= ФИЗИКА -

УДК 537.87, 535.5

DOI: https://doi.org/10.54341/20778708\_2022\_3\_52\_22 EDN: CERJIG

# ГЕНЕРАЦИЯ ВОЛН СУММАРНОЙ ЧАСТОТЫ В ПОВЕРХНОСТНОМ СЛОЕ СФЕРИЧЕСКОЙ ЧАСТИЦЫ

# В.Н. Капшай, Е.Д. Головин, А.А. Шамына

Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины

# GENERATION OF SUM-FREQUENCY WAVES IN THE SURFACE LAYER OF A SPHERICAL PARTICLE

# V.N. Kapshai, E.D. Golovin, A.A. Shamyna

### Francisk Skorina Gomel State University

Аннотация. В приближении Вентцеля – Крамерса – Бриллюэна численно решена задача о генерации волн суммарной частоты в поверхностном оптически нелинейном слое диэлектрической сферической частицы, помещённой в диэлектрик, при её облучении двумя плоскими эллиптически поляризованными электромагнитными волнами. Произведён анализ зависимости пространственного распределения генерируемого излучения от независимых компонент тензора нелинейной диэлектрической остраимости поверхностного слоя и от размера частицы. Выделены отличия и сходство результатов, полученных на основе моделей Вентцеля – Крамерса – Бриллюэна и Релея – Ганса – Дебая.

Ключевые слова: генерация суммарной частоты, модель Вентцеля – Крамерса – Бриллюэна, модель Релея – Ганса – Дебая, диаграммы направленности.

Для цитирования: *Капшай*, *В.Н.* Генерация волн суммарной частоты в поверхностном слое сферической частицы / В.Н. Капшай, Е.Д. Головин, А.А. Шамына // Проблемы физики, математики и техники. – 2022. – № 3 (52). – С. 22–27. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708\_2022\_3\_52\_22. – EDN: CERJIG

Abstract. Within the Wentzel – Kramers – Brillouin approximation, a numerical solution was obtained for the problem of the sum-frequency waves generation in a surface optically nonlinear layer of a dielectric spherical particle placed in a dielectric when it is irradiated with two plane elliptically polarized electromagnetic waves. The dependence of the spatial distribution of the generated radiation on the independent components of the nonlinear dielectric susceptibility tensor of the surface layer and on the particle size is analyzed. The differences and similarities of the results obtained on the basis of the Wentzel – Kramers – Brillouin and Rayleigh – Hans – Debye models are highlighted.

**Keywords:** sum-frequency generation, Wentzel – Kramers – Brillouin model, Rayleigh – Gans – Debye model, directional patterns.

For citation: Kapshai, V.N. Generation of sum-frequency waves in the surface layer of a spherical particle / V.N. Kapshai, E.D. Golovin, A.A. Shamyna // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2022. – № 3 (52). – P. 22–27. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708\_2022\_3\_52\_22 (in Russian). – EDN: CERJIG

### Введение

Нелинейные оптические явления второго порядка в настоящее время привлекают внимание учёных различных отраслей науки. Примерами практического применения таких явлений могут служить исследования свойств капель воды, адсорбированных поверхностно активных веществ, биополимеров, коллоидных объектов, молекул ДНК и мембран биологических клеток [1]. Среди явлений нелинейной оптики, эффективно используемых для изучения свойств различных материалов, можно выделить генерацию второй гармоники, суммарной частоты, разностной частоты и другие.

Рассмотрим явление генерации суммарной частоты (ГСЧ) – преобразование излучения двух электромагнитных волн, распространяющихся в веществе, в результате которого формируется электромагнитная волна, частота которой равна

сумме частот этих волн. Это явление можно наблюдать в объектах, которым характерна анизотропия свойств; в числе таких объектов – слои на границах раздела сред и тонкие плёнки. В соответствии с дипольной моделью, нелинейный сигнал генерируется преимущественно объектами, не имеющими центра симметрии [2], – генерация в их объёме невозможна, что обусловливает эффективность регистрации и практического применения ГСЧ для исследования свойств поверхностей и тонких плёнок.

