почти" здесь означает, что резонансная частота находится в области полуширины ИСП); (b) – для $R = 475$ мкм (резонансная частота не совпадает с 4-й гармоникой ИСП). Остальные параметры такие же, как на рис. 2

Иными словами, разупорядочение решетки может сильно влиять на ИСП, но практически не влияет на резонансное ИСП. В зависимости от соотношения между резонансной частотой и частотой конкретной гармоники ИСП можно ожидать изменений в спектре различной степени, обусловленных разупорядоченностью.

5. Смещение в отдельных димерах. Расстояние между частицами также может изменяться от димера к димеру, например, в результате производственных процессов. Такое нарушение порядка должно приводить к изменениям резонансной частоты и практически не изменяет свойства ИСП. Чтобы отличить этот эффект от эффекта разупорядоченности, т.е. нарушения периодичности структуры, обсуждавшегося в разделе 4, мы будем называть его смещением. В этом случае расстояние между двумя частицами в s-м димере можно определить как $R_s = R + \Delta R_s$, где R для всех димеров равен фиксированному расстоянию между двумя частицами, составляющими димер, а ΔR_s – уникальная для каждого димера изменяемая величина. Здесь ΔR_s – положительная или отрицательная величина в интервале от $-R$ до бесконечности, подчиняющаяся распределению Гаусса с дисперсией ρ:

$$f(\Delta R_s) = \frac{1}{A}\exp\left[-\frac{\Delta R_s^2}{2\rho^2}\right],$$

$$A = \rho\sqrt{\frac{\pi}{2}}\left(1 + \mathrm{erf}\left(\frac{R}{\sqrt{2}\rho}\right)\right). \quad (19)$$

Здесь erf – функция ошибок, которая появляется ввиду нормировки функции f. Усредняя выражение (1) по всем ΔR_s с функцией распределения, заданной формулой (19), получаем

$$\frac{dW(\mathbf{n},\omega)}{d\hbar\omega d\Omega} = \frac{e^2\omega^4}{\pi^2\hbar c v^4\gamma^2}|\alpha|^2[N(T_1 - T_2) + FT_2], \quad (20)$$

где введены следующие обозначения:

$$T_1 = \frac{1}{A}\int\limits_{-R}^{+\infty} d(\Delta R_s)\exp\left(-\frac{\Delta R_s^2}{2\rho^2}\right)|\mathbf{k}\times\mathbf{L}|^2, \quad (21)$$

$$T_2 = \left|\mathbf{k}\times\frac{1}{A}\int\limits_{-R}^{+\infty} d(\Delta R_s)\exp\left(-\frac{\Delta R_s^2}{2\rho^2} - i\frac{k_y\Delta R_s}{2}\right)\mathbf{L}\right|^2, \quad (22)$$

$$\mathbf{L} = \frac{1+e^{-ik_yR_s}}{1-\alpha e^{iR_sk}A_s}\left[\frac{\mathbf{e}_x}{\gamma}K_0\left(\frac{\omega b_s}{v\gamma}\right) - i\frac{h\mathbf{e}_z}{b_s}K_1\left(\frac{\omega b_s}{v\gamma}\right)\right] + i\frac{1-e^{-ik_yR_s}}{1-\alpha e^{iR_sk}B_s}\frac{R_s\mathbf{e}_y}{2b_s}K_1\left(\frac{\omega b_s}{v\gamma}\right), \quad (23)$$

и фактор F определен формулой (9). Предполагается, что димеры образуют строго периодическую структуру вдоль траектории электрона.

В формуле (20) второе слагаемое в скобках определяется величиной F из формулы (9), которая в пиках ИСП, определяемых дисперсионным соотношением (11), максимальна и равна N^2. Таким образом, явный вид записи формулы (20) подчеркивает, что она содержит два слагаемых: одно из них, стандартно в условиях ИСП, пропорционально квадрату числа элементов решетки N^2, в то время как второе пропорционально N. Хотя ИСП в своих пиках – процесс когерентный по числу элементов, составля-

