

Федеральное государственное бюджетное научное учреждение  
«Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики  
Российской академии наук»  
(ИПФ РАН)

На правах рукописи

Волковская Ирина Игоревна

ПОГЛОЩЕНИЕ И РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН  
МАЛЫМИ ЧАСТИЦАМИ И СИСТЕМАМИ ИЗ НИХ

1.3.4 — радиофизика

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
доктор физико-математических наук  
доцент Рыбаков Кирилл Игоревич

Нижний Новгород — 2022

## Оглавление

	Стр.
<b>Введение</b> . . . . .	4
<b>Глава 1. Электродинамическое описание малых частиц в поле электромагнитной волны</b> . . . . .	11
1.1 Описание рассеяния электромагнитной волны на сферической частице низшими дипольными модами . . . . .	14
1.1.1 ТЕ-мода (магнитодипольная) . . . . .	15
1.1.2 ТМ-мода (электродипольная) . . . . .	19
1.2 Резонансное рассеяние и поглощение низших дипольных мод . . .	20
1.2.1 Сравнение с квазистатическим дипольным приближением	22
1.2.2 Описание дипольных резонансов сферической частицы Лоренцевой кривой . . . . .	23
1.2.3 Магнитодипольная мода. Сферическая частица в однородной среде . . . . .	27
1.2.4 Электродипольная мода (ТМ-поляризация) . . . . .	30
1.3 Заключение по Главе 1 . . . . .	31
<b>Глава 2. Электродинамическое описание мелкодисперсной среды</b>	33
2.1 Эффективная диэлектрическая проницаемость смеси . . . . .	36
2.2 Магнитная проницаемость среды из металлических сферических частиц . . . . .	39
2.2.1 Магнитный дипольный момент металлической сферической частицы в эффективной среде . . . . .	39
2.2.2 Уравнение на эффективную магнитную проницаемость смеси проводящих частиц . . . . .	41
2.2.3 Применимость дипольного приближения для поля снаружи металлической частицы в эффективной среде . .	43
2.2.4 Сравнение моделей эффективной магнитной проницаемости	44

2.3	Измерение коэффициента поглощения микроволнового излучения в керамических и композиционных материалах при высоких температурах . . . . .	47
2.4	Заключение по Главе 2 . . . . .	51
<b>Глава 3. Генерация оптических гармоник в субволновых диэлектрических резонаторах . . . . .</b>		
3.1	Мультипольное разложение электромагнитного поля в базисе векторных сферических гармоник для задач линейного и нелинейного рассеяния субволновыми объектами . . . . .	53
3.1.1	Мультипольное разложение электромагнитного поля . . . . .	56
3.1.2	Векторные сферические гармоники . . . . .	59
3.1.3	Излучение мультиполей . . . . .	63
3.2	Генерация второй гармоники сферическими наночастицами из AlGaAs и BaTiO <sub>3</sub> . . . . .	65
3.2.1	Лемма Лоренца . . . . .	69
3.2.2	Генерация второй гармоники частицами из AlGaAs . . . . .	71
3.2.3	Генерация второй гармоники частицами из BaTiO <sub>3</sub> . . . . .	75
3.3	Генерация второй гармоники наночастицами из GaAs, выращенными вдоль различных кристаллографических направлений . . . . .	79
3.3.1	Нелинейный отклик наноантенн из (111)-GaAs . . . . .	81
3.3.2	Нелинейный отклик наноантенн из (110)-GaAs . . . . .	91
3.4	Генерация второй гармоники при возбуждении высокодобротных резонансных состояний в диэлектрическом субволновом резонаторе	95
3.5	Особенности генерации третьей гармоники в наноструктурах из Si	108
3.5.1	Анизотропия генерации третьей гармоники кремниевыми наноструктурами . . . . .	109
3.5.2	Влияние поляризации накачки на генерацию третьей гармоники кремниевыми олигомерами . . . . .	112
3.6	Заключение по Главе 3 . . . . .	114
<b>Заключение . . . . .</b>		<b>116</b>
<b>Список литературы . . . . .</b>		<b>119</b>

## Введение

### Актуальность темы диссертации

Диссертационная работа посвящена исследованиям взаимодействия электромагнитных волн с частицами, малыми по сравнению с длиной падающей волны, а также упорядоченными и неупорядоченными системами из таких частиц. Интерес научного сообщества к широкому кругу задач поглощения и рассеяния электромагнитных волн, сопровождаемых нелинейными процессами при увеличении интенсивности падающего излучения, подтверждает актуальность выбранной темы. Создание новых материалов с заданными свойствами, новых источников излучения, устройств для управления световыми потоками и диагностики различных сред требует развития общего теоретического описания рассеяния волн на неоднородностях среды. Масштабная инвариантность уравнений Максвелла позволяет строить общую теорию и создавать справедливые для широкого диапазона частот аналитические модели, основанные на описании рассеяния дипольными откликами и в более общем случае на мультипольном разложении полей по сферическим гармоникам. Это отражено в данной работе на примерах задач в задачах определения эффективных диэлектрических и магнитных характеристик дисперсных сред для расчета поглощения микроволнового излучения керамическими композитами или металлическими порошковыми материалами, а также рассеяния и генерации гармоник в субволновых диэлектрических резонаторах для эффективного управления излучением в оптическом и инфракрасном диапазонах частот. Вопросы поглощения микроволнового излучения в металлических порошковых материалах приобретают актуальность в связи с развитием методов высокотемпературной микроволновой обработки материалов [1; 2]. Электродинамический расчет поглощения СВЧ-излучения в малых частицах и неоднородных средах, содержащих такие частицы, представляет не только практический, но и значительный методический интерес. Задачи моделирования диэлектрических характеристик мелкодисперсных смесей, включающих в свой состав проводящие фракции, возникают как при описании процессов высокотемпературной микроволновой обработки композитных и градиентных материалов, так и при разработке эффективных поглощающих сред для различных приложений микроволновых технологий, как

материаловедческих и технических (модификация свойств поверхностей, микроволновое соединение деталей), так и перспективных медико-биологических (избирательный нагрев тканей с введенным поглотителем). Знание высокотемпературных свойств материалов необходимо как для выполнения моделирования процессов микроволновой обработки материалов, так и для их успешной реализации на практике. Диэлектрические свойства могут изменяться в весьма широких пределах в зависимости даже от небольших отклонений в морфологии и примесном составе материалов. Поэтому имеющиеся в литературе данные (к тому же обычно весьма скудные) не дают возможности адекватно судить о свойствах конкретных материалов, имеющих в наличии, и единственным способом определить их является измерение. Развитие нанотехнологий стимулирует значительный интерес к исследованиям нелинейных оптических эффектов, возникающих при больших интенсивностях лазерного излучения в наноструктурах из диэлектрических и полупроводниковых материалов с высоким значением показателя преломления. Такие уникальные оптические свойства диэлектрических наночастиц, как малые диссипативные потери, оптический магнитный отклик и наличие множества мультипольных резонансов Ми типа [3], обеспечивают исключительные возможности для управления светом на субволновых масштабах, в том числе в нелинейном режиме. Создание аналитических и численных моделей для описания генерации второй и третьей гармоник диэлектрическими наночастицами с высоким показателем преломления (AlGaAs, GaAs, Si, BaTiO<sub>3</sub>) важно в связи с растущим числом экспериментов в условиях возбуждения мод Ми резонансов, проводимыми многими исследовательскими группами по всему миру [4–8].

Диссертация состоит из трех глав. Глава 1 посвящена электродинамическому описанию малых частиц в поле электромагнитной волны. Рассмотрены и проанализированы точные и приближенные методы расчета поглощения энергии электромагнитной волны при возбуждении низших дипольных мод, получены зависимости эффективности поглощения от диэлектрических свойств материала частиц, их размера и других параметров. Глава 2 посвящена электродинамическому описанию мелкодисперсных материалов с помощью моделей эффективной среды. Предложена новая модель расчета эффективных диэлектрической и магнитной проницаемостей смеси частиц на основе вычисления дипольного момента частицы в эффективной среде. Изложен метод и результаты

экспериментального определения коэффициента поглощения микроволнового излучения в керамических и композиционных материалах при высоких температурах. Глава 3 посвящена особенностям генерации оптических гармоник в диэлектрических и полупроводниковых резонансных наноструктурах (AlGaAs, GaAs, BaTiO<sub>3</sub>, Si). Изложена теория генерации второй гармоники лазерного излучения диэлектрическими частицами с анизотропным тензором объемной квадратичной нелинейной восприимчивости при возбуждении волной накачки низших (электро- и магнитодипольных) резонансов типа Ми. Изложена теория генерации оптических гармоник при возбуждении высокодобротных резонансных состояний в субволновых диэлектрических структурах пучками с осесимметричным состоянием поляризации.

**Цель работы** – развитие общего теоретического описания взаимодействия электромагнитного излучения с субволновыми объектами и системами из них, а также применение развитых подходов в задачах поглощения электромагнитных волн в мелкодисперсных средах или компактированных материалах, задачах рассеяния и генерации оптических гармоник резонансными диэлектрическими и полупроводниковыми наноструктурами.

Для достижения поставленной цели решались следующие **задачи**:

1. Создание новой модели эффективной среды для расчета магнитной проницаемости среды, содержащей металлические включения.
2. Измерение поглотительных свойств керамических материалов при высоких температурах.
3. Развитие теории генерации оптических гармоник субволновыми резонансными диэлектрическими структурами.

**Научная новизна:**

1. Предложена новая модель эффективной среды для определения эффективной комплексной магнитной проницаемости компактированных металлических порошковых сред.
2. Экспериментально получены температурные зависимости тангенса угла диэлектрических потерь пористых керамических и композитных материалов на основе оксида алюминия в широком диапазоне температур на частоте 24 ГГц, используемой для микроволновой обработки материалов.

3. Дано теоретическое описание нового экспериментального результата – анизотропии генерации третьей гармоники наноструктурами из аморфного кремния.
4. Предложена новая теоретическая модель для описания возникновения высокодобротных резонансных состояний в субволновых диэлектрических резонаторах на основе двух подходов: мультипольного анализа и теории связанных мод.

### **Методы исследования**

Исследование проводилось с использованием широко применяемых методов классической электродинамики, таких как методы теории дифракции, асимптотическое разложение полей и теории взаимодействия света с веществом. Основным методом исследования – аналитическое и численное решение уравнений Максвелла. Методы решения задач генерации оптических гармоник основаны на мультипольном разложении рассеиваемых и генерируемых полей по базису векторных сферических гармоник. Для получения аналитических выражений для мультипольных коэффициентов используется лемма Лоренца. Аналитические результаты подтверждаются дополнительно с помощью полноволнового численного трехмерного моделирования, основанного на методе конечных элементов.

### **Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Модель эффективной магнитной проницаемости металлодиэлектрических композиционных материалов, основанная на равенстве магнитного момента заданного объема эффективной среды суммарному магнитному моменту металлических частиц во внешнем высокочастотном магнитном поле, применима в широком диапазоне значений относительной объемной концентрации металлических частиц.
2. Эффективность генерации второй гармоники в субволновом цилиндрическом резонаторе из AlGaAs при одновременном возбуждении магнитооктупольного суперрезонансного состояния на основной частоте, формируемого благодаря сильной связи двух TE-поляризованных мод с азимутальным распределением электрического поля, и высокодобротной моды на частоте второй гармоники повышается на два порядка по сравнению со случаем возбуждения низших дипольных резонансов на основной частоте и достигает 1% для значений интенсивности падаю-

щего излучения порядка  $1 \text{ ГВт/см}^2$ . Эффективность генерации второй гармоники многократно возрастает при возбуждении резонатора лазерным пучком с азимутальной поляризацией по сравнению с линейно поляризованным излучением благодаря соответствию относительных вкладов магнитных мультиполей в составе полей накачки и возбуждаемых ТЕ-мод.

3. Анизотропия нелинейного отклика структур из кремниевых нанодисков (тримеров и квадрумеров) соответствует симметрии точечной группы структуры и достигается вращением поляризации нормально падающего излучения за счет возбуждения коллективных мод, суммарный магнитный дипольный момент которых лежит в плоскости структуры. Рассчитанная интенсивность генерации третьей гармоники при освещении квадрумера лазерным пучком с азимутальной поляризацией на два порядка больше, чем в случаях освещения пучками с радиальной или линейной поляризацией, благодаря возбуждению коллективной моды с магнитными дипольными моментами, ориентированными вдоль осей дисков.