Для описания явления ГСЧ разработано несколько моделей: нелинейная модель Релея – Ганса – Дебая (РГД) [3], [4], нелинейная модель Вентцеля – Крамерса – Бриллюэна (ВКБ) [3], [4], нелинейная модель на основе точного решения задачи Ми [5]. Далее в работе рассмотрим явление генерации суммарной частоты в приближении ВКБ. В этой модели, в отличие от модели РГД, учитывается изменение фазы электромагнитных волн при их распространении в объёме диэлектрических частиц, вследствие чего повышается точность вычислений, особенно при описании генерации в диэлектрических частицах, размеры которых больше, чем длина волны падающего излучения. Особенностью используемой нами модели является то, что преломление электромагнитных волн на границах раздела сред не учитывается. Применимость такого подхода подтверждена экспериментально в статье [3].

# 1 Постановка задачи и определение фаз волн в дальней зоне

Расположим диэлектрическую сферическую частицу радиуса а, на поверхности которой локализован оптически нелинейный слой (толщина его  $d_0$  мала по сравнению с радиусом частицы), совмещая её центр с началом координат (рисунок 1.1). Пусть на частицу падают две волны, характеризующиеся частотами ω<sub>1</sub> и ω<sub>2</sub> и волновыми векторами  $\mathbf{k}^{(1)}$  и  $\mathbf{k}^{(2)}$ , расположенными в плоскости *уОz* под углами  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$  к оси *Oz* соответственно, а вектор  $\mathbf{k}^{(1)} + \mathbf{k}^{(2)}$  направлен вдоль оси Oz;  $e^{(1)}$  и  $e^{(2)}$  – единичные векторы, характеризующие азимут поляризации падающих волн; σ<sub>1</sub> и σ<sub>2</sub> – величины, характеризующие их эллиптичность и равные отношению длин малой и большой полуосей эллипса поляризации. В результате будет наблюдаться генерация электромагнитных волн, частоту которых обозначим символами  $\omega_{12}$ , а волновой вектор, зависящий от направления наблюдения, – символами  $\mathbf{k}^{(12)}$ . Введём также переменные η1, η2 и η12, каждая из

которых равна отношению показателя преломления частицы к показателю преломления окружающей её среды (соответственно при частоте  $\omega_1$ ,  $\omega_2$  и  $\omega_{12}$ ).



Рисунок 1.1 – Схема задачи о генерации суммарной частоты

Для вычисления компонент векторов электрической напряжённости падающих и генерируемой электромагнитных волн, найдём фазу каждой из этих волн с учётом сдвига, обусловленного различием показателей преломления веществ частицы и окружающей среды. Рассмотрим произвольный луч падающей электромагнитной волны с частотой  $\omega_1$ , проходящий через поверхность частицы в точках A и B (рисунок 1.2, a). Тогда фазы волны в точках A и B равны  $\phi_4^{(1)}(\mathbf{x}'_4) = \mathbf{k}^{(1)}\mathbf{x}'_4$ 

и

$$\varphi_{R}^{(1)}(\mathbf{x}_{R}') = \mathbf{k}^{(1)}\mathbf{x}_{R}' + 2(\eta_{1}-1)\mathbf{k}^{(1)}\mathbf{x}_{R}'$$

соответственно. Подберём такое обобщающее выражение для фазы, чтобы её значение в точке A было равно  $\phi_4^{(1)}$ , а в точке  $B - \phi_8^{(1)}$ . Получим:

$$\varphi_1(\mathbf{x}') = \mathbf{k}^{(1)}\mathbf{x}' + (\eta_1 - 1)(\mathbf{k}^{(1)}\mathbf{x}' + |\mathbf{k}^{(1)}\mathbf{x}'|). \quad (1.1)$$



Problems of Physics, Mathematics and Technics, № 3 (52), 2022

Проведя аналогичные рассуждения для волны, частота которой равна  $\omega_2$ , запишем её фазу:

$$\varphi_2(\mathbf{x}') = \mathbf{k}^{(2)}\mathbf{x}' + (\eta_2 - 1)(\mathbf{k}^{(2)}\mathbf{x}' + |\mathbf{k}^{(2)}\mathbf{x}'|).$$
 (1.2)