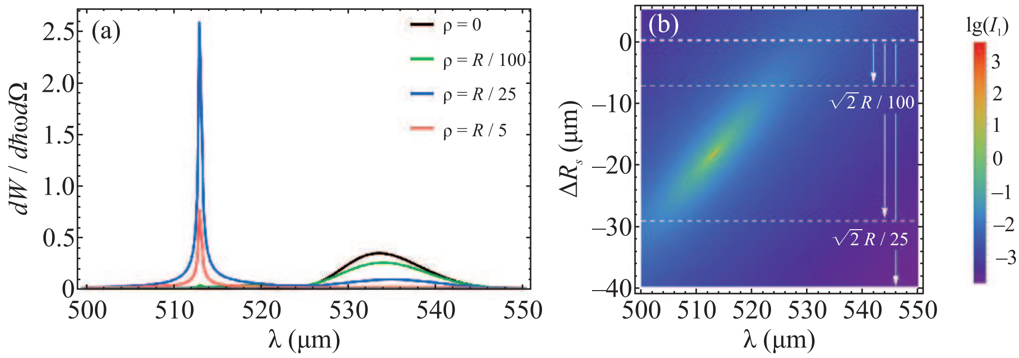

Рис. 4. (Цветной онлайн) (a) – Спектральное распределение излучения от строго периодической цепочки, состоящей из димеров с различными расстояниями между двумя частицами $R_s = R + \Delta R_s$, где ΔR_s подчиняется гауссовому распределению с различными значениями стандартного отклонения ρ. (b) – Логарифмическое значение интенсивности излучения от одного димера I_1 в зависимости от длины волны излучения и смещения ΔR_s. Горизонтальные пунктирные линии соответствуют $\Delta R_s = 0$, $\Delta R_s = \sqrt{2}R/100$, $\Delta R_s = \sqrt{2}R/25$. Стрелками показаны полосы для интегрирования с различными ρ: стрелка от $\Delta R_s = 0$ к $\Delta R_s = \sqrt{2}R/100$ для $\rho = R/100$; стрелка от $\Delta R_s = 0$ к $\Delta R_s = \sqrt{2}R/25$ для $\rho = R/25$; и стрелка для диапазона дальнейшего интегрирования. Все остальные параметры совпадают с параметрами на рис. 2

ющих решетку, мы видим, что разупорядоченность свойств отдельных элементов ведет к дополнительному слагаемому, линейно зависящему от числа N. Эта линейная пропорциональность числу элементов решетки – аналог некогерентных процессов в излучении сгустков заряженных частиц, или, в терминах оптики, аналог диффузного рассеяния (на фоне когерентного, пропорционального квадрату числа рассеивателей). Действительно, если проследить асимптотическое поведение разности $(T_1 - T_2)$, стоящей в качестве множителя перед слагаемым, пропорциональным N, то можно видеть, что при уменьшении разброса свойств отдельных элементов решетки, т.е. при $\rho \to 0$, разность $(T_1 - T_2) \to 0$; в этом случае решетка становится идеальной, и спектрально-угловая плотность становится пропорциональна фактору F, как обычно для ИСП [14].

Численный анализ подтверждает сказанное выше: при относительно небольшом отклонении ρ ($\rho/R \ll 1$), спектр излучения от решетки, состоящей из димеров со смещениями, очень близок к спектру излучения от решетки с идентичными димерами. Это показано на рис. 4a: зеленая линия близка к черной. Увеличение ρ приводит к тому, что резонансные эффекты становятся доминирующими над когерентными. На рисунке 4a это показано увеличением резонансных максимумов около 513 мкм для синей и красной линий, при одновременном уменьшении амплитуды четвертой гармоники ИСП около 533 мкм. Следует подчеркнуть, что, поскольку графики являются результатом численного интегрирования, линии не воспроизводят все мельчайшие детали. Так, резонансные максимумы будут еще выше при более точном расчете, но соотношение между различными линиями остается тем же.

Возникает вопрос, почему резонансные эффекты настолько сильны, несмотря на то, что все димеры различны, т.е. генерируют разные резонансные частоты. Дело в том, что когда среди димеров с разными расстояниями R_s между двумя частицами для определенных параметров находится один, чей сильный резонанс попадает в наблюдаемый спектральный диапазон, то именно этот единственный резонанс затмевает все остальные эффекты. Чем больше разброс ρ (дисперсия), тем больше вариация R_s, и тем вероятнее найти этот единственный высокорезонансный димер.

