Литература

1. Kresse, G. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // Physical review B. – 1996. – T. 54, Iss. 16. – PP. 11169.
2. Kresse, G. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // Computational materials science. – 1996. – T. 6, Iss. 1. – PP. 15–50.
3. Medvedev, M. G. et al. Density functional theory is straying from the path toward the exact functional / M. G. Medvedev [et al.] // Science. – 2017. – T. 355, Iss. 6320. – PP. 49–52.
4. Matthes, L. Optical properties of two-dimensional honeycomb crystals graphene, silicene, germanene, and tinene from first principles / L. Matthes, O. Pulci, F. Bechstedt // New Journal of Physics. – 2014. – Vol. 16, Iss.10. – PP. 105007.
5. Rani, P. DFT study of optical properties of pure and doped graphene / P. Rani, G. S. Dubey, V. K. Jindal // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. – 2014. – Vol. 62. – PP. 28–35.

Е. Д. Головин

(ГГУ имени Ф. Скорины, Гомель)

Науч. рук. **В. Н. Капшай**, канд. физ.-мат. наук, доцент

ГЕНЕРАЦИЯ СУММАРНОЙ ЧАСТОТЫ В ПОВЕРХНОСТНОМ СЛОЕ ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ЧАСТИЦЫ БОЛЬШОЙ ВЫСОТЫ. ПРИБЛИЖЕНИЕ ВКБ

Введение. Генерация излучения суммарной частоты (ГСЧ) относится к нелинейным оптическим явлениям второго порядка и наблюдается в поверхностных слоях малых центросимметричных частиц. Это явление используется для исследования физических и химических процессов, происходящих на поверхности таких частиц. Одной из моделей, описывающей ГСЧ, является модель Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна (ВКБ), которая учитывает рассеяние на границе раздела частицы и среды.

Постановка задачи. В данной работе с использованием приближения ВКБ теоретически получим формулу для вычисления напряжённости поля суммарной частоты, генерируемого в нелинейном сферическом слое. Пусть на цилиндрическую диэлектрическую частицу с радиусом основания a и высотой h ($a \ll h$), покрытую нелинейным слоем толщиной d_0, падает две плоские электромагнитные волны с циклическими частотами ω_1 и ω_2 и волновыми векторами $\mathbf{k}^{(1)}$ и $\mathbf{k}^{(2)}$. Отношение показателя преломления частицы к показателю преломления среды на частоте ω_1 обозначим η_1, на частоте ω_2 – η_2.

В данной задаче генерацией излучения от торцевых поверхностей частицы можно пренебречь, поэтому будем рассматривать генерацию в слоях на боковой поверхности частицы. Найдём выражения для векторов электрической напряжённости обеих волн, падающих на поверхность сферической частицы, с учётом сдвига фазы. Номера рассматриваемых падающих волн будем обозначать буквой j (j принимает значения 1 и 2).

Рассмотрим произвольный луч падающей электромагнитной волны с циклической частотой ω_j и волновым вектором $\mathbf{k}^{(j)}$, лежащий в плоскости xOy, и проходящий через поверхность частицы в точках A и B (рисунок 1, a). При рассмотрении траектории луча AB не будем учитывать преломление электромагнитных волн на границах раздела сред [1]. Тогда фазы в точках A и B соответственно равны $\varphi^{(j)}_{lat,A}(\mathbf{x}'_A) = \mathbf{k}^{(j)}\mathbf{x}'_A$ и $\varphi^{(j)}_{lat,B}(\mathbf{x}'_B) = \mathbf{k}^{(j)}\mathbf{x}'_B + \Delta\varphi^{(j)}_{lat}$, соответственно, где $\Delta\varphi^{(j)}_{lat}$ – сдвиг фазы, вызванный прохождением волны через среду с показателем преломления, отличным от показателя преломления окружающей среды. Рассматривая наклонное сечение в форме эллипса и его проекцию на плоскость, перпендикулярную оси симметрии частицы, запишем выражения для сдвига фаз и фазы в точке B:

$$\Delta\varphi^{(j)}_{lat}(\mathbf{x}'_B) = 2(\eta_j - 1)\,\mathbf{k}^{(j)}_\rho \mathbf{x}'_B \left(\frac{|\mathbf{k}^{(j)}|}{|\mathbf{k}^{(j)}_\rho|}\right)^2, \tag{1}$$

$$\varphi^{(j)}_{lat,B}(\mathbf{x}'_B) = \mathbf{k}^{(j)}\mathbf{x}'_B + 2(\eta_j - 1)\,\mathbf{k}^{(j)}_\rho \mathbf{x}'_B \left(\frac{|\mathbf{k}^{(j)}|}{|\mathbf{k}^{(j)}_\rho|}\right)^2. \tag{2}$$