Определим фазу генерируемой волны. Пусть в поверхностном слое частицы генерируется волна, характеризующаяся частотой  $\omega_{12}$  и волновым вектором  $\mathbf{k}^{(12)}$ , параллельным вектору  $\mathbf{e}_r$ , встречному к направлению наблюдения (рисунок 2,  $\delta$ ). Фаза волны, пришедшей из точки A к наблюдателю, находящемуся в дальней зоне, равна  $\varphi_A^{(12)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'_A) = k_{12} |\mathbf{x} - \mathbf{x}'_A|$ , где  $k_{12}$  – модуль волнового вектора  $\mathbf{k}^{(12)}$  генерируемой волны. Фаза генерируемой волны, пришедшей к наблюдателю из точки C, равна

$$\varphi_B^{(12)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'_C) = k_{12} |\mathbf{x} - \mathbf{x}'_C| - 2(\eta_{12} - 1) \mathbf{k}^{(12)} \mathbf{x}'_C.$$

Здесь  $\mathbf{x}$  – вектор, определяющий положение наблюдателя относительно начала координат, а векторами  $\mathbf{x}'_A$  и  $\mathbf{x}'_C$  определено положение элементов поверхности сферической частицы (точек A и C соответственно) относительно начала координат. Как и ранее, подберём обобщающее выражение для фазы:

$$\begin{split} \phi_{12}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= k_{12} \, | \, \mathbf{x} - \mathbf{x}' | + \\ &+ (\eta_{12} - 1) (-\mathbf{k}^{(12)} \mathbf{x}' + | \mathbf{k}^{(12)} \mathbf{x}' |). \end{split} \tag{1.3}$$

Преобразуем выражение (1.3) применительно к дальней зоне волнового поля, учитывая, что

$$|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| = \sqrt{|\mathbf{x}|^2 + |\mathbf{x}'|^2 - 2|\mathbf{x}||\mathbf{x}'|\cos\alpha} \approx$$
$$\approx |\mathbf{x}| \left(1 - 2\frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}'}{|\mathbf{x}|^2}\right)^{1/2} \approx$$
$$\approx |\mathbf{x}| \left(1 - \frac{|\mathbf{x}|}{|\mathbf{x}|^2} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{x}')\right) = |\mathbf{x}| - \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}',$$
$$|\mathbf{x}'| << |\mathbf{x}|.$$
(1.4)

Здесь  $\mathbf{n}$  — единичный вектор, направленный вдоль вектора  $\mathbf{x}$ ,  $\alpha$  — угол между векторами  $\mathbf{x}$  и  $\mathbf{x}'$ . Тогда формулу (1.3) можно записать в виде

$$\varphi_{12}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = k_{12} |\mathbf{x}| + \varphi_{12}'(\mathbf{x}') =$$
  
=  $k_{12} |\mathbf{x}| - \mathbf{k}^{(12)} \mathbf{x}' + (\eta_{12} - 1)(-\mathbf{k}^{(12)} \mathbf{x}' + |\mathbf{k}^{(12)} \mathbf{x}'|).$  (1.5)

Воспользуемся полученными соотношениями (1.1), (1.2), (1.5) и выразим напряжённость электрического поля генерируемой волны через напряжённости электрического поля падающих волн.

### 2 Выражения для вектора напряжённости электрического поля суммарной частоты

При использовании дипольной модели причину генерации суммарной частоты связывают с наличием нелинейной части поляризации

$$P_i^{(2)} = \chi_{ijk}^{(2)} E_j^{(1)} E_k^{(2)}, \qquad (2.1)$$

где  $\chi^{(2)}_{ijk}$  – тензор нелинейной диэлектрической восприимчивости второго порядка [6], который применительно к рассматриваемой задаче можно представить в виде

$$\chi_{ijk}^{(2)} = \chi_1^{(2)} n_i n_j n_k + \chi_2^{(2)} n_i \delta_{jk} + \chi_3^{(2)} n_j \delta_{ki} + \chi_4^{(2)} n_k \delta_{ij} + \chi_5^{(2)} n_m n_i \varepsilon_{mjk} + \chi_6^{(2)} n_m n_k \varepsilon_{ijm} + (2.2) + \chi_7^{(2)} n_m n_j \varepsilon_{imk}.$$

Здесь  $n_i$ ,  $n_j$ ,  $n_k$ ,  $n_m$  – компоненты вектора **n**, перпендикулярного элементу поверхности сферы (индексы *i*, *j*, *k*, *m* принимают значения *x*, *y*, *z*);  $\delta_{jk}$ ,  $\delta_{ki}$ ,  $\delta_{ij}$  – дельта-символы Кронекера,  $\varepsilon_{mjk}$ ,  $\varepsilon_{ijm}$ ,  $\varepsilon_{imk}$  – символы Леви – Чивита,  $\chi_p^{(2)}$  ( $1 \le p \le 7$ ) – значения независимых компонент тензора нелинейной диэлектрической восприимчивости; по повторяющимся символам *m* ведётся суммирование.