Иллюстрация этого показана на рис. 4b, где логарифмическое значение интенсивности излучения от одного димера I_1, т.е. $\lg(I_1)$, построено в зависимости от длины волны излучения и смещения ΔR_s. В этой области есть одно очень яркое пятно, соответствующее сильному резонансу. При интегрировании по всем ΔR_s с весовой функцией из формулы (19), для $\rho = R/100$ полоса между двумя верхними пунктирными линиями (0 и $\sqrt{2}R/100$) вносит наибольший вклад в интегралы (21)–(22). В этой полосе нет очень высокого резонанса, но есть хвосты от этого резонанса. Суммирование всех точек из этой полосы и дает небольшой резонансный максимум на частоте около 513 мкм для зеленой линии на рис. 4a. При интегрировании по всем ΔR_s для $\rho = R/25$ полоса между двумя другими пунктирными линиями (0 и $\sqrt{2}R/25$) вносит наибольший вклад в интегралы. Эта полоса включает очень высокий резонансный максимум, который четко проявляется на красной и синей линиях на рис. 4a. Уменьшение величины резонансного максимума для $\rho = R/5$ на рис. 4a можно объяснить следующей причиной. В этом случае расстояние между двумя частицами в димерах в целом увеличивается, и частицы удаляются от траектории электрона. Это означает, что кулоновское поле электрона, действующее на частицы, ослабевает. Следовательно, излучение от каждой частицы становится слабее, несмотря на резонанс.

6. Заключение. В данной работе мы обобщили теорию резонансного ИСП от периодической цепочки, состоящей из димеров, введя два типа беспорядка: a) смещения в положениях димеров, приводящий к нарушению строгой периодичности цепочки; б) смещение положений частиц в каждом димере, приводящее к нарушению резонансных эффектов. В исследованной задаче резонансы обеспечиваются взаимодействием двух частиц в каждом димере. Однако все выводы остаются теми же для резонансов любой природы, возникающих в отдельных элементах решетки, например, для локализованных плазмонов.

Анализ проводился для двух наборов параметров: когда резонансная частота излучения от одного димера ω_R была близка к одной из гармоник ИСП ω_{SPR} и когда она была далека от нее.

Мы теоретически обосновали выдвинутое ранее предположение, что ИСП является очень устойчивым к разупорядоченности решетки, поскольку гармоники наблюдаются на одних и тех же частотах независимо от изменений в периоде решетки. При этом, наши результаты показывают, что уменьшение интенсивности гармоник с увеличением степени разупорядоченности может достичь уровня, при котором их измерение в ходе эксперимента становится невозможным. В целом, ошибки в положении димеров в решетке с периодом D до $\sigma \sim D/(2\pi m)$ не оказывают существенного влияния на частоту, на которой испускается наиболее интенсивное излучение (m – номер гармоники ИСП). Кроме того, в противопоставление ИСП от обычных решеток, спектральное поведение ИСП от решеток, состоящих из резонансных элементов, может существенно различаться в зависимости от степени разупорядоченности. Так, когда $\omega_{SPR} \approx \omega_R$, различий в спектрах излучения от строго периодических и разупорядоченных решеток может не обнаружиться (за исключением интенсивности). В случае заметно различных частот ω_{SPR} и ω_R резонансный эффект может подавлять когерентные эффекты ИСП, и в спектре излучения от разупорядоченной решетки мы увидим максимумы резонансной природы на частотах, отличных от гармоник ИСП. Этот эффект сильно зависит от соотношения ω_{SPR}/ω_R и дает разные результаты для разных значений ω_{SPR}/ω_R даже при одинаковой степени разупорядоченности.

Второй тип беспорядка – смещение положений частиц внутри каждого димера – также вносит существенные изменения в спектры ИСП. Даже при небольших смещениях (порядка одной пятой расчетного расстояния между двумя частицами) может возникнуть ситуация, когда расстояние между двумя частицами в димере случайно совпадает с некоторым расстоянием, на котором излучение становится чрезвычайно резонансным на определенной длине волны. Тогда, даже будучи некогерентным, излучение от этого единственного димера будет доминировать над излучением от всех других димеров и когерентными эффектами. Коротко: даже небольшое разупорядочение может привести к сильным изменениям в спектрах ИСП.