Далее подберём такое обобщающее выражение для фазы, чтобы её значение в точке A было равно $\varphi^{(j)}_A$, а в точке B – $\varphi^{(j)}_B$:

$$\varphi^{(j)}_{lat}(\mathbf{x}') = \mathbf{k}^{(j)}\mathbf{x}' + (\eta_j - 1)(\mathbf{k}^{(j)}_\rho \mathbf{x}' + |\mathbf{k}^{(j)}_\rho \mathbf{x}'|)\left(\frac{|\mathbf{k}^{(j)}|}{|\mathbf{k}^{(j)}_\rho|}\right)^2. \tag{3}$$

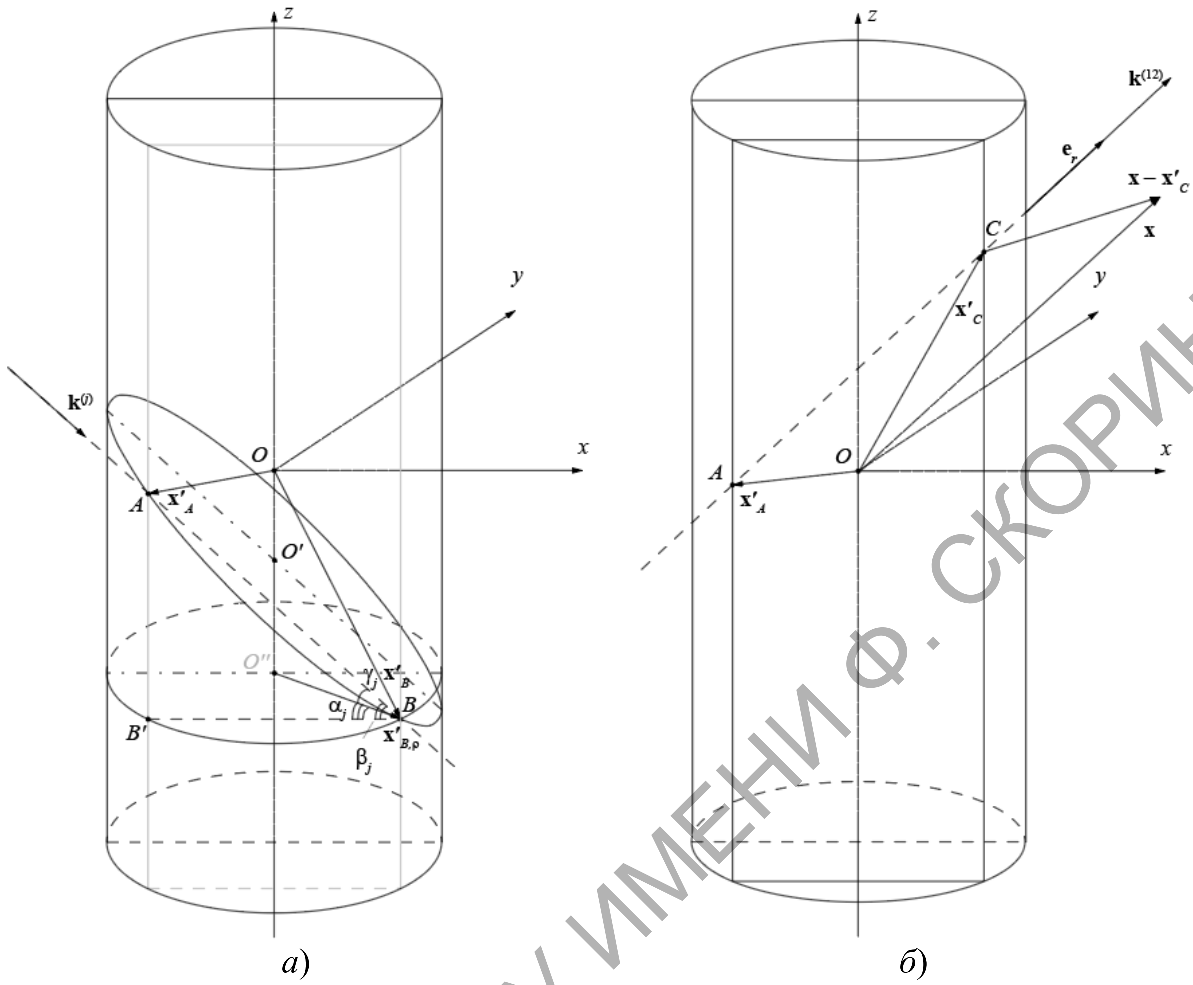

Рисунок 1 – Схемы распространения волн через боковую поверхность цилиндрической частицы: *а*) волновой вектор падающей волны; *б*) волновой вектор генерируемой волны

Определим фазу генерируемой волны. Пусть в поверхностном слое частицы генерируется волна, волновой вектор которой параллелен вектору $\mathbf{e}_r$. Единичный вектор $\mathbf{e}_r$ является встречным к направлению наблюдения, производящемуся из дальней зоны (рисунок 1, *б*).

Фаза волны, пришедшей из точки C к наблюдателю, находящемуся в дальней зоне, равна $\varphi^{(12)}_{lat,C}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'_C) = k_{12}\,|\mathbf{x} - \mathbf{x}'_C|$, где k_{12} – модуль волнового вектора $\mathbf{k}^{(12)}$ генерируемой волны. Фаза генерируемой волны, пришедшей к наблюдателю из точки A, равна $\varphi^{(12)}_{lat,A}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'_A) = k_{12}\,|\mathbf{x} - \mathbf{x}'_A| + \Delta\varphi^{(12)}_{lat}$. Здесь $\mathbf{x}$ – вектор, определяющий положение наблюдателя относительно начала координат, а векторами $\mathbf{x}'_C$ и $\mathbf{x}'_A$ определено положение элементов поверхности цилиндрической частицы (точек C и A соответственно) относительно начала координат. Аналогично предыдущим рассуждениям, запишем выражения для сдвига фазы и фазы в точке A для генерируемой волны:

$$\Delta\varphi_{lat}^{(12)}(\mathbf{x}'_A) = -2(\eta_{12}-1)\,\mathbf{k}_\rho^{(12)}\mathbf{x}'_A\left(\frac{|\mathbf{k}^{(12)}|}{|\mathbf{k}_\rho^{(12)}|}\right)^2, \tag{4}$$

$$\varphi_{lat,A}^{(12)}(\mathbf{x},\mathbf{x}'_A) = k_{12}\,|\mathbf{x}-\mathbf{x}'_A| - 2(\eta_{12}-1)\,\mathbf{k}_\rho^{(12)}\mathbf{x}'_A\left(\frac{|\mathbf{k}^{(12)}|}{|\mathbf{k}_\rho^{(12)}|}\right). \tag{5}$$

Так как скалярное произведение $\mathbf{k}_\rho^{(12)}\mathbf{x}'_A$ отрицательное, а сдвиг фазы должен быть положительным, в выражении присутствует знак минус. Аналогично предыдущим рассуждениям, объединим полученные выражение для фаз в точках C и A и воспользуемся приближением дальней зоны [2]:

$$\varphi_{lat}^{(12)}(\mathbf{x},\mathbf{x}') = k_{12}\,|\mathbf{x}-\mathbf{x}'| + (\eta_{12}-1)\,(-\mathbf{k}_\rho^{(12)}\mathbf{x}' + |\mathbf{k}_\rho^{(12)}\mathbf{x}'|)\left(\frac{|\mathbf{k}^{(12)}|}{|\mathbf{k}_\rho^{(12)}|}\right)^2. \tag{6}$$