Выражениям для напряжённостей падающих электромагнитных волн с учётом (1.1) и (1.2) придадим вид (временную часть  $exp(-i\omega t)$  будем опускать):

$$\mathbf{E}^{(1)}(\mathbf{x}') = \frac{2}{\eta_1 + 1} \mathbf{e}^{(1)} E_1 \exp(i\mathbf{k}^{(1)}\mathbf{x}' + (2.3))$$
  
+ $i(\eta_1 - 1)(\mathbf{k}^{(1)}\mathbf{x}' + |\mathbf{k}^{(1)}\mathbf{x}'|)),$   
$$\mathbf{E}^{(2)}(\mathbf{x}') = \frac{2}{\eta_2 + 1} \mathbf{e}^{(2)} E_2 \exp(i\mathbf{k}^{(2)}\mathbf{x}' + (2.4))$$
  
+ $i(\eta_2 - 1)(\mathbf{k}^{(2)}\mathbf{x}' + |\mathbf{k}^{(2)}\mathbf{x}'|)).$  (2.4)

В уравнениях Максвелла учтём формулу (1.5) и получим выражения для векторов, соответствующих индукции магнитного и напряжённости электрического полей генерируемой волны в дальней зоне [7]:

$$\mathbf{B}^{(12)}(\mathbf{x}) = \operatorname{rot} \mathbf{A}^{(12)}(\mathbf{x}) \approx$$

$$\approx \mu_{12} \frac{\omega_{12}^2}{c^2} \frac{\exp(ik_{12}r)}{r} \times \qquad (2.5)$$

$$\times \left[ \mathbf{e}_r \times \int_{V} \exp(i\varphi_{12}'(\mathbf{x}')) \mathbf{P}^{(12)}(\mathbf{x}') d^3 \mathbf{x}' \right],$$

$$\mathbf{E}^{(12)}(\mathbf{x}) = \frac{i}{\left(\frac{\omega_{12}}{c} \varepsilon_{12} \mu_{12}\right)} \operatorname{rot} \mathbf{B}^{(12)}(\mathbf{x}) \approx$$

$$\approx \mu_{12} \frac{\omega_{12}^2}{c^2} \frac{\exp(ik_{12}r)}{r} \times \qquad (2.6)$$

$$(1 - \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) \int \exp(i\varphi_{12}'(\mathbf{x}')) \mathbf{P}^{(12)}(\mathbf{x}') d^3 \mathbf{x}',$$

где  $\epsilon_{12}$  и  $\mu_{12}$  – соответственно диэлектрическая и магнитная проницаемости среды на частоте  $\omega_{12}$ .

Подставим (2.3) и (2.4) в (2.1), и затем – вместе с полученным при этом выражением нелинейной части поляризации – в (2.6), и после выполнения интегрирования по r' запишем выражение напряжённости поля суммарной частоты в дальней зоне, соответствующее модели ВКБ:

$$E_{i}^{(12)}(\mathbf{x}) = 4\pi\mu_{12}\frac{\omega_{12}^{2}}{c^{2}}\frac{\exp(ik_{12}r)}{r} \times d_{0}a^{2}E_{1}E_{2}(\delta_{im} - e_{r,i}e_{r,m})X_{mjk}^{(12)}e_{j}^{(1)}e_{k}^{(2)},$$
(2.7)

где  $\mathbf{X}_{ijk}^{(12)}$  – эффективная восприимчивость [7], которую можно определить по формуле