В целом, наши результаты показывают, что в отношении сдвигов частоты и изменений интенсивности резонансное ИСП при условии $\omega_{SPR} \approx \omega_R$ гораздо более устойчиво к рассмотренным типам разупорядоченности в решетке, чем обычное ИСП.

Полученные результаты помогут оценить точность, с которой необходимо создавать дифракционные решетки для целей фотоники и наноэлектроники. Они также полезны для проектирования и правильной интерпретации результатов экспериментов по ИСП от двумерных плоских структур, включая метаповерхности, плоские фотонные и плазмонные кристаллы, которые сегодня активно исследуются в оптике.

Финансирование работы. Исследование поддержано Российским научным фондом, грант 24-72-00150.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. Г. М. Гарибян, Л. А. Геворгян, Ш. Ян, “Рентгеновское переходное излучение, образуемое в нерегулярной среде”, ЖЭТФ **66**, 552 (1974) [G. M. Garibyan, L. A. Gevorgyan, and C. Yang, “X-ray transition radiation produced in an irregular medium”, Sov. Phys.-JETP **39**(2), 265 (1974)].
2. V. M. Grichine, “Irregular radiators for x-ray transition radiation”, Phys. Scr. **100**, 105303 (2025).
3. R. Remez, N. Shapira, C. Roques-Carmes, R. Tirole, Y. Yang, Y. Lereah, M. Soljacic, I. Kaminer, and

A. Arie, “Spectral and spatial shaping of Smith-Purcell radiation”, Phys. Rev. A **96**, 061801(R) (2017).

4. L. J. Corbijn van Willenswaard, S. Smeets, N. Renaud, M. Schlottbom, J. J. W. van der Vegt, and W. L. Vos, “Non-utopian optical properties computed of a tomographically reconstructed real photonic nanostructure”, Opt. Express **32**, 32029 (2024).
5. J. R. M. Saavedra, D. Castells-Graells, and F. Javier Garcia de Abajo, “Smith-Purcell radiation emission in aperiodic arrays”, Phys. Rev. B **94**, 035418 (2016).
6. D. Yu. Sergeeva, A. S. Aryshev, A. A. Tishchenko, K. E. Popov, N. Terunuma, and J. Urakawa, “THz Smith-Purcell and grating transition radiation from metasurface: experiment and theory”, Opt. Lett. **46**, 544 (2021).
7. I. Kaminer, S. E. Kooi, R. Shiloh, B. Zhen, Y. Shen, J. J. Lopez, R. Remez, S. A. Skirlo, Y. Yang, J. D. Joannopoulos, A. Arie, and M. Soljacic, “Spectrally and Spatially Resolved Smith-Purcell Radiation in Plasmonic Crystals with Short-Range Disorder”, Phys. Rev. X **7**, 011003 (2017).
8. D. Yu. Sergeeva and A. A. Tishchenko, “Enhanced Smith-Purcell radiation based on quasibound states in the continuum in dimers aligned in a chain”, Phys. Rev. B **108**, 155435 (2023).
9. A. P. Potylitsyn, M. I. Ryazanov, M. N. Strikhanov, and A. A. Tishchenko, *Diffraction Radiation from Relativistic Particles, Springer Tracts in Modern Physics* (Springer, Berlin, 2010), v. 239.
10. A. A. Tishchenko and D. Yu. Sergeeva, “Near-field resonances in photon emission via interaction of electrons with coupled nanoparticles”, Phys. Rev. B **100**, 235421 (2019).
11. М. И. Рязанов, *Электродинамика конденсированного вещества* (Наука, М., 1984).
12. W.-F. Sun, X.-K. Wang, and Y. Zhang, “Measurement of refractive index for high reflectance materials with terahertz time domain reflection spectroscopy”, Chin. Phys. Lett. **26**, 114210 (2009).
13. D. I. Garaev, D. Yu. Sergeeva, and A. A. Tishchenko, “Focusing of Smith-Purcell radiation from a two-dimensional particle array in the prewave zone”, Phys. Rev. A **108**, 43515 (2023).
14. G. Doucas, *Smith-Purcell Radiation: Basic Theory and Applications* (Oxford University Press, Oxford, 2025).