2 Выражения для вектора напряжённости электрического поля суммарной частоты. Для определения напряжённости электрического поля генерируемой волны запишем выражения для напряжённостей падающих электромагнитных волн, с учётом (3):

$$\mathbf{E}_{lat}^{(j)}(\mathbf{x}') = \frac{2}{\eta_j+1}\mathbf{e}^{(j)}E_j\exp\left(i\mathbf{k}^{(j)}\mathbf{x}' + i(\eta_j-1)(\mathbf{k}_\rho^{(j)}\mathbf{x}' + |\mathbf{k}_\rho^{(j)}\mathbf{x}'|)\left(\frac{|\mathbf{k}^{(j)}|}{|\mathbf{k}_\rho^{(j)}|}\right)^2\right), \tag{7}$$

где j принимает значения 1 и 2. Для удобства в (7) опущена временная часть.

Причиной генерации суммарной частоты в дипольной модели является наличие нелинейной части поляризации [3]. Учитывая (6) и (7), запишем выражение для компонент вектора напряжённости электрического поля генерируемого излучения:

$$E_{lat,i}^{(12)}(\mathbf{x}) = 2\pi\mu_{12}\frac{\omega_{12}^2}{c^2}\frac{\exp(ik_{12}r)}{r}ad_0hE_1E_2(\delta_{im} - e_{r,i}e_{r,m})\mathrm{X}_{lat,mjk}^{(2)}e_j^{(1)}e_k^{(2)}. \tag{8}$$

Здесь $\mathrm{X}_{lat,mjk}^{(12)}$ – эффективная восприимчивость, которая определяется по формуле

$$\mathrm{X}^{(12)}_{lat,mjk} = \frac{1}{2\pi h}\left(\frac{2}{\eta_1+1}\right)\left(\frac{2}{\eta_2+1}\right)\frac{\sin(q_z h/2)}{q_z h/2}\int\limits_{2\pi}\exp[i\Phi_{lat}(\mathbf{n})]\chi^{(2)}_{mjk}(\mathbf{n})d\varphi', \quad (9)$$

где $\Phi_{lat}(\mathbf{n})$ определяется следующим образом:

$$\begin{aligned}\Phi_{lat}(\mathbf{n}) = a\mathbf{q}_\rho\mathbf{n} + a(\eta_{12}-1)(-\mathbf{k}^{(12)}_\rho\mathbf{n} + |\mathbf{k}^{(12)}_\rho\mathbf{n}|)\left(\frac{|\mathbf{k}^{(12)}|}{|\mathbf{k}^{(12)}_\rho|}\right)^2 + \\ + a(\eta_1-1)(\mathbf{k}^{(1)}_\rho\mathbf{n} + |\mathbf{k}^{(1)}_\rho\mathbf{n}|)\left(\frac{|\mathbf{k}^{(1)}|}{|\mathbf{k}^{(1)}_\rho|}\right)^2 + a(\eta_2-1)(\mathbf{k}^{(2)}_\rho\mathbf{n} + |\mathbf{k}^{(2)}_\rho\mathbf{n}|)\left(\frac{|\mathbf{k}^{(2)}|}{|\mathbf{k}^{(2)}_\rho|}\right)^2.\end{aligned} \quad (10)$$

Заключение. В работе предложена модель генерации суммарной частоты в поверхностном слое диэлектрической сферической частицы с использованием приближения ВКБ. На основе описанной модели с использованием численного интегрирования можно определить напряжённость электрического поля генерируемого излучения и использовать полученные результаты при планировании экспериментального исследования генерации суммарной частоты в поверхностном слое диэлектрических частиц цилиндрической формы**.**

Литература

1. Size dependence of second-harmonic generation at the surface of microspheres / S. Viarbitskaya [et al.] // Physical Review A. – 2010. – Vol. 81, Iss. 5. – P. 053850.

2. Шамына, А. А. Генерация суммарной частоты от тонкого сферического слоя. I. Аналитическое решение / А. А. Шамына, В. Н. Капшай // Оптика и спектроскопия. – 2018. – Т. 124, № 6. – С. 795–803.

3. Шамына, А. А. Генерация суммарной частоты от тонкого сферического слоя. II. Анализ решения / А. А. Шамына, В. Н. Капшай // Оптика и спектроскопия. – 2018. – Т. 125, № 1. – С. 71–78.