Проблемы физики, математики и техники, № 3 (52), 2022

$$X_{ijk}^{(12)} = \frac{1}{4\pi} \left( \frac{2}{\eta_1 + 1} \right) \left( \frac{2}{\eta_2 + 1} \right) \times$$

$$\times \int_{4\pi} \Phi(\mathbf{x}') \chi_{ijk}^{(2)}(\mathbf{x}') d\Omega_{\mathbf{x}'},$$

$$\Phi(\mathbf{x}') =$$
(2.8)

$$= \exp(i\mathbf{q}\mathbf{x}' + i(\eta_{12} - 1)(-\mathbf{k}^{(12)}\mathbf{x}' + |\mathbf{k}^{(12)}\mathbf{x}'|)) \times \\ \times \exp(i(\eta_1 - 1)(\mathbf{k}^{(1)}\mathbf{x}' + |\mathbf{k}^{(1)}\mathbf{x}'|) + \\ + i(\eta_2 - 1)(\mathbf{k}^{(2)}\mathbf{x}' + |\mathbf{k}^{(2)}\mathbf{x}'|)).$$
(2.9)

Здесь  $\mathbf{q} = \mathbf{k}^{(1)} + \mathbf{k}^{(2)} - \mathbf{k}^{(12)}$  – вектор рассеяния [8]. Введём в рассмотрение величину  $s^{(12)}(\theta, \phi)$ ,

Введем в рассмотрение величину *s*<sup>(1)</sup> (θ, φ), прямо пропорциональную вектору Умова – Пойнтинга генерируемой волны, посредством соотношения

$$s^{(12)}(\theta, \phi) = |(1 - \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r)\mathbf{f}^{(12)}(\theta, \phi)|^2,$$
 (2.10)

компоненты вектора  $\mathbf{f}^{(12)}$  ( $\theta, \phi$ ), содержащегося в (2.10), можно вычислить по формуле

$$f_i^{(12)}(\theta, \phi) = X_{ijk}^{(12)}(\theta, \phi) e_j^{(1)} e_k^{(2)}.$$
 (2.11)

Величину  $s^{(12)}(\theta, \phi)$  будем использовать далее при анализе полученных результатов.

## 3 Графический анализ

Сравним рассчитанные на основе модели ВКБ пространственные распределения мощности излучения суммарной частоты, характерные для каждого из типов анизотропии, с распределениями мощности, полученными в [8] на основе модели РГД. Для этого построим трёхмерные диаграммы направленности (ДН) плотности мощности генерируемого излучения, соответствующие обеим моделям. При построении диаграмм выберем значения параметров  $k_1 a = 0, 1$ ,  $k_2a = 0,2, \ \gamma = 0,5, \ \sigma_1 = 0,5, \ \sigma_2 = 0,5, \ \phi_1 = 1, \ \phi_2 = -1,$ соответствующие частице малых размеров по сравнению с длиной волны падающего излучения, и показатель дисперсии  $\xi = 1,34 / 1,33$ , определённый через показатели преломления воды, относящиеся к излучению с длинами волн 425 и 850 нм. Падающие волны имеют правую эллиптическую поляризацию. Значения относительных показателей преломления на частотах  $\omega_1, \omega_2$  и  $\omega_{12}$ равны соответственно  $\eta_1 = 1,3, \eta_2 = 1,3$  и  $\eta_{12} = 1,3$ . Рассчитанные ДН построены на рисунке 2.1. Полупрозрачные фигуры соответствуют модели РГД, непрозрачные – модели ВКБ.

Анализируя рисунок 2.1 видим, что при варьировании значений коэффициентов анизотропии форма диаграммы направленности излучения суммарной частоты, генерируемого в поверхностном слое частицы малых размеров, изменяется. При значениях компонент тензора диэлектрической восприимчивости  $\chi_2^{(2)} \neq 0$ ,  $\chi_{1,3-7}^{(2)} = 0$  трёхмерная диаграмма направленности симметрична относительно оси *Oz*.



Рисунок 2.1 – Диаграммы направленности излучения суммарной частоты, рассчитанные на основе моделей ВКБ и РГД. Независимые компоненты тензора диэлектрической восприимчивости: *a*)  $\chi_1^{(2)} \neq 0$ ,  $\chi_{2-7}^{(2)} = 0$ ; *b*)  $\chi_2^{(2)} \neq 0$ ,  $\chi_{1,3-7}^{(2)} = 0$ ; *b*)  $\chi_3^{(2)} \neq 0$ ,  $\chi_{1-2,4-7}^{(2)} = 0$ ; *c*)  $\chi_4^{(2)} \neq 0$ ,  $\chi_{1-3,5-7}^{(2)} = 0$ ; *b*)  $\chi_{5-7}^{(2)} \neq 0$ ,  $\chi_{1-4}^{(2)} = 0$ ; *c*)  $\chi_{1-4}^{(2)} = 0$ 

Problems of Physics, Mathematics and Technics, № 3 (52), 2022

При сравнении полученных результатов видим, что диаграммы направленности, рассчитанные на основе моделей ВКБ и РГД, одинаковы по форме, но во всех направлениях в пространстве отличаются числовым значением плотности мощности генерируемого излучения – при всех использованных комбинациях составляющих тензора нелинейной диэлектрической восприимчивости плотность мощности, рассчитанная на основе модели ВКБ, меньше рассчитанной с применением модели РГД.