### **Научная и практическая значимость**

Разработка нового метода расчета эффективной магнитной проницаемости среды имеет значительную практическую ценность с точки зрения применимости при построении численных моделей взаимодействия микроволнового излучения с разного рода мелкодисперсными материалами. Предлагаемые методы более эффективны для практического применения и позволяют приблизиться к более реалистичному описанию процессов микроволновой обработки материалов. Предложенная модель была использована в моделировании микроволнового нагрева металлических порошковых компактов, лежащего в основе различных инновационных технологических процессов.

Решение задачи измерения высокотемпературных диэлектрических свойств керамических и композиционных материалов актуально для развития методов высокотемпературной микроволновой обработки материалов.

Развиваемые в работе аналитические методы описания процессов генерации гармоник диэлектрическими и полупроводниковыми наноантеннами могут быть применимы при создании новых наноразмерных источников излучения в



инфракрасном, оптическом и ультрафиолетовом диапазонах, сенсоров и нанофотонных электронных схем.

### **Достоверность результатов**

Все результаты работы получены хорошо известными методами, обоснованы и достоверны. Аналитические результаты подтверждены численным моделированием и согласуются с экспериментальными результатами, известными из литературы.

### **Апробация результатов и публикации**

Основные результаты диссертационной работы докладывались на следующих конференциях и научных школах:

- 6-й международный научный семинар «Перспективные технологии консолидации материалов с применением электромагнитных полей», г. Москва, 2017 г.
- 10th International Workshop “Strong Microwaves and Terahertz Waves: Sources and Applications”, г. Нижний Новгород, 2017 г.
- XVIII научная школа «Нелинейные волны-2018» и XIX научная школа «Нелинейные волны – 2020», г. Нижний Новгород, 2018 и 2020 годы
- “Bremen Workshop on Light Scattering”, Германия, г. Бремен, 2018 г.
- The 13th International Symposium on Nanophotonics and Metamaterials, г. Санкт-Петербург, 2018 г.
- 30th Joint Russian-German Meeting on ECRH and Gyrotrons, г. Нижний Новгород, 2018 г.
- 23-я, 24-я и 26-я Нижегородская сессия молодых ученых, г. Нижний Новгород, 2018, 2019 и 2021 годы
- VII International Conference “Frontiers of nonlinear physics”, г. Нижний Новгород, 2019 г.
- 4-я и 5-я международная конференция по метаматериалам и нанофотонике “METANANO”, г. Санкт-Петербург 2019 г. и онлайн 2020 г.

Результаты работы также обсуждались на научных семинарах в Институте прикладной физики РАН и в Институте физики микроструктур РАН. Материалы диссертации были опубликованы в ведущих российских и зарубежных научных журналах: Nanophotonics, Physical Review B, ACS Nano, Advanced Optical Materials, Nano letters, Известия вузов. Радиофизика, Журнал технической физики, Ceramics International, а также в материалах российских и меж-

дународных конференций. Всего по теме исследования опубликовано 11 статей в рецензируемых журналах [A1—A11] (из них 11 – в журналах, рекомендованных ВАК для публикации основных материалов), 15 статей и тезисов докладов в сборниках трудов всероссийских и международных конференций [A12—A26]. Представленные результаты были отмечены премиями Конкурсов работ молодых учёных ИПФ РАН в 2020 и 2021 годах и IV открытого конкурса научных работ молодых учёных в области физики, химии и технологии наноструктур и элементов нанoeлектроники (ИФМ РАН) в 2019 году.

### **Личный вклад**

Все теоретические результаты, изложенные в настоящей диссертации, получены лично автором либо при его непосредственном участии. Автор также принимала участие в эксперименте по измерению коэффициента поглощения СВЧ-излучения в керамических образцах, проводила измерения и самостоятельно обрабатывала результаты. Совместно с научным руководителем осуществлялись постановка и обсуждение результатов теоретических задач главы 2. Идея построения новой модели эффективной среды была предложена В.Е. Семеновым и реализована автором. Постановка задач главы 3 осуществлялась Д.А. Смирновой, аналитические расчеты и численное моделирование были выполнены автором совместно с соавторами работ.

### **Структура и объем диссертации**

Диссертация состоит из введения, трёх глав и заключения. Полный объём диссертации составляет 130 страниц с 28 рисунками и 5 таблицами. Список публикаций автора по теме диссертации содержит 26 наименований. Список литературы содержит 95 наименований.

### **Благодарности**

Автор выражает глубокую благодарность и признательность Дарье Александровне Смирновой, которая за время совместной работы стала моим научным наставником, за переданный опыт, ценные обсуждения и значимый вклад в профессиональное становление.

## Глава 1. Электродинамическое описание малых частиц в поле электромагнитной волны

Решение задачи рассеяния и поглощения плоской электромагнитной волны на однородной сферической частице было построено Густавом Ми в 1908 г. [3]. Это решение основано на методе разделения переменных в сферической системе координат. Поле падающей плоской волны на сферическую частицу раскладывается в бесконечный ряд по сферическим модам, для каждой из которых амплитуда сходящейся к центру волны считается заданной. Амплитуда расходящейся от центра волны находится в результате решения задачи об отражении сходящейся волны от сферической частицы. Если радиус сферической частицы мал по сравнению с длиной волны, имеет смысл пользоваться упрощенными методами решения. Так, в качестве полей падающей и рассеянной волн можно использовать дипольные (низшие) моды решения Ми, когда поля высших мод малы в окрестности частицы. Наиболее же простой моделью является квазистатическое дипольное приближение, когда поле снаружи частиц аппроксимируется суперпозицией поля падающей волны и полем диполя [9]. Квазистатическое дипольное приближение часто используется, например, в задачах расчета поглощения энергии электромагнитного излучения в малых частицах и системах их них [A2; 10; 11]. Эти два упрощенных способа построения решений отличаются друг от друга. Так, например, при определенных резонансных условиях выражения для дипольных моментов и величин рассеиваемой и поглощаемой энергии, вычисленные в квазистатическом приближении, становятся некорректными, поскольку в данном приближении не учитываются потери энергии на излучение. Линейный отклик осциллятора, помещенного во внешнее периодическое поле, можно описать с помощью теории связанных мод, и тогда дипольный момент рассеивающей частицы можно описать Лоренцевой кривой [12]. При таком способе описания выражения для величин дипольных моментов, рассеянной и поглощенной мощности определяются собственной частотой осциллятора и константами внутреннего и радиационного затухания. Применимость квазистатического приближения при описании резонансов любого типа Лоренцевой кривой определяется малостью радиационной ширины линии по сравнению с константой затухания, определяемой внутренними потерями [13—

15]. В этих работах приведены выражения, обобщающие и уточняющие квазистатические формулы для наведенного дипольного момента, сечений рассеяния и поглощения сферической частицы с учетом возможности сильного возрастания рассеиваемой мощности для дипольного резонанса любого типа.

Уже больше столетия в различных областях электродинамики и физики плазмы не угасает интерес к изучению субволновых систем, поддерживающих дипольные резонансы. В последнее время активно развивается теория рассеяния СВЧ волн в высокотемпературной плазме на регулярных когерентных структурах (блобы, стримеры). В работе [16] теоретическая процедура, аналогична той, что использовалась для решения уравнений Максвелла Ми, обобщается на плазму в магнитном поле. Большое внимание в литературе уделяется описанию электродипольного (плазмонного) резонанса при рассеянии электромагнитных волн на сферической частице [17–21]. В работе [18] приведен самосогласованный расчет поляризации металлической сферической частицы, учитывающий динамическую деполяризацию вещества частицы и радиационное затухание. Поправки в выражении для поляризации, связанные с данными типами потерь, корректно описывают изменение амплитуды полей, ширины плазмонного резонанса и сдвиг резонансной частоты и при изменении радиуса металлической частицы. В работах [20; 21] рассматривается рассеяние электромагнитных волн на плазменном шаре в свободном пространстве и приводятся выражения для собственной частоты и коэффициента радиационного трения. В работах [14; 22] найдены резонансные частоты и постоянные радиационного и столкновительного затухания, и амплитуды полей для поверхностного и объемных плазмонов в ионизированных кластерах. В работе [19] приведены аналитические выражения для ширин Лоренцевых линий резонансов электрических мод на основе точного решения Ми в приближении, когда рассеивающая плазмонная частица мала по сравнению с длиной волны в окружающей среде. Коэффициенты ряда Ми рассеянной волны на малых плазмонных частицах пренебрежимо малы по сравнению с коэффициентами Ми электрических мод, поэтому резонансы магнитных мод в данной работе не рассматривались. Во многих работах параметры резонансных кривых для диэлектрических частиц получали численно. В работе [15] описано рассеяние света на индивидуальных резонансных объектах на основе теории связанных мод (СМТ), приведены выражения для сечения рассеяния и поглощения. В этой работе продемонстри-

ровано, что для однородной немагнитной диэлектрической сферы резонансные кривые, полученные в точном решении Ми, совпадают с кривыми, построенные по формулам СМТ для разных соотношений внутренних и радиационных потерь. В работе [12] также показано, как меняется амплитуда резонанса при изменении соотношения между радиационными потерями и внутренними, кроме того, описано, как Лоренцев профиль резонансной кривой переходит в профиль резонанса Фано при изменении фазы между фоновым излучением полностью отраженной волны и излучением возбужденного резонанса. В качестве примера приведены результаты численных расчетов значений резонансной частоты и ширины линии для трехслойного цилиндра. На основе развитого в работе [12] описания авторы рассчитывали параметры резонансных кривых, соответствующие максимальному сечению рассеяния плоской волны на трехслойной сфере [23]. В работах [24; 25] представлены результаты детального аналитического исследования рассеяния света частицей с высоким показателем преломления и малыми потерями, основанного на точном решении Ми. В данных работах основное внимание уделяется возбуждаемым резонансам Фано снаружи частицы, и приводятся аналитические выражения для параметров резонансной линии Фано.

В последнее годы в области нанофотоники проводятся активные исследования процессов рассеяния лазерного излучения на диэлектрических и полупроводниковых наноструктурах с высоким показателем преломления в оптическом и инфракрасном диапазонах частот (Si, Ge, GaAs, BaTiO<sub>3</sub>). Основное преимущество таких частиц перед плазмонными состоит в возможности возбуждения как электрических, так и магнитных резонансов типа Ми [26–28]. Интерференция различных резонансов и малые омические потери в таких частицах обеспечивают исключительные возможности для управления светом в субволновых масштабах, создания оптических наноантенн и метаповерхностей со значительным усилением нелинейного отклика [4; 29]. Особый интерес для различных приложений нанооптики представляют низшие дипольные резонансы. Так, например, усиление спонтанного излучения, эффективность процессов нелинейного преобразования при возбуждении магнитодипольного резонанса выше по сравнению с другими типами резонансов благодаря локализации электрического поля внутри объема частицы. Сильное резонансное рассеяние света, связанное с возбуждением электродипольного и магнитодипольного резонансов

в видимом диапазоне, было впервые продемонстрировано для отдельных сферических наночастиц из кремния [30; 31]. Магнитодипольных резонансы субволновых частиц из керамических немагнитных материалов с большими значениями диэлектрической проницаемости и малыми значениями тангенса угла диэлектрических потерь можно использовать для колоссального усиления магнитного поля на микроволновых частотах или в оптическом диапазоне с использованием материалов с высоким показателем преломления [32; 33]. Спектральное перекрытие электрического и магнитного дипольных резонансов могут обеспечить однонаправленное рассеяние благодаря эффекту Керкера [34]. Высокоэффективное рассеяние вперед или назад при интерференции дипольных резонансов наблюдалось как для отдельных диэлектрических нанодисков [35; 36], так и в массивах таких частиц [37]. Метаповерхности, созданные из отдельных наноантенн, позволяют повысить эффективность процессов поглощения и рассеяния при взаимодействии электромагнитного излучения с веществом [38], и обладают уникальными свойствами для управления направленностью, частотой и поляризацией излучения [39]. Большое внимание исследователей привлекают возможности создания лазеров на основе массивов активных полупроводниковых наноантенн. В работе [40] впервые была продемонстрирована направленная генерация за счет разрушения связанного состояния в континууме, создаваемого вертикальными электрическими дипольными резонансами в наноцилиндрах из GaAs.

Таким образом, изучение дипольных откликов субволновых систем остается актуальным в настоящее время при решении широкого круга задач электродинамики.

### **1.1 Описание рассеяния электромагнитной волны на сферической частице низшими дипольными модами**

Распространение электромагнитных волн в сферически-симметричной среде можно описывать с помощью двух скалярных функций – потенциалов Дебая [41], определяющих две различные моды электромагнитной волны. Электрическое и магнитное поля в такой среде выражаются через производные вве-

денных скалярных функций. В сферической системе координат для ТЕ-моды радиальная компонента электрического поля равна нулю,  $E_r = 0$ , а для ТМ-моды равна нулю радиальная компонента магнитного поля  $H_r = 0$ . Обозначим через  $\Phi_m$  скалярную функцию, описывающую ТЕ-моду, а через  $\Phi_e$  – скалярную функцию, описывающую ТМ-моду.

### 1.1.1 ТЕ-мода (магнитодипольная)

Электромагнитное поле низшей магнитодипольной моды решения Ми в сферической системе координат  $(r, \theta, \varphi)$  можно представить в виде [42; 43]

$$\mathbf{E} = \frac{1}{k_0} \nabla \times (\Phi_m \mathbf{h}) = \frac{1}{k_0} \nabla \Phi_m \times \mathbf{h} = -\hat{\varphi} \frac{d\Phi_m}{d\rho} \sin \theta, \quad (1.1)$$

$$\mathbf{H} = \frac{1}{k_0 \mu} \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{i}{\mu} \left( \hat{\mathbf{r}} \frac{2}{\rho} \frac{d\Phi_m}{d\rho} \cos \theta - \hat{\theta} \left( \frac{d^2 \Phi_m}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d\Phi_m}{d\rho} \right) \right). \quad (1.2)$$

Здесь  $(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\theta}, \hat{\varphi})$  – соответствующие орты,  $\mathbf{h} = \hat{\mathbf{r}} \cos \theta - \hat{\theta} \sin \theta \equiv \hat{\mathbf{z}}$  – единичный вектор вдоль магнитного поля падающей электромагнитной волны в начале координат, сонаправленный с осью  $z$ ,  $k_0 = \frac{\omega}{c}$  – волновое число в вакууме,  $\omega$  – циклическая частота,  $c$  – скорость света в вакууме,  $\rho = k_0 r$ , используется временная зависимость полей  $e^{-i\omega t}$ . Выражения (1.1-1.2), помимо радиальной зависимости, также содержат угловую структуру дипольных мод.

В среде со сферически-симметричным распределением диэлектрической проницаемости  $\varepsilon(\rho)$  поля  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{H}$  удовлетворяют уравнениям Максвелла, если функция  $\Phi_m(\rho)$  является решением уравнения:

$$\nabla (\Delta \Phi_m) + k_0^2 \varepsilon \mu \nabla \Phi_m = 0. \quad (1.3)$$

Формально из уравнения (1.3) следует непрерывность функций  $\Phi_m, \frac{d\Phi_m}{d\rho}$  и  $\frac{d^2 \Phi_m}{d\rho^2}$ . Введенная функция  $\Phi_m$  сама по себе не имеет физического смысла, поэтому можно строить решения с разрывами для функции  $\Phi_m$ , но при этом сохранить непрерывность функций  $\frac{d\Phi_m}{d\rho}$  и  $\frac{d^2 \Phi_m}{d\rho^2}$ , обеспечивающих непрерыв-

ность тангенциальных компонент электромагнитного поля. В случае кусочно-однородной среды можно проинтегрировать один раз уравнение (1.3) в каждой из областей однородности, тогда уравнение примет вид:

$$\Delta\Phi_m + k_0^2 \varepsilon \mu \Phi_m = 0. \quad (1.4)$$

Уравнение (1.4) можно преобразовать к виду:

$$\frac{d^2\Phi_m}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d\Phi_m}{d\rho} + \varepsilon \mu \Phi_m = 0. \quad (1.5)$$

Плотность потока энергии (вектор Пойнтинга) для данной сферической моды в вакууме определяется величиной:

$$\mathbf{S} = \frac{c}{8\pi} \Re[\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*] = \frac{c}{8\pi} \hat{\mathbf{r}} \sin^2 \theta \Im \left( \frac{d\Phi_m}{d\rho} \frac{d^2\Phi_m^*}{d\rho^2} \right). \quad (1.6)$$

Здесь символы  $\Re$  и  $\Im$  обозначают действительную и мнимую части комплексного выражения. В вакууме выражение (1.6) с использованием уравнения (1.5) можно записать в виде

$$\mathbf{S} = -\frac{c}{8\pi} \hat{\mathbf{r}} \sin^2 \theta \Im \left( \Phi_m \frac{d\Phi_m^*}{d\rho} \right). \quad (1.7)$$

Непрерывность тангенциальных компонент электромагнитного поля определяет граничные условия на поверхности частицы:  $\frac{d\Phi_m}{d\rho}$  и  $\frac{1}{\mu} \left( \frac{d^2\Phi_m}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d\Phi_m}{d\rho} \right)$  – непрерывны. С помощью уравнения (1.5) второе граничное условие можно свести к требованию непрерывности функции  $\frac{1}{\mu} \left( \frac{1}{\rho} \frac{d\Phi_m}{d\rho} + \varepsilon \mu \Phi_m \right)$ .

В задаче рассеяния электромагнитной волны на сферически-симметричной частице, находящейся в начале координат и окруженной вакуумом, решение уравнения (1.4) снаружи частицы можно представить как суперпозицию решений, отвечающих сходящейся к центру волне (падающей) и расходящейся от центра волне (отраженной):

$$\Phi_m = -\frac{3}{4} H_0 \left( \frac{e^{-i\rho}}{\rho} - R_{\text{TE}} \frac{e^{i\rho}}{\rho} \right). \quad (1.8)$$



Коэффициент отражения  $R_{\text{TE}}$  здесь определен как отношение амплитуд встречных волн с противоположным знаком [12; 23; 42; 43] и находится в ходе решения задачи при заданной амплитуде падающей волны.

При таком выборе решения (1.8) в отсутствие рассеивающего объекта  $R_{\text{TE}} = 1$ , и поле падающей волны складывается из двух бегущих навстречу друг другу сферических волн с одинаковыми амплитудами, образующих стоячую волну

$$\Phi_m = -\frac{3i}{2}H_0\frac{\sin \rho}{\rho}. \quad (1.9)$$

В этом случае магнитное поле в начале координат равно  $H_0$ , а электрическое поле в окрестности начала координат мало и описывается формулой:

$$\mathbf{E}(\rho \ll 1) = \hat{\phi}\frac{H_0}{2i}\rho \sin \theta. \quad (1.10)$$

Для определения энергетических характеристик рассеянного излучения необходимо рассчитать электрическое и магнитное поля вне объекта по формулам (1.1-1.2), где в качестве решения выступает (1.8). Поток энергии определяется компонентой магнитного поля  $H_\theta$ , которую вблизи частицы (в области  $\rho \ll 1$ ) можно представить в виде

$$H_\theta \cong -H_0 \left( 1 - \frac{\Gamma_{\text{TE}}}{2} - \frac{3i\Gamma_{\text{TE}}}{4\rho^3} + \frac{3i\Gamma_{\text{TE}}}{8\rho} - \frac{9i\Gamma_{\text{TE}}}{32}\rho - \frac{1 + R_{\text{TE}}}{2}\rho^2 \right) \sin \theta, \quad (1.11)$$

где  $\Gamma_{\text{TE}} = 1 - R_{\text{TE}}$ . Первое слагаемое в правой части (1.11) отвечает однородному магнитному полю в начале координат в отсутствие рассеивающего объекта, а третье слагаемое отвечает полю магнитного диполя, индуцируемого в рассеивающем объекте. Поэтому согласно (1.11) индуцируемый в сферической частице магнитный дипольный момент равен:

$$\mathbf{p}_m = \frac{3i\Gamma_{\text{TE}}}{4k_0^3}\mathbf{H}_0. \quad (1.12)$$

Полный поток энергии, переносимый сходящейся к центру сферической волной:

$$P_+^m = \oiint \mathbf{S}ndS = 2\pi \int_0^\pi \mathbf{S}\hat{r}r^2 \sin \theta d\theta = \frac{3cH_0^2}{16k_0^2}. \quad (1.13)$$

Полная мощность, поглощенная в частице для ТЕ-моды, определяется как разность полных потоков падающей и отраженной сферических волн:

$$P_{\text{abs}}^m = \frac{3cH_0^2}{16k_0^2} \left(1 - |R_{\text{TE}}|^2\right). \quad (1.14)$$

Поглощенную мощность (1.14) можно представить в виде

$$P_{\text{abs}}^m = \frac{3cH_0^2}{16k_0^2} \left(\Gamma_{\text{TE}} + \Gamma_{\text{TE}}^* - |\Gamma_{\text{TE}}|^2\right) = -\frac{1}{2} \Re(i\omega \mathbf{p}_m \mathbf{H}_0) - P_{\text{sca}}^m, \quad (1.15)$$

где через  $P_{\text{sca}}^m$  обозначена мощность рассеяния

$$P_{\text{sca}}^m = \frac{3cH_0^2}{16k_0^2} |\Gamma_{\text{TE}}|^2. \quad (1.16)$$

Смысл равенства (1.15) заключается в том, что работа невозмущенного поля над наведенным диполем определяет сумму мощности рассеяния и поглощенной мощности:

$$-\frac{1}{2} \Re(i\omega \mathbf{p}_m \mathbf{H}_0) = P_{\text{abs}}^m + P_{\text{sca}}^m. \quad (1.17)$$

В книге Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица [9], §92, 93, см. также задачу 2 к § 92)] в задаче о рассеянии и поглощении плоской электромагнитной волны на малом немагнитном шаре радиуса  $a$  поле снаружи частицы рассчитывается в квазистатическом приближении. В рамках этого метода поле снаружи сферической частицы аппроксимируется суперпозицией однородного невозмущенного поля и поля диполя:

$$H_\theta \cong -H_0 \left(1 - \frac{3i\Gamma_{\text{TE}}}{4\rho^3}\right) \sin \theta. \quad (1.18)$$

Следует отметить, что приближенный метод расчета магнитного дипольного момента диэлектрической сферической частицы справедлив лишь в случае малой величины  $|\Gamma_{\text{TE}}|$ , поскольку отличие (1.18) от (1.11) несущественно, когда в выражении для магнитного поля (1.11) можно пренебречь четвертым слагаемым:

$$|\Gamma_{\text{TE}}| \ll k_0 a. \quad (1.19)$$

Полная поглощенная мощность для данной моды в случае малой величины  $|\Gamma_{TE}|$  приблизительно равна величине, приведенной в [9]:

$$P_{\text{abs}}^m = -\frac{1}{2} \Re(i\omega \mathbf{p}_m \mathbf{H}_0). \quad (1.20)$$

### 1.1.2 ТМ-мода (электродипольная)

Решение для случая электродипольной моды решения Ми можно построить аналогично магнитодипольной моде. Электрическое и магнитное поля для  $e^{-i\omega t}$ -процесса можно представить в виде

$$\mathbf{H} = \frac{1}{k_0} \nabla \times (\Phi_e \mathbf{e}) = \frac{1}{k_0} \nabla \Phi_e \times \mathbf{h} = -\hat{\phi} \frac{d\Phi_e}{d\rho} \sin \theta, \quad (1.21)$$

$$\mathbf{E} = \frac{1}{k_0 \varepsilon} \nabla \times \mathbf{H} = -\frac{i}{\varepsilon} \left( \hat{\mathbf{r}} \frac{2}{\rho} \frac{d\Phi_e}{d\rho} \cos \theta - \hat{\theta} \left( \frac{d^2 \Phi_e}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d\Phi_e}{d\rho} \right) \right). \quad (1.22)$$

Здесь  $\mathbf{e} = \hat{\mathbf{r}} \cos \theta - \hat{\theta} \sin \theta \equiv \hat{\mathbf{z}}$  – единичный вектор вдоль электрического поля падающей электромагнитной волны в начале координат. В случае кусочно-однородной среды поля  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{H}$  удовлетворяют уравнениям Максвелла, если функция  $\Phi_e$  является решением уравнения (1.4). При этом необходимо сохранить непрерывность тангенциальных компонент электромагнитного поля, что эквивалентно требованию непрерывности величин  $\frac{d\Phi_e}{d\rho}$  и  $\frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{d^2 \Phi_e}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d\Phi_e}{d\rho} \right)$ . С помощью уравнения (1.4) второе граничное условие можно свести к требованию непрерывности функции  $\frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{1}{\rho} \frac{d\Phi_e}{d\rho} + \varepsilon \mu \Phi_e \right)$ . Из принципа перестановочной двойственности уравнений Максвелла [13] магнитная и электрическая задачи эквивалентны друг другу с точностью до замены магнитных величин электрическими. Аналогичные выражения для электрического поля, дипольного момента и энергетических характеристик можно получить для случая ТМ-поляризации, заменив в (1.8) – (1.17)  $\mathbf{H}$  на  $-\mathbf{E}$ , а  $\mu$  на  $\varepsilon$ .

## 1.2 Резонансное рассеяние и поглощение низших дипольных мод

В случае однородной немагнитной сферической частицы радиуса  $a$ , находящейся в вакууме, поле ТЕ-моды описывается формулами (1.1) – (1.2), где функция  $\Phi_m$  и внутри частицы, и снаружи удовлетворяет уравнению (1.4). Решение снаружи частицы задается суперпозицией решений для падающей и отраженной волн (1.8), а решение внутри частицы не имеет особенностей в начале координат:

$$\Phi_m = B \frac{\sin(\rho\sqrt{\varepsilon})}{\rho}, \quad (1.23)$$

где  $B$  – константа, характеризующая амплитуду поля внутри частицы и определяемая из граничных условий. Коэффициент отражения  $R_{\text{ТЕ}}$  (амплитуда расходящейся сферической волны) вычисляется по формуле:

$$R_{\text{ТЕ}} = e^{-2ik_0a} \frac{k_0a\sqrt{\varepsilon} + \tan(k_0a\sqrt{\varepsilon})(\varepsilon - 1 + i\varepsilon k_0a)}{k_0a\sqrt{\varepsilon} + \tan(k_0a\sqrt{\varepsilon})(\varepsilon - 1 - i\varepsilon k_0a)}. \quad (1.24)$$

В предельном случае металлической сферической частицы выполняются неравенства  $\Im\varepsilon(k_0a)^2 \gg 1$  и  $\Im\sqrt{\varepsilon}k_0a \gg 1$ , поэтому  $\tan(k_0a\sqrt{\varepsilon}) \cong i$  и  $|R_{\text{ТЕ}}| \cong 1$ . Равенство нулю амплитуды убегающей волны ( $R_{\text{ТЕ}} = 0$ ) или, другими словами, полное поглощение энергии волны данной моды в сферической частице реализуется в случае резонанса, когда числитель выражения (1.24) равен нулю:

$$k_0a\sqrt{\varepsilon} + \tan(k_0a\sqrt{\varepsilon})(\varepsilon - 1 + i\varepsilon k_0a) = 0. \quad (1.25)$$

Равенство (1.25) возможно, если величина  $\tan(k_0a\sqrt{\varepsilon})$  близка к нулю, поэтому примем, что  $k_0a\sqrt{\varepsilon} = \pi n + \beta$ , где  $n$  – целое число,  $|\beta| \ll 1$ . Таким образом, резонанс реализуется при условиях, когда радиус сферической частицы близок к целому числу полуволн в веществе, а относительное поглощение слабое. В таком случае  $\tan(k_0a\sqrt{\varepsilon}) \cong \beta$ , и из равенства (1.25) определяем параметр  $\beta$  и получаем условие максимального поглощения мощности для дипольной ТЕ-моды:

$$k_0a\sqrt{\varepsilon} \cong \pi n - \frac{i(k_0a)^2}{\pi n} (1 - ik_0a). \quad (1.26)$$

Таким образом, резонансное условие поглощения волны ТЕ-поляризации в однородной диэлектрической сферической частице, малой по сравнению с длиной волны в вакууме, имеет вид:

$$\varepsilon \cong \left( \frac{\pi n}{k_0 a} \right)^2 - 2 + 2ik_0 a. \quad (1.27)$$

Действительная часть резонансных значений диэлектрической проницаемости оказывается довольно большой, в то время как мнимая часть мала по сравнению с единицей.

Случай бесконечно большой амплитуды убегающей волны ( $R_{\text{ТЕ}} \rightarrow \infty$ ) реализуется, когда знаменатель коэффициента отражения (1.24) обращается в ноль, что возможно, если величина  $\tan(k_0 a \sqrt{\varepsilon})$  близка к нулю (так же, как и в случае  $R_{\text{ТЕ}} = 0$ ). Аналогичные выкладки приводят в этом случае к равенству, отвечающему усиливающей электромагнитные волны среде внутри сферической частицы ( $\Im \sqrt{\varepsilon} < 0$ ):

$$\varepsilon \cong \left( \frac{\pi n}{k_0 a} \right)^2 - 2 - 2ik_0 a. \quad (1.28)$$

Коэффициент рассеяния  $\Gamma_{\text{ТЕ}} = 1 - R_{\text{ТЕ}}$  определяется выражением

$$\Gamma_{\text{ТЕ}} = 2ie^{2ik_0 a} \frac{(\xi + \varepsilon) \sin k_0 a - \varepsilon k_0 a \cos k_0 a}{\xi + \varepsilon (1 - ik_0 a)}, \quad (1.29)$$

где  $\xi = \sqrt{\varepsilon} k_0 a \cot(\sqrt{\varepsilon} k_0 a) - 1$ . Для частицы, малой по сравнению с вакуумной длиной волны  $k_0 a \ll 1$ , выражение (1.29) принимает вид:

$$\Gamma_{\text{ТЕ}} = \frac{2i(k_0 a)^3}{3} \left( \frac{\varepsilon + \frac{3\xi}{(k_0 a)^2}}{\varepsilon + \xi} \right). \quad (1.30)$$

### 1.2.1 Сравнение с квазистатическим дипольным приближением

Для ТЕ-моды приближенное решение в [9] строится на основании того же представления (1.1)–(1.2) электромагнитного поля. Внутри сферической частицы используется то же решение (1.23). Однако снаружи частицы в расчетах величин, определяющих компоненты электромагнитного поля, используются приближенные выражения, полученные разложением решения (1.8) в ряд при  $\rho \ll 1$ :

$$\frac{1}{\rho} \frac{d\Phi_m}{d\rho} = -\frac{3}{4} H_0 \left( \frac{2i}{3} - \frac{\Gamma_{\text{dip}}}{\rho^3} \right), \quad \frac{d^2\Phi_m}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d\Phi_m}{d\rho} = -\frac{3}{4} H_0 \left( \frac{4i}{3} + \frac{\Gamma_{\text{dip}}}{\rho^3} \right), \quad (1.31)$$

Использование выражений (1.31) в граничных условиях, отвечающих непрерывности компонент магнитного поля, приводит к следующему результату [9]:

$$\Gamma_{\text{dip}} = \frac{4i(k_0a)^3}{3} \gamma = \frac{2i(k_0a)^3}{3} \left( 1 + \frac{3\xi}{\varepsilon(k_0a)^2} \right). \quad (1.32)$$

Сравнение (1.30) и (1.32) показывает, что квазистатическое дипольное приближение справедливо при  $|\varepsilon| \gg |\xi|$ . В исходных обозначениях неравенство, определяющее применимость квазистатического дипольного приближения, имеет вид:

$$|\varepsilon| \gg \left| \sqrt{\varepsilon} k_0 a \cot(\sqrt{\varepsilon} k_0 a) - 1 \right|. \quad (1.33)$$

Рассмотрим предельные случаи.

1) Неравенство (1.33) заведомо выполняется, когда радиус сферической частицы мал по сравнению с длиной волны внутри частицы:  $|\sqrt{\varepsilon} k_0 a| \ll 1$ . В этом случае

$$\xi \cong \frac{(\sqrt{\varepsilon} k_0 a)^2}{3} \left( 1 + \frac{(\sqrt{\varepsilon} k_0 a)^2}{15} \right), \quad \gamma = -\frac{(\sqrt{\varepsilon} k_0 a)^2}{30}. \quad (1.34)$$

2) Неравенство (1.33) выполняется и для металлической частицы. В этом случае  $\Im \varepsilon(k_0 a)^2 \gg 1$ ,  $\Im \sqrt{\varepsilon} k_0 a \gg 1$ ,  $\cot(\sqrt{\varepsilon} k_0 a) \cong -i$ , и получим

$$\xi \cong -i\sqrt{\varepsilon} k_0 a, \quad \gamma = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{3i}{\sqrt{\varepsilon} k_0 a} \right). \quad (1.35)$$

3) Неравенство (1.33) нарушается в условиях резонансного поглощения, когда имеет место равенство (1.25). Диэлектрическая проницаемость вещества частицы определяется выражением (1.27). В данном случае  $\xi \cong \varepsilon$ , и точное решение задачи дает:

$$\Gamma_{\text{TE}} = 1, \quad \mathbf{p}_m = \frac{3}{4ik_0^3} \mathbf{H}_0, \quad P_{\text{abs}}^m = P_{\text{sca}}^m = P_+^m. \quad (1.36)$$

Квазистатическое дипольное приближение при выполнении равенства (1.27) дает другие результаты

$$\Gamma_{\text{dip}} = 2(k_0a)^2 + 2i(k_0a), \quad \mathbf{p}_m = \frac{3k_0a}{2ik_0^3} \mathbf{H}_0, \quad P_{\text{abs}}^m \cong 4k_0aP_+^m, \quad P_{\text{sca}}^m \cong 4(k_0a)^2P_+^m. \quad (1.37)$$

Некорректность решений (1.37) в данном случае обусловлена нарушением условия (1.19) (условия малости коэффициента  $\Gamma_{\text{TE}}$  по сравнению с параметром  $k_0a$ ). Следует отметить, что квазистатическое дипольное приближение при  $\sqrt{\varepsilon}k_0a = \pi n$  дает неограниченно большую величину индуцируемого в сферической частице магнитного дипольного момента. Рассеянная мощность при этом будет неограниченно велика, что означает бесконечно большую амплитуду убегающей от сферической частицы волны. Точное решение в этом случае дает  $|R_{\text{TE}}| = 1$

### 1.2.2 Описание дипольных резонансов сферической частицы Лоренцевой кривой

Существует также способ описания резонансов различных мультипольных мод в решении задачи о рассеянии электромагнитных волн на объекте Лоренцевой кривой. Этот способ часто используется для определения характеристик резонансной линии, таких как резонансная частота, ширина линии. Так, например, для первого коэффициента разложения рассеянного поля в ряд по сферическим гармоникам  $b_1$  в задаче Ми [3] зависимость от частоты падающей волны

вблизи резонанса имеет вид:

$$b_1(\omega) = \frac{\gamma_r}{i(\omega - \omega_{\text{res}}) + \gamma_t}, \quad (1.38)$$

где  $\gamma_t$  – полная ширина линии,  $\gamma_r$  – радиационная ширина линии,  $\gamma_i = \gamma_t - \gamma_r$  – ширина, определяемая внутренними потерями. Выражения для данных характеристик резонансной кривой можно получить на основе выше развитого описания резонансов магнитодипольной моды. Введенные коэффициенты  $\Gamma_{\text{TE}}$  и  $R_{\text{TE}}$  связаны с первым коэффициентом разложения рассеянного поля в ряд по сферическим гармоникам в задаче Ми [3; 44] простыми соотношениями:

$$\Gamma_{\text{TE}} = 2b_1, \quad R_{\text{TE}} = 1 - 2b_1. \quad (1.39)$$

Выражения для эффективного поперечного сечения рассеяния  $C_{\text{sca}}$  и сечения поглощения  $C_{\text{abs}}$ , часто используемые в теории дифракции на шаре [44; 45], для магнитодипольной моды связаны с коэффициентами  $b_1$ ,  $\Gamma_{\text{TE}}$  и  $R_{\text{TE}}$  следующим образом:

$$C_{\text{sca}} = \frac{6\pi}{k_0^2} |b_1|^2 = \frac{3\pi}{2k_0^2} |\Gamma_{\text{TE}}|^2, \quad C_{\text{abs}} = \frac{6\pi}{k_0^2} (\Re b_1 - |b_1|^2) = \frac{3\pi}{2k_0^2} (1 - |R_{\text{TE}}|^2). \quad (1.40)$$

Аналогичные соотношения легко получить и для случая электродипольной моды. Из сформулированного выше условия резонансного поглощения (1.27) при заданных значениях диэлектрической проницаемости  $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$  и радиуса частицы можно определить резонансную частоту  $\omega_{\text{res}}$ :

$$\omega_{\text{res}} = \frac{c}{a} \frac{\pi n}{\sqrt{\varepsilon' + 2}}. \quad (1.41)$$

Полная ширина линии определяется выражением  $\gamma_t = \omega_{\text{res}} - \omega^*$ , где частота  $\omega^*$  определяется из условия

$$|b_1(\omega^*)| = \frac{|b_1(\omega_{\text{res}})|}{\sqrt{2}}. \quad (1.42)$$

Для частицы, малой по сравнению с длиной волны снаружи, выражение для полной и радиационной ширин резонансной линии можно получить из выражений (1.41)-(1.42) при разложении выражения для коэффициента  $b_1 = \frac{\Gamma_{\text{TE}}}{2}$  в ряд



по малому параметру  $\gamma_t \ll \omega_{\text{res}}$  вблизи резонансной частоты. В случае непоглощающего материала ( $\varepsilon'' = 0$ ,  $\gamma_i = 0$ ) ширина линии, связанная с внутренними потерями, равна нулю, тогда радиационная ширина линии определяется формулой:

$$\gamma_r = \frac{c (k_0 a)^3}{a \pi n \sqrt{\varepsilon'}}. \quad (1.43)$$

Добротность резонанса описывается формулой  $Q = \frac{\omega_{\text{res}}}{2\gamma_t}$ . В случае непоглощающего материала частицы в приближении  $k_0 a \ll 1$  выражение для добротности резонанса имеет вид:

$$Q = \frac{(\pi n)^2}{2(k_0 a)^3} \sqrt{\frac{\varepsilon'}{\varepsilon' + 2}}, \quad (1.44)$$

где волновое число соответствует резонансной частоте  $k_0 \equiv k_{0,\text{res}} = \frac{\omega_{\text{res}}}{c}$ . После подстановки выражения для резонансной частоты получим

$$Q = \frac{\sqrt{\varepsilon'} (\varepsilon' + 2)}{2\pi n}. \quad (1.45)$$

Рисунок 1.1 показывает зависимость добротности первых трех магнитодипольных резонансов диэлектрической сферы от показателя преломления  $\sqrt{\varepsilon'}$ . По второй оси отложен параметр  $d/\lambda_{MD}$ , где  $d = 2a$  — диаметр частицы,  $\lambda_{MD} = 2\pi c/\omega_{\text{res}} = k_0 a/\pi$  — резонансная длина волны. Сплошные линии соответствуют приближенным аналитическим выражениям, пунктирными линиями показаны результаты численных расчетов. Рисунок 1.1 показывает, что с уменьшением параметра  $k_0 a$  улучшается совпадение численных и аналитических результатов. В случае поглощающей среды полную ширину линии можно приближенно вычислить по формуле

$$\gamma_t = \frac{c}{a \pi n |b_1(\omega_{\text{res}})|} \Re \left( \frac{1-i}{\sqrt{\varepsilon}} \right). \quad (1.46)$$

Рисунок 1.2 иллюстрирует сравнение способов описания резонанса и пример расчета для частицы с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon = 107,7 + 0,6i$ . Рисунок 1.2 иллюстрирует, что Лоренцева кривая (синяя штриховая линия), построенная по формуле (1.38) с использованием выражений (1.41), (1.43), (1.46), совпадает с кривой, построенной по формуле из точного решения Ми (черная линия). При этом для кривой, построенной в квазистатическом дипольном при-

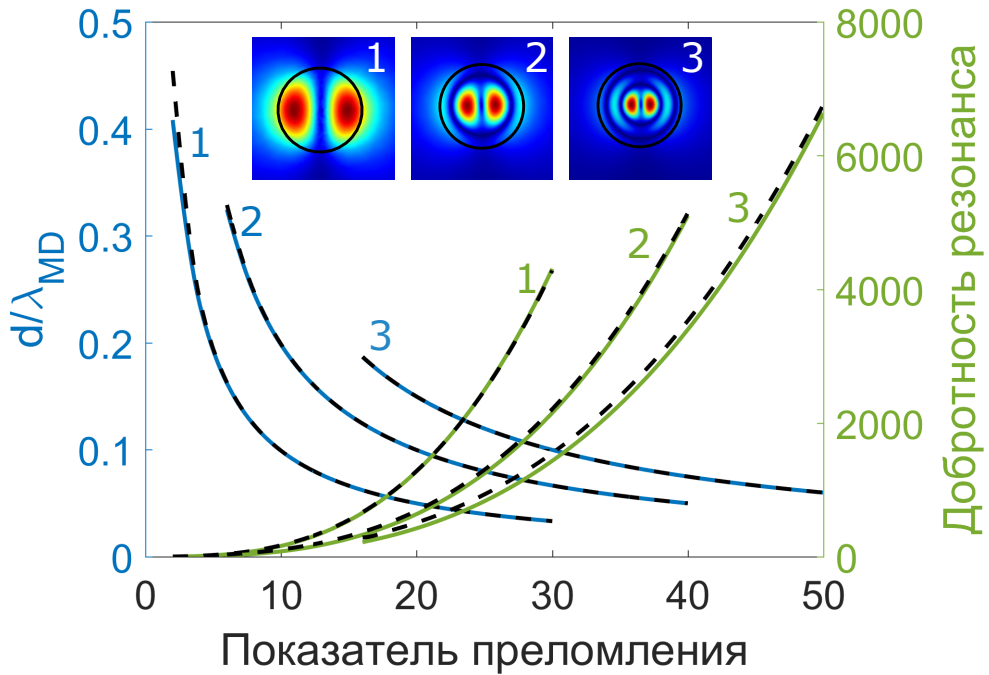


Рисунок 1.1 — Добротность и отношение диаметра к длине волны для первых трех магнитодипольных резонансов диэлектрического шара в зависимости от показателя преломления материала. Вставки показывают распределение амплитуды электрического поля магнитодипольного резонанса внутри частицы, когда магнитный диполь ориентирован вертикально в плоскости сечения.

ближении (фиолетовая линия), положение и ширина резонанса оказываются неточными, поскольку в этом случае не учитывались радиационные потери. В терминах описания резонанса лоренцевой кривой квазистатическое приближение применимо, когда радиационная ширина линии достаточно мала по сравнению с константой затухания, определяемой внутренними потерями  $\gamma_r \ll \gamma_i$  [13–15]. Из данного широко известного условия применимости получаем требование малости коэффициента  $\Gamma_{TE}$  по сравнению с единицей (1.19), полученное ранее в разделе (1.1.1). Приведенное же выше сравнение двух решений (1.30) и (1.32) позволило получить уточненное условие применимости квазистатического дипольного приближения (1.33).

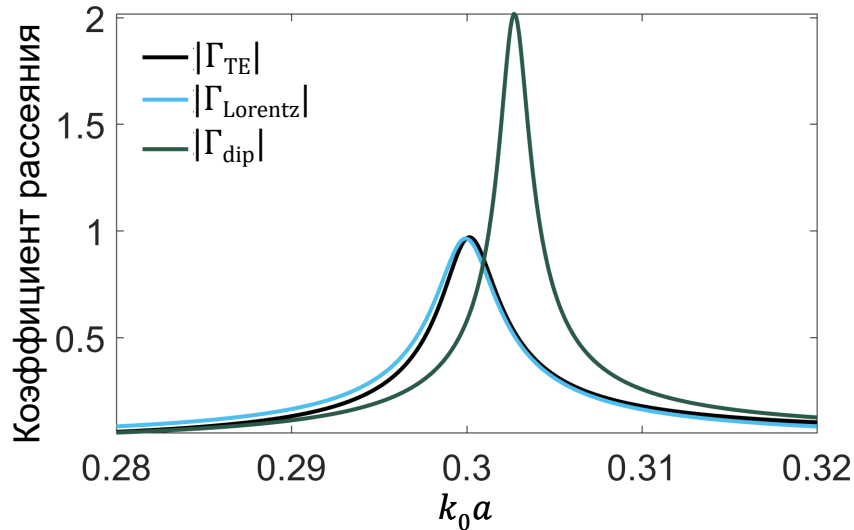


Рисунок 1.2 — Сравнение приближенных методов с точным решением Ми. Резонансные кривые описывают зависимость модуля коэффициента рассеяния  $\Gamma_{TE}$  от параметра  $k_0 a$  для сферической частицы с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon = 107,7 + 0.6i$ . Черная линия соответствует точному решению волновой задачи, голубая линия соответствует описанию Лоренцевой кривой с использованием полученных аналитических выражений для ширины линии и резонансной частоты, зеленая кривая построена с использованием квазистатического дипольного приближения

### 1.2.3 Магнитодипольная мода. Сферическая частица в однородной среде

Мы определили, в каких случаях можно пользоваться квазистатическим дипольным приближением для сферической частицы в вакууме. В задачах определения поглощения электромагнитных волн в средах, состоящих из множества частиц, также используются приближенные методы расчета полей. Например, при расчете эффективной магнитной проницаемости в [10] магнитное поле снаружи частицы в эффективной среде вычислялось как сумма однородного внешнего поля и дипольной оставляющей поля. Таким образом, представляет интерес определение условий применимости квазистатического дипольного приближения, когда частица помещена в материальную среду. Для этого необходимо сравнить решение в дипольном приближении с решением волновой задачи для ТЕ-поляризации, когда частица погружена в среду, обладающую диэлектриче-

ской и магнитной проницаемостью. Коэффициент отражения  $\tilde{R}_{\text{TE}}$  сферической магнитодипольной волны от сферической частицы с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon$  и магнитной проницаемостью  $\mu$  в среде с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_e$  и магнитной проницаемостью  $\mu_e$ :

$$\tilde{R}_{\text{TE}} = e^{-2ix} \frac{(1 + ix)(\mu_e y^2 + \zeta(\mu_e - \mu)) + \mu \zeta x^2}{(1 - ix)(\mu_e y^2 + \zeta(\mu_e - \mu)) + \mu \zeta x^2}, \quad (1.47)$$

где  $x = k_0 a \sqrt{\varepsilon_e \mu_e}$ ,  $y = k_0 a \sqrt{\varepsilon \mu}$ ,  $\zeta = y \cot y - 1$ . Проводя рассуждения, аналогичные приведенным в разделе 1.1.2, найдем условия, отвечающие максимуму поглощения магнитодипольной моды для частицы, окруженной средой ( $\tilde{R}_{\text{TE}} = 0$ ), когда радиус частицы близок к целому числу полувольт в веществе частицы:

$$\sqrt{\varepsilon \mu} k_0 a = \pi n + \delta, \quad \delta \approx -\frac{\mu x^2}{\mu_e \pi n} (1 - ix) + \frac{\mu - \mu_e}{\mu_e \pi n}. \quad (1.48)$$

Выражения (1.48) определяют условия резонансного поглощения до тех пор, пока абсолютное значение параметра мало по сравнению с единицей  $|\delta| \ll 1$ . В противном случае максимум поглощения достигается при радиусе частицы уже не вблизи целого числа полувольт, и необходимо решать уравнение  $\tilde{R}_{\text{TE}} = 0$  другими способами. Первое слагаемое в (1.48) мало по сравнению с единицей, если радиус частицы мал по сравнению с длиной волны в среде, окружающей частицу ( $x \ll 1$ ). Второе слагаемое в (1.48) связано с учетом магнитных свойств частицы и среды; оно мало по сравнению с единицей, если разница между магнитными проницаемостями частицы и среды не слишком велика, или в случае большого числа полувольт внутри частицы. Резонансное значение диэлектрической проницаемости частицы в случае  $|\delta| \ll 1$  определяется выражением:

$$\varepsilon \approx \frac{(\pi n)^2 + 2 \frac{\mu - \mu_e}{\mu_e}}{\mu (k_0 a)^2} - 2\varepsilon_e (1 - ik_0 a \sqrt{\varepsilon_e \mu_e}). \quad (1.49)$$

На рисунке 1.3а иллюстрирует эффективности поглощения  $1 - |R_{\text{TE}}|^2$  в зависимости от действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости материала частицы  $\Re \varepsilon$  и  $\Im \varepsilon$ . В рассматриваемом случае резонансное значение диэлектрической проницаемости, определенное из условия (1.27) при

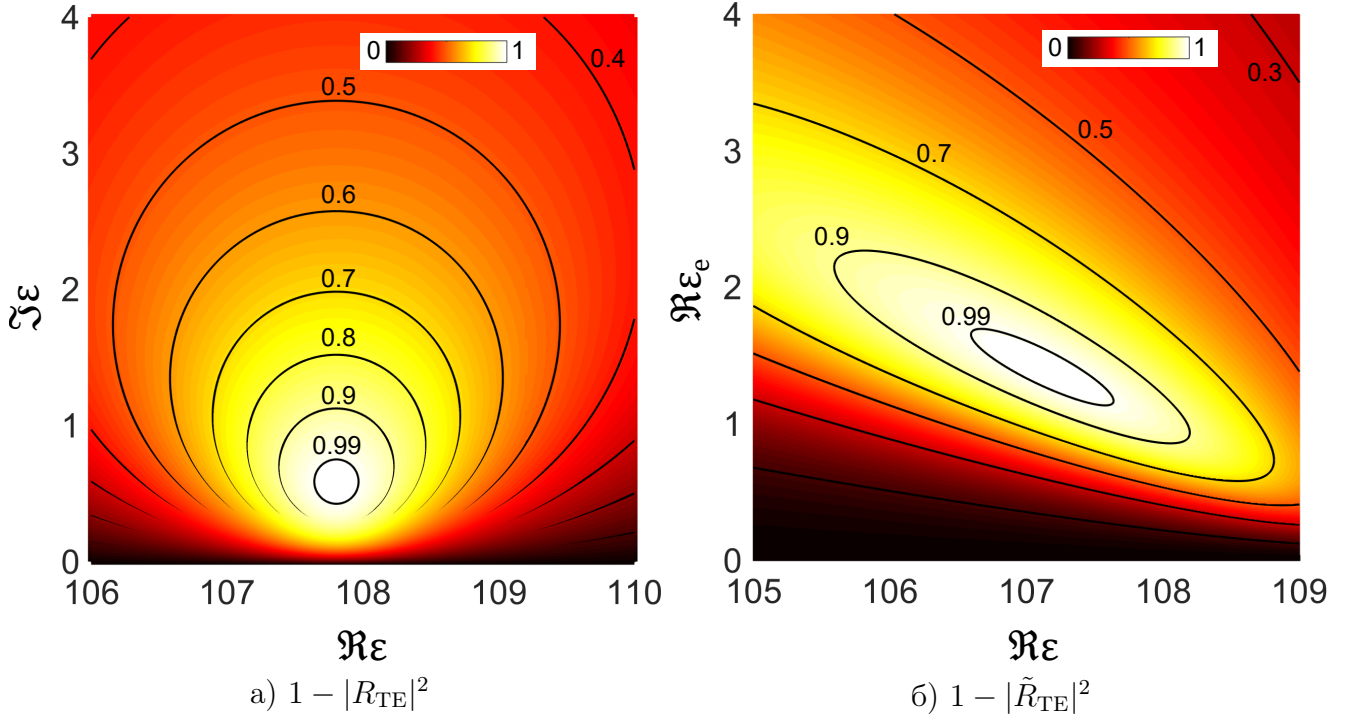


Рисунок 1.3 — Изолинии коэффициента поглощения магнитодипольной моды при  $k_0 a = 0.3$ , первый резонанс в зависимости от действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости материала частицы в вакууме (а) и в зависимости от действительных частей диэлектрических проницаемостей частицы и окружающей среды при  $\Im \varepsilon = 0.9$ ,  $\Im \varepsilon_e = 0$  (б)

$n = 1$  и  $ka = 0,3$ , составляет  $\varepsilon \approx 107,7 + 0,6i$ . На рисунке 1.3б представлена зависимость эффективности поглощения  $1 - |\tilde{R}_{TE}|^2$  от действительных частей диэлектрических проницаемостей материала частицы и внешней среды в случае  $\mu = \mu_e = 1$  для первого резонанса ( $n = 1$ ). Считается, что окружающая среда непроводящая, а мнимая часть диэлектрической проницаемости частицы равна  $\Im \varepsilon = 0,9$ . Рисунок 1.3б показывает, что при заданной комплексной диэлектрической проницаемости частицы максимальное поглощение может достигаться, когда частица помещена в среду, а не в вакуум.

Аналогично случаю частицы в вакууме можно получить приближенные выражения для резонансной частоты, радиационной ширины линии и добротности магнитодипольного резонанса частицы, малой по сравнению с длиной

волны в окружающей однородной среде,  $k_0 a \sqrt{\varepsilon_e} \ll 1$ :

$$\omega_{\text{res}} \approx \frac{c}{a} \frac{\pi n}{\sqrt{\varepsilon' + 2\varepsilon_e'}}, \quad (1.50)$$

$$\gamma_r \approx \frac{c}{a} \frac{(k_0 a \sqrt{\varepsilon_e})^3}{\pi n \sqrt{\varepsilon'}}, \quad (1.51)$$

$$Q \approx \frac{\sqrt{\varepsilon'} (\varepsilon' + 2\varepsilon_e')}{2\pi n \sqrt{\varepsilon_e'^3}}. \quad (1.52)$$

Здесь магнитная проницаемость вещества частицы и среды равна 1, и отсутствуют омические потери. Условие применимости квазистатического дипольного приближения имеет вид:

$$|\varepsilon| \gg |\varepsilon_e (\sqrt{\varepsilon \mu} k_0 a \cot(\sqrt{\varepsilon \mu} k_0 a) - 1)|. \quad (1.53)$$

При выполнении условия (1.53) поле снаружи частицы можно аппроксимировать суперпозицией однородного поля и дипольной составляющей поля. Неравенство (1.53) выполняется для частицы, малой по сравнению с длиной волны снаружи и внутри, а также для металлической частицы, малой по сравнению с длиной волны снаружи. Однако неравенство нарушается, когда радиус частицы близок к целому числу полуволен в веществе частицы, и в таком случае следует использовать точное решение.

#### 1.2.4 Электродипольная мода (ТМ-поляризация)

Квазистатическое дипольное приближение [9] дает неограниченно большую величину индуцируемого в сферической частице электрического дипольного момента вблизи электростатического резонанса  $\varepsilon = -2$ . Рассеянная мощность при этом оказывается неограниченно велика, что означает бесконечно большую амплитуду убегающей от частицы волны. Расчет в рамках этого приближения был проведен без учета потерь на излучение, однако как уже было сказано во введении к главе 1, есть множество работ, в которых различными методами получены корректные выражения для электрического дипольного момента частицы, внутренних потерь и потерь на излучение [13–15; 18; 19; 22].

В случае однородной сферической частицы радиуса  $a$ , находящейся в вакууме, поле ТМ-моды описывается формулами (1.21), где функция  $\Phi_e$  удовлетворяет уравнению (1.4). Аналогично случаю магнитодипольной моды снаружи частицы используется решение, аналогичное (1.8), а внутри частицы – решение (1.23). Из условий непрерывности тангенциальных компонент полей и на границе раздела сред (см. раздел 1.1.2) получаем выражение для коэффициента  $R_{\text{TM}}$ , введенного аналогично коэффициенту  $R_{\text{TE}}$  в разделе 1.1.1:

$$R_{\text{TM}} = e^{-2ik_0a} \frac{\xi (\varepsilon(k_0a)^2 - (\varepsilon - 1)(1 + ik_0a)) + \varepsilon(k_0a)^2 (1 - ik_0a)}{\xi (\varepsilon(k_0a)^2 - (\varepsilon - 1)(1 + ik_0a)) + \varepsilon(k_0a)^2 (1 - ik_0a)}. \quad (1.54)$$

В точном решении коэффициент отражения  $R_{\text{TM}}$  обращается в ноль вблизи электростатического резонанса. Значение диэлектрической проницаемости сферической частицы, малой по сравнению с длиной волны в вакууме ( $ka \ll 1$ ) и в веществе ( $|ka\sqrt{\varepsilon}| \ll 1$ ), при котором достигается максимальное поглощение энергии электромагнитной волны ТМ-поляризации, составляет

$$\varepsilon = -2 - \frac{12(k_0a)^2}{5} (1 - ik_0a). \quad (1.55)$$

В случае, когда частица окружена однородной средой с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_e$  и магнитной проницаемостью  $\mu_e$ , условие резонанса (1.55) для частицы, малой по сравнению с длиной волны как снаружи, так и внутри частицы, изменяется:

$$\varepsilon = \varepsilon_e \left( -2 - \frac{12\varepsilon_e\mu_e(k_0a)^2}{5} (1 - ik_0a\sqrt{\varepsilon_e\mu_e}) \right). \quad (1.56)$$

### 1.3 Заключение по Главе 1

Получены выражения для параметров лоренцевой кривой коэффициента рассеяния вблизи магнитодипольного резонанса диэлектрической частицы с высоким показателем преломления и малыми потерями в случае, когда частица мала по сравнению с длиной волны в окружающем пространстве. Описаны различные типы дипольных резонансов сферической частицы. Приведено срав-

нение решения задачи рассеяния и поглощения плоской электромагнитной волны на малом однородном шаре в квазистатическом дипольном приближении с результатами решения волновой задачи. Получены неравенства, определяющие применимость квазистатического дипольного приближения и уточняющие уже известное условие малости радиационных потерь по сравнению с внутренними потерями. Проанализированы условия применимости указанного приближения для различных параметров частицы и окружающей среды. Полученные в работе условия на диэлектрические и магнитные проницаемости частицы и окружающего вещества определяют применимость квазистатического приближения в задачах рассеяния и поглощения высокочастотного электромагнитного излучения, а также в задачах расчета поглощения в ансамбле частиц при определении полей снаружи отдельной частицы, окруженной эффективной средой, что будет использовано в дальнейшем в главе 2.



## Глава 2. Электродинамическое описание мелкодисперсной среды

Вопросы поглощения микроволнового излучения в порошковых материалах приобретают актуальность в связи с развитием методов высокотемпературной микроволновой обработки материалов [1; 2; 46]. Исследования в области спекания порошковых компактов с использованием микроволнового нагрева, начатые для диэлектрических керамических материалов, были продолжены для порошковых металлов [47; 48]. В многочисленных экспериментальных работах с использованием микроволнового нагрева в одномодовых резонаторах (как правило, на частоте 2,45 ГГц) наблюдалось, что процесс нагрева образцов, компактированных из металлических порошков, протекает наиболее эффективно, когда они размещаются в пучности магнитного поля [49]. Очевидно, данное обстоятельство обусловлено потерями, связанными с возбуждением в металлических частицах вихревых электрических токов под действием переменного магнитного поля.

Эффективный микроволновый нагрев продолжался и тогда, когда металлические порошки за счёт действия высокотемпературных диффузионных механизмов спекались до высоких плотностей. Детальные исследования показали, что поглощение микроволнового излучения в спечённых образцах связано с присутствием на металлических частицах оксидных слоёв, электрически изолирующих эти частицы друг от друга [50]. Расчёт мощности микроволнового излучения, поглощаемого в компактированных электропроводящих порошковых материалах, является актуальной задачей для моделирования процессов высокотемпературной микроволновой обработки. Рассматриваемые материалы представляют собой неоднородные среды, состоящие как минимум из двух фаз — твёрдого вещества и межчастичной пустоты. Относительная объёмная концентрация каждой из этих фаз в ходе уплотнения при спекании изменяется в широких пределах. В том случае, когда характерный масштаб неоднородности микроструктуры много меньше длины электромагнитной волны в веществе, для описания взаимодействия электромагнитного поля с таким материалом применяются методы, основанные на введении усреднённых характеристик среды. В рамках такого усреднённого описания вещество рассматривается как однородное, а воздействие на него электромагнитного поля характеризуется эффек-

тивными величинами, такими как эффективные диэлектрическая и магнитная проницаемости. Эффективные свойства неоднородных сред описывают с применением различных моделей. В частности, наиболее широко используются модели, основанные на так называемом приближении эффективной среды [51; 52]. В рамках данного приближения компоненты, составляющие неоднородный материал, рассматриваются в качестве включений в среде, свойства которой являются искомыми. Поле в каждом включении вычисляется на основе решения соответствующей электродинамической задачи, а эффективные свойства определяются в результате усреднения по объёму.

Для описания взаимодействия микроволнового излучения с компактированными электропроводящими материалами была предложена модель эффективной среды, основанная на квазиэлектростатическом расчёте полей в сферических включениях и учитывающая наличие на частицах проводящего вещества диэлектрических оболочек [53]. Данное приближение адекватно описывало вещества с не слишком высокой электрической проводимостью (например, полупроводники [54]), однако оно не применимо для описания микроволнового поглощения в композитах, содержащих металлические частицы [55], и, как следствие, не обеспечивает в этом случае необходимой точности. Выход за рамки квазиэлектростатического описания при расчёте поля внутри металлической частицы позволил существенно расширить пределы применимости модели эффективной среды для определения эффективной диэлектрической проницаемости композитов [11]. Что касается расчёта потерь магнитного типа, в большинстве случаев определяющих поглощение микроволнового излучения в компактированных порошковых металлах на наиболее распространённой промышленной частоте 2,45 ГГц, для него до настоящего времени не было предложено метода, позволяющего адекватно учесть взаимное влияние частиц при их значительной объёмной концентрации (реализующейся, например, в ходе спекания). В большинстве работ такие потери рассчитывались умножением мощности излучения, поглощаемого в одной изолированной сферической металлической частице, на число таких частиц в рассматриваемом объёме. Построить приближение эффективной среды для магнитной проницаемости электропроводящих гранулированных материалов методом усреднения напряжённости и индукции магнитного поля аналогично тому, как это делается для эффективной диэлектрической проницаемости, затруднительно. Это связано с тем, что магнитная

индукция в таких материалах формально всюду равна напряжённости магнитного поля (разумеется, если не принимать во внимание собственную магнитную проницаемость вещества частиц) и учесть таким образом влияние вихревых токов, возбуждаемых переменным магнитным полем в частицах, не удаётся. Мы предложили новую модель эффективной среды, позволяющую определить эффективную магнитную проницаемость компактированного материала [A2]. Приближение эффективной среды построено на основе расчёта магнитного момента сферической частицы из проводящего материала, погружённой в среду с искомой эффективной магнитной проницаемостью. Определены условия применимости предложенного подхода и проведено сравнение с ранее использовавшимся приближением.

Мощность электромагнитного излучения, поглощаемая в единице объема вещества, определяется его диэлектрическими и магнитными характеристиками:

$$w = w_e + w_m = \frac{\omega}{8\pi} (\varepsilon'' |\mathbf{E}|^2 + \mu'' |\mathbf{H}|^2). \quad (2.1)$$

Здесь  $\omega$  – циклическая частота микроволнового излучения,  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{H}$  – векторы электрического и магнитного полей, соответственно,  $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$  – комплексная диэлектрическая проницаемость,  $\mu = \mu' + i\mu''$  – комплексная магнитная проницаемость вещества. Для определения поглощения электромагнитных волн в неоднородной среде, состоящей из множества частиц, необходимо знать эффективные значения диэлектрической проницаемости и магнитной проницаемости этой среды. Мы будем интересоваться эффективной магнитной проницаемостью неоднородной среды, состоящей из частиц материалов с высокой электрической проводимостью  $\sigma$  ( $\sigma \gg \frac{\omega}{4\pi}$ ). Отклик среды, в составе которой имеются частицы электропроводящего материала (металла), при воздействии на нее высокочастотного магнитного поля определяется возникновением в частицах наведенных магнитных моментов, связанных с возбуждением вихревых электрических токов. Магнитный момент, отнесенный к единице объема частицы и величине внешнего магнитного поля, называют магнитной поляризуемостью частицы. Для сферической металлической частицы радиуса  $a$ , помещенной в переменное магнитное поле, комплексная магнитная поляризуемость  $\alpha_m$  имеет вид [9]

$$\alpha_m = -\frac{3}{8\pi} \left( 1 - \frac{3}{(ka)^2} - \frac{3 \cot(ka)}{ka} \right), \quad (2.2)$$

где  $k = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon} = \frac{1+i}{\delta}$  – волновое число в веществе частицы,  $\varepsilon = \varepsilon' + i \frac{4\pi\sigma}{\omega}$ ,  $\delta = \sqrt{\frac{c}{2\pi\sigma\omega}}$  – глубина проникновения магнитного поля в металл (толщина скин-слоя),  $c$  – скорость света. Из выражения (2.2) следует, что потери магнитного типа, определяемые мнимой частью магнитной поляризуемости, достигают максимума, когда радиус частиц порядка толщины скин-слоя. Если относительная объемная концентрация электропроводящих частиц в среде  $\eta$  (определяемая как отношение объёма вещества частиц к общему объёму среды) настолько мала, что каждая из них может рассматриваться как изолированная, эффективная магнитная проницаемость такой среды может быть определена как

$$\mu_{\text{eff}} = 1 + 4\pi\chi_{\text{eff}} = 1 + 4\pi\eta\alpha_m, \quad (2.3)$$

где  $\chi_{\text{eff}}$  – эффективная магнитная восприимчивость среды. Для более точного определения эффективной магнитной проницаемости при более высоких значениях относительной объемной концентрации частиц нужно учитывать взаимное влияние частиц в среде. Для этого необходимо определить магнитный дипольный момент частицы в однородном переменном магнитном поле, когда частица помещена в так называемую эффективную среду, т.е. среду с искомыми эффективными диэлектрическими и магнитными свойствами.

## 2.1 Эффективная диэлектрическая проницаемость смеси

В качестве иллюстрации предлагаемого ниже метода расчета эффективной магнитной проницаемости среды, состоящей из сферических проводящих частиц, аналогичный метод будет использован вначале для определения эффективной диэлектрической проницаемости среды, представляющей собой смесь сферических диэлектрических частиц, в рамках квазиэлектростатического приближения, в котором ответ был получен ранее методами прямого усреднения полей по объёму [51; 52]. В рамках этого приближения, при наложении однородного электрического поля  $\mathbf{E}_0$  на однородную среду, в которую помещена сферическая частица радиуса  $a$  с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_j$ , в этой

частице наводится электрический дипольный момент

$$\mathbf{p}_j = \frac{\varepsilon_e(\varepsilon_j - 1)}{\varepsilon_j + 2\varepsilon_e} a^3 \mathbf{E}_0, \quad (2.4)$$

где  $\varepsilon_e$  – диэлектрическая проницаемость среды. Электрическое поле снаружи частицы представляет собой в этом случае суперпозицию однородного и дипольного полей, и потенциал электрического поля имеет вид:

$$\varphi(\mathbf{r}) = -\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r} + A \frac{\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}}{r^3}, \quad (2.5)$$

где  $\mathbf{r}$  – радиус-вектор, проведенный из центра сферической частицы в текущую точку пространства, а постоянная  $A$  в дипольной составляющей поля связана с дипольным моментом частицы следующим образом:

$$\mathbf{p}_j = \left( \frac{1 + 2\varepsilon_e}{3} A + \frac{\varepsilon_e - 1}{3} a^3 \right) \mathbf{E}_0. \quad (2.6)$$

Отметим, что точно такая же связь (2.6) будет иметь место, если наложить однородное поле на однородную среду со сферической полостью радиуса  $a$ , внутри которой помещен электрический дипольный момент  $\mathbf{p}_j$ , параллельный полю  $\mathbf{E}_0$ , плотность которого произвольным симметричным способом распределена по объему полости. В последнем случае в дипольную составляющую поля вне полости дают также вклад связанные заряды, индуцируемые на границе полости, отчего  $A\mathbf{E}_0 \neq \mathbf{p}_j$ , если диэлектрическая проницаемость среды отлична от единицы.

Аналогичное соотношение справедливо и в случае, когда дипольный момент  $\mathbf{p}_j$  не связан с внешним полем  $\mathbf{E}_0$  и их направления не совпадают:

$$\varphi(\mathbf{r}) = -\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r} + \frac{\mathbf{A} \cdot \mathbf{r}}{r^3}, \quad \mathbf{A} = \frac{3}{1 + 2\varepsilon_e} \mathbf{p} - \frac{\varepsilon_e - 1}{1 + 2\varepsilon_e} a^3 \mathbf{E}_0. \quad (2.7)$$

Рассмотрим среду, представляющую собой смесь диэлектрических сферических включений разных сортов  $j$  ( $j = 1, 2, \dots$ ) с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_j$ . Поляризация такой среды равна сумме всех дипольных моментов диэлектрических включений, содержащихся в объёме такой среды, деленной на объем среды  $V$ . С другой стороны, можно поляризацию можно выразить через

эффективную диэлектрическую проницаемость среды  $\epsilon_{\text{eff}}$ :

$$\frac{1}{V} \sum_j \mathbf{p}_j = \frac{\epsilon_{\text{eff}} - 1}{4\pi} \mathbf{E}_0. \quad (2.8)$$

Используя выражение для дипольного момента частицы в среде (2.6), получаем уравнение, связывающее величину эффективной диэлектрической проницаемости среды  $\epsilon_{\text{eff}}$  с величинами диэлектрических проницаемостей всех сортов включений  $\epsilon_j$ :

$$\sum_j \eta_j \frac{\epsilon_j - \epsilon_{\text{eff}}}{\epsilon_j + 2\epsilon_{\text{eff}}} = 0, \quad (2.9)$$

где  $\eta_j$  — относительная объёмная концентрация включений сорта  $j$  (при получении уравнения (2.9) использовано условие  $\sum_j \eta_j = 1$ ).

Ниже приведено сравнение с другими методами расчета.

- 1) Уравнение (2.9) совпадает с уравнением, получаемым методом прямого усреднения полей по объёму [51; 52] (приближение эффективной среды Бруггемана).
- 2) Среда, в которой все частицы изотропны, а разности между их диэлектрическими проницаемостями малы по сравнению с самими диэлектрическими проницаемостями [9]. В таком предельном случае диэлектрическая проницаемость смеси определяется с точностью до членов второго порядка по указанным разностям:

$$\epsilon_{\text{eff}} = \bar{\epsilon} - \frac{\overline{\epsilon^2}}{3\bar{\epsilon}}, \quad (2.10)$$

где черта означает усреднение по объёму, много большему, чем размеры неоднородностей  $\bar{\epsilon} = \frac{1}{V} \int \epsilon dV$ . Выражение (2.9) даёт аналогичный результат в случае двухкомпонентной среды с диэлектрическими проницаемостями  $\epsilon_1 = \epsilon + \delta\epsilon$  и  $\epsilon_2 = \epsilon - \delta\epsilon$ .

- 3) Диэлектрическая проницаемость эмульсии с произвольной разницей между диэлектрической проницаемостью среды  $\epsilon_1$  и диэлектрической проницаемостью диспергированной фазы  $\epsilon_2$ , но малой концентрацией последней ( $C \ll 1$ ) [9]. В таком случае диэлектрическая проницаемость смеси описывается формулой с точностью до первого порядка по малой концентрации

$$\epsilon_{\text{eff}} = \epsilon_1 + C \frac{3\epsilon_1(\epsilon_1 - \epsilon_2)}{\epsilon_2 + 2\epsilon_1}, \quad (2.11)$$

Тот же результат получается из формулы (2.9), если разложить решение квадратного уравнения для эффективной диэлектрической проницаемости в ряд до членов первого порядка малости по концентрации.

## 2.2 Магнитная проницаемость среды из металлических сферических частиц

### 2.2.1 Магнитный дипольный момент металлической сферической частицы в эффективной среде

Для отыскания магнитного момента отдельной частицы следует обобщить решение известной задачи о возмущении однородного переменного магнитного поля в вакууме проводящей сферической частицей с размерами, малыми по сравнению с длиной соответствующей электромагнитной волны [9], на случай, когда проводящая сферическая частица погружена в среду с магнитной проницаемостью  $\mu_{\text{eff}}$ . Магнитное поле внутри и снаружи частицы в таком случае представимо в виде:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{\text{in}} &= \nabla \times \nabla \times (f B_m \mathbf{H}_0), \quad f = \frac{\sin(kr)}{r}, \\ \mathbf{H}_{\text{out}} &= -\nabla \left( -\mathbf{H}_0 \cdot \mathbf{r} + A_m \frac{\mathbf{H}_0 \cdot \mathbf{r}}{r^3} \right), \end{aligned} \quad (2.12)$$

где  $k = \sqrt{\epsilon \mu} \omega / c$  – волновое число в веществе частицы, а константы  $A_m$  и  $B_m$  определяются из граничных условий на поверхности частицы: тангенциальная компонента напряженности магнитного поля  $H_\tau$  и нормальная компонента индукции магнитного поля  $B_n$  непрерывны.

$$A_m = -\frac{a^3 \frac{f'}{a} (\mu_{\text{eff}} + 2\mu) + \mu_{\text{eff}} k^2 f}{2 \frac{f'}{a} (\mu_{\text{eff}} - \mu) + \mu_{\text{eff}} k^2 f}, \quad B_m = \frac{3}{2} \frac{\mu_{\text{eff}}}{\frac{f'}{a} (\mu_{\text{eff}} - \mu) + \mu_{\text{eff}} k^2 f}. \quad (2.13)$$

По аналогии с рассмотренной выше электростатической задачей магнитный момент проводящей сферической частицы можно представить в виде

$$\mathbf{p}_m = \left( \frac{1 + 2\mu_{\text{eff}}}{3} A_m + \frac{\mu_{\text{eff}} - 1}{3} a^3 \right) \mathbf{H}_0, \quad (2.14)$$

Тогда с использованием выражения для коэффициента  $A_m$  в дипольной составляющей поля снаружи частицы (2.13) получим выражение для магнитного дипольного момента сферической частицы в эффективной среде:

$$\mathbf{p}_m = -\frac{a^3 \mu_{\text{eff}} (\xi (1 + 2\mu) + (ka)^2)}{2 \xi (\mu_{\text{eff}} - \mu) + (ka)^2} \mathbf{H}_0. \quad (2.15)$$

где  $\xi = ka \cot(ka) - 1$ . В случае  $\mu_{\text{eff}} = \mu = 1$  магнитный момент (2.15), отнесенный к объёму сферической частицы, равен магнитной поляризуемости (2.2), умноженной на внешнее поле  $\mathbf{H}_0$ . Выражение (2.15) совпадает с результатом расчета магнитного момента по определению [9]. Магнитный момент создается движением всех зарядов внутри частицы. Среднее микроскопическое значение плотности тока связано с намагниченностью  $\mathbf{M}$  и поляризацией  $\mathbf{P}$  следующим образом:

$$\overline{\rho \mathbf{v}} = c \nabla \times \mathbf{M} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} \quad (2.16)$$

Выражение для магнитного дипольного момента представимо в виде суммы двух слагаемых:

$$\mathbf{p}_m = \int \mathbf{r} \times (\overline{\rho \mathbf{v}}) dV = \int \mathbf{M} dV + \int \mathbf{r} \times \mathbf{j} dV. \quad (2.17)$$

Используя связь намагниченности с полем внутри частицы и интегрируя по объёму частицы, получим:

$$\int \mathbf{M} dV = \frac{\mu - 1}{4\pi} \int \mathbf{H} dV = -\frac{a^3 \mu_{\text{eff}} \xi (\mu - 1)}{\xi (\mu_{\text{eff}} - \mu) + \mu_{\text{eff}} (ka)^2}. \quad (2.18)$$

Второе слагаемое после преобразований и интегрирования дает следующее выражение:

$$\int \mathbf{r} \times \mathbf{j} dV = \frac{1}{2c} \int \mathbf{r} \times \sigma \mathbf{E} dV = \frac{1}{8\pi} \int \mathbf{r} \times \nabla \times \mathbf{H} dV = -\frac{a^3 \mu_{\text{eff}} (3\xi + (ka)^2)}{2 \xi (\mu_{\text{eff}} - \mu) + \mu_{\text{eff}} (ka)^2}. \quad (2.19)$$



Сумма выражений (2.18) и (2.19) совпадает с выражением для магнитного дипольного момента (2.15).

### 2.2.2 Уравнение на эффективную магнитную проницаемость смеси проводящих частиц

По аналогии с рассмотренной электрической задачей (см. раздел 2.1) можно предложить следующий метод расчета эффективной магнитной проницаемости смеси проводящих сферических частиц. Вначале следует определить магнитный дипольный момент (2.15), индуцируемый внутри отдельной проводящей частицы в однородной магнитной среде при наложении на эту систему однородного переменного во времени магнитного поля  $\mathbf{H}_0$ . Затем следует связать намагниченность среды, представляющей собой смесь проводящих сферических частиц, с суммой магнитных дипольных моментов этих частиц. Намагниченность среды с эффективной магнитной проницаемостью  $\mu_{\text{eff}}$  определяется формулой:  $\mathbf{M}_{\text{eff}} = \frac{\mu_{\text{eff}} - 1}{4\pi} \mathbf{H}_0$ . Эффективную среду можно представить в виде среды, заполненной сферическими включениями из металла и вакуума. Таким образом, эффективная среда состоит из набора металлических включений (вообще говоря, они могут быть из различных металлов), обладающих магнитным дипольным моментом  $\mathbf{p}_{mj}$ , и из вакуума. Магнитный дипольный момент вакуумных областей в эффективной среде равен нулю. Значит, сумма всех дипольных моментов металлических сферических включений, находящихся в объеме эффективной среды  $V$ , равна полному дипольному моменту этого объема.

$$\frac{1}{V} \sum_j \mathbf{p}_{mj} = \frac{\mu_{\text{eff}} - 1}{4\pi} \mathbf{H}_0. \quad (2.20)$$

Подставляя в сумму выражение для магнитного дипольного момента включения сорта  $j$ , получим уравнение на эффективную магнитную проницаемость

$$\mu_{\text{eff}} - 1 = -\frac{3\mu_{\text{eff}}}{2} \sum_j \frac{\xi_j(2\mu_j + 1) + (k_j a_j)^2}{\xi_j(\mu_{\text{eff}} - \mu_j) + (k_j a_j)^2 \mu_{\text{eff}}} \eta_j. \quad (2.21)$$

Здесь  $a_j$  – радиус сферических включений сорта  $j$ ,  $k_j = \sqrt{\varepsilon_j \mu_j} \omega / c$ . Уравнение (2.21) представляет собой алгебраическое уравнение, степень которого равна количеству различных сортов включений в эффективной среде, включая вакуум. В правой части выражения (2.21) множитель  $\eta_j = \frac{V_j}{V}$  – объемная доля металлических включений сорта  $j$ . Объемную долю вакуума обозначим  $\eta_v$ . Сумма объемных долей всех компонентов вещества равна единице:  $\sum_j \eta_j + \eta_v = 1$ . Если среда состоит из двух компонентов, а именно металлических частиц с объемной долей  $\eta$  и вакуума, то уравнение (2.21) сведется к квадратному уравнению на эффективную магнитную проницаемость

$$2\mu_{\text{eff}}^2 (\xi + (ka)^2) + \mu_{\text{eff}} (\xi (6\eta\mu + 3\eta - 2\mu - 2) + (ka)^2 (3\eta - 2)) + 2\xi\mu = 0. \quad (2.22)$$

Эффективная магнитная проницаемость среды определяется решением уравнения (2.22), отвечающим поглощающей среде ( $\Im\mu_{\text{eff}} > 0$ ). Аналогичное уравнение можно получить для эффективной диэлектрической проницаемости среды. Для этого необходимо решать электрическую задачу. Электрический дипольный момент можно найти тем же способом, и в формулах заменить  $\mathbf{H}$  на  $\mathbf{E}$ ,  $\mu$  на  $\varepsilon$ . Полученное таким образом уравнение совпадает с уравнением на эффективную диэлектрическую проницаемость, полученным методом усреднения полей [11], что удовлетворяет принципу перестановочной двойственности уравнений Максвелла. На рисунке 2.1 изображена мнимая часть эффективной магнитной проницаемости среды из металлических частиц в зависимости от объемной концентрации частиц и отношения радиуса включений к глубине скин-слоя. Рисунок 2.1 показывает, что потери магнитного типа достигают максимума, когда размер частиц порядка толщины скин-слоя. Максимум поглощения наблюдается при концентрации частиц около 0,7. Данный максимум существует при достаточно больших значениях параметра  $a/\delta$  (от приблизительно 3 и более). Уменьшение поглощения при высокой объёмной концентрации проводящих включений, по-видимому, связано с влиянием плотной среды на магнитное поле в ней. При меньших значениях параметра  $a/\delta$  поглощение монотонно растет с ростом концентрации.

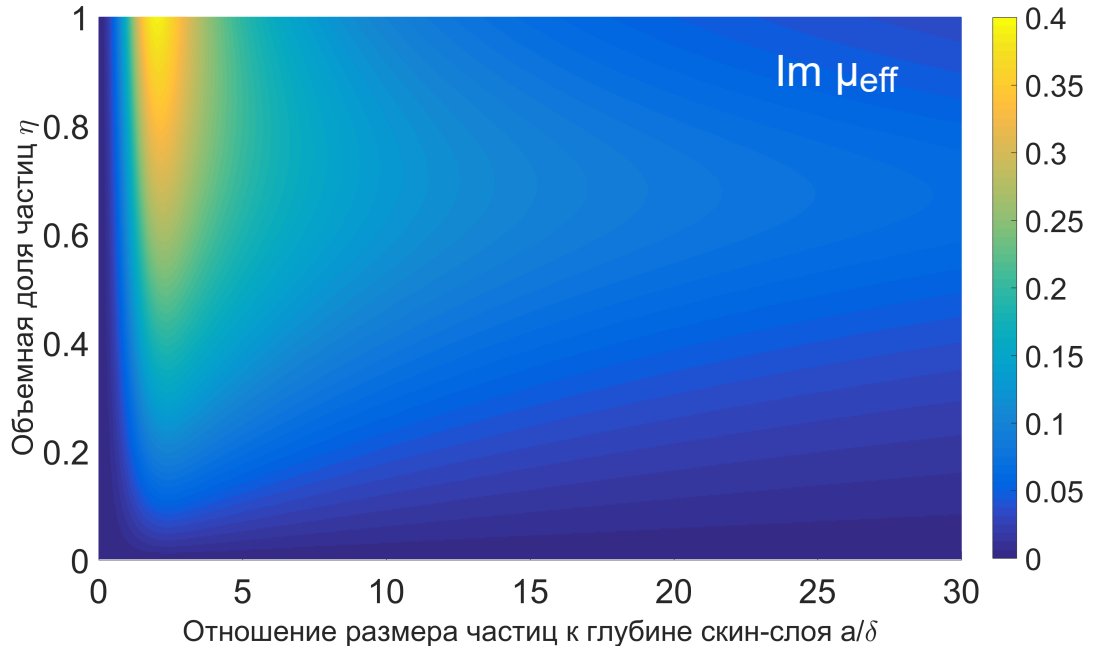


Рисунок 2.1 — Мнимая часть эффективной магнитной проницаемости металлического порошка в зависимости от относительной объемной концентрации частиц  $\eta$  и отношения радиуса частиц к глубине скин-слоя  $a/\delta$

### 2.2.3 Применимость дипольного приближения для поля снаружи металлической частицы в эффективной среде

Поле снаружи сферической частицы вычисляется в рамках квазистатического приближения, размер сферической частицы должен быть мал по сравнению с длиной волны в эффективной среде:

$$\left| \frac{\omega}{c} a \sqrt{\epsilon_{\text{eff}} \mu_{\text{eff}}} \right| \ll 1. \quad (2.23)$$

Выражение (2.23) является условием применимости приближенного квазистатического описания. В неравенство (2.23) входят значения эффективной магнитной проницаемости и эффективной диэлектрической проницаемости компактированной металлической порошковой среды. Для определения эффективной диэлектрической проницаемости в рассматриваемых средах, когда длина волны (толщина скин-слоя) внутри сферической частицы сравнима с ее радиусом или меньше его ( $a/\delta \geq 1$ ), потребуется воспользоваться приближением эффективной среды, учитывающим неоднородную (волновую) структуру электромагнитного поля внутри металлических включений. При больших концентрациях

частиц, при которых превышен порог перколяции проводимости, необходимо, кроме того, учитывать наличие на металлических частицах диэлектрических (например, оксидных) оболочек, изолирующих частицы друг от друга. Такая модель эффективной среды была разработана в работе [11]. Она будет использоваться в данном разделе для получения условий применимости. Как показывают расчёты с использованием уравнения (2.22), действительная и мнимая части эффективной магнитной проницаемости среды из металлических частиц не превосходят единицу. В то же время действительная и мнимая части эффективной диэлектрической проницаемости компактированных металлических порошковых сред могут достигать величин, много больших единицы. Например, для медных частиц радиусом 3 мкм, окруженных тонкими (10 нм) диэлектрическими оболочками, на частоте 24 ГГц при больших концентрациях действительная часть эффективной диэлектрической проницаемости может достигать порядка  $10^4$  [11]. Следовательно, условие применимости разработанного приближения для эффективной магнитной проницаемости (2.23) будет определяться в основном эффективной диэлектрической проницаемостью среды.

#### 2.2.4 Сравнение моделей эффективной магнитной проницаемости

В том случае, когда среда состоит из сферических металлических частиц одного сорта, не обладающих магнитными свойствами ( $\mu = 1$ ), и вакуума, уравнение (2.22) можно переписать в виде

$$2\mu_{\text{eff}}^2 (\xi + (ka)^2) + \mu_{\text{eff}} (\xi (9\eta - 4) + (ka)^2 (3\eta - 2)) + 2\xi = 0. \quad (2.24)$$

Для металлических частиц с высокой проводимостью ( $4\pi\sigma/\omega \gg \Re\epsilon$ ) в уравнении остается два параметра: отношение радиуса частицы к толщине скин-слоя  $\frac{a}{\delta}$  и относительная объемная концентрация частиц  $\eta$ .

Рисунок 2.3 показывает, что с ростом концентрации частиц характеры зависимостей и величины действительной и мнимой частей эффективной магнитной проницаемости, полученные в рамках новой модели (2.24), начинают заметно отличаться от результатов, полученных в ранее использовавшейся модели без учета взаимного влияния частиц друг на друга (2.3). В отличие от моде-