При наличии у тензора диэлектрической восприимчивости некиральных составляющих значения плотности мощности, рассчитанные на основе модели РГД, близки к значениям, найденным на основе модели ВКБ, - во всех направлениях. При неравных нулю составляющих указанного тензора, ответственные за киральные свойства частицы, различия плотностей мощности, рассчитанных с использованием обеих моделей, более значительны. Это обусловлено учётом отражения на границах раздела (в формуле (2.8) содержится сомножитель 4 /  $(\eta_1 + 1)(\eta_2 + 1)$ ) и дополнительной разности хода, возникающей при распространении падающих и генерируемых волн внутри сферической частицы (в приближении ВКБ она учтена посредством множителя (2.9), содержащегося в (2.8) в подынтегральной функции). Величина разности хода, а также отношение плотностей мощности генерируемого излучения в каждом выбранном направлении зависит от отношения показателей преломления среды и частицы  $\eta_1$ ,  $\eta_2$  и  $\eta_{12}$ .

Для оценки влияния размера частицы на ДН, рассчитанные с использованием обеих рассматриваемых моделей, на рисунке 2.2,  $a) - \partial$ ) проиллюстрируем результаты, полученные для частиц большего размера ( $k_1a = 1,0, k_2a = 2,0$ ). Полупрозрачные графики соответствуют модели РГД, непрозрачные – модели ВКБ.

При сравнении рисунков 2.1 и 2.2 видим, что для больших и малых частиц ДН, соответствующие обеим моделям, отличаются. Наибольшие отличия заметны на фрагментах  $\varepsilon$ ),  $\varepsilon$ ) рисунков 2.1, 2.2: при увеличении размера частицы лепестки ДН поворачиваются на небольшой угол в направлении вектора  $\mathbf{k}^{(1)} + \mathbf{k}^{(2)}$ , а их угловая ширина уменьшается. На фрагментах  $\varepsilon$ ) рисунков 2.1, 2.2 диаграмма направленности также деформирована (лепестки повёрнуты в сторону вектора  $\mathbf{k}^{(1)} + \mathbf{k}^{(2)}$ ), но направление оси симметрии ДН осталось прежним.



Рисунок 2.2 – Диаграммы направленности излучения суммарной частоты, соответствующие частицам большого размера ( $k_1a = 1,0, k_2a = 2,0$ ), рассчитанные на основе моделей ВКБ и РГД. Независимые компоненты тензора диэлектрической восприимчивости: *a*)  $\chi_1^{(2)} \neq 0$ ,  $\chi_{2-7}^{(2)} = 0$ ; *b*)  $\chi_2^{(2)} \neq 0$ ,  $\chi_{1,3-7}^{(2)} = 0$ ; *b*)  $\chi_3^{(2)} \neq 0$ ,  $\chi_{1-2,4-7}^{(2)} = 0$ ; *c*)  $\chi_4^{(2)} \neq 0$ ,  $\chi_{1-3,5-7}^{(2)} = 0$ ; *b*)  $\chi_{1-4}^{(2)} = 0$ ; *c*)  $\chi_{5-7}^{(2)} \neq 0$ ,  $\chi_{1-4}^{(2)} = 0$ 

При сравнении результатов, полученных на основе моделей РГД и ВКБ для частиц разных размеров, заметим, что во всех выбранных частных ситуациях ДН подобны по форме, но в случае более крупных диэлектрических частиц значения плотности мощности излучения суммарной частоты, генерируемого в каждом направлении, различаются более существенно, чем в случае частиц меньшего размера.

Для оценки влияния относительного показателя преломления граничащих сред на форму диаграммы направленности построим трёхмерные ДН излучения суммарной частоты для частицы малого ( $k_1a = 0,1, k_2a = 0,2$ ) и большого  $(k_1a = 1,0, k_2a = 2,0)$  размера, рассчитанные при разных значениях относительных показателей преломления частицы и окружающей среды в предположении о том, что тензор диэлектрической восприимчивости  $\chi^{(2)}_{ijk}$  содержит только киральные составляющие:  $\chi_{1-4}^{(2)} = 0$ ,  $\chi_{5-7}^{(2)} \neq 0$ . На рисунках 2.1, e) и 2.2, e) внутренние ДН построены на основе модели ВКБ при значениях относительных показателей преломления  $\eta_1 = 1,3, \eta_2 = 1,3,$  $\eta_{12} = 1$ , промежуточные – при значениях  $\eta_1 = 1, 1,$  $\eta_2 = 1, 1, \ \eta_{12} = 1, 1, \ a$  внешние – ДН, соответствующие модели РГД при значениях  $\eta_1 = 1,0$ ,  $\eta_2 = 1,0, \eta_{12} = 1,0.$  Значения остальных параметров были выбраны такими же, как и ранее.

На рисунке 2.2, *e*) видно, что при приближении к единице относительного показателя преломления η пары «частица – среда» подобие формы ДН, рассчитанных на основе моделей ВКБ и РГД, усиливается и, кроме того, при ненулевых значениях киральных составляющих тензора диэлектрической восприимчивости увеличивается значение максимальной плотности мощности излучения суммарной частоты, а также угол θ, соответствующий направлению, в котором оно наблюдается.

### Заключение

В настоящей работе на основе приближения Вентцеля – Крамерса – Бриллюэна определены фазы падающих и генерируемых волн, получено выражение для вектора напряжённости электрического поля генерируемого излучения в приближении дальней зоны, которое использовано в целях расчёта плотности мощности генерируемого излучения суммарной частоты методом численного интегрирования. Пространственное распределение поля суммарной частоты иллюстрировано на 3D диаграммах направленности. По итогам графического анализа сделан вывод, что диаграммы направленности, рассчитанные на основе моделей ВКБ и РГД, близки по форме, но отличаются значениями плотности мощности. Причины этого различия обусловлены учётом в первой модели отражения на границе раздела сред и набега фаз в объёме частицы, отличающейся

показателем преломления от окружающей её среды. При увеличении размера частицы отличия в диаграммах направленности, имеющие место при использовании указанных моделей, становятся более выраженными.

Результаты, полученные в настоящей статье, могут быть использованы при планировании экспериментального исследования генерации суммарной частоты с поверхности диэлектрических частиц сферической формы, а также в целях теоретического и экспериментального исследования ГСЧ частицами более сложной формы: эллипсоидальной, цилиндрической и др. В продолжение исследований требуется определить предельные значения линейных размеров частиц, при превышении которых точность расчетов на основе приближения РГД становится недостаточной и необходимо использовать приближение ВКБ.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Label-free spectroscopic detection of vesicles in water using vibrational sum frequency scattering / M.L. Strader [et al.] // Soft Matter. – 2011. – Vol. 7, № 10. – P. 4959–4963.

2. *de Beer*, *A.G.F.* Second harmonic generation from the surface of centrosymmetric particles in bulk solution / A.G.F de Beer, S. Roke // Physical Review B. – 2007. – Vol. 75. – P. 245438.

3. Size dependence of second-harmonic generation at the surface of microspheres / S. Viarbitskaya [et al.] // Physical Review A. -2010. - Vol. 81, No 5. - P. 053850.

4. *Roke*, *S*. Nonlinear optical scattering: The concept of effective susceptibility / S. Roke, M. Bonn, A.V. Petukhov // Physical Review B. – 2004. – Vol. 70, № 11. – P. 115106.

5. Molecular Mie model for second harmonic generation and sum frequency generation / S. Wunderlich [et al.] // Physical Review B. – 2011. – Vol. 84. – P. 235403.

6. Шамына, А.А. Генерация суммарной частоты от тонкого цилиндрического слоя / А.А. Шамына, В.Н. Капшай // Оптика и спектроскопия. – 2018. – Т. 124, № 1. – С. 105–121.

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

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

Поступила в редакцию 07.02.2022.

#### Информация об авторах

Капшай Валерий Николаевич – к.ф.-м.н., доцент Головин Евгений Дмитриевич – студент

Шамына Антон Александрович – к.ф.-м.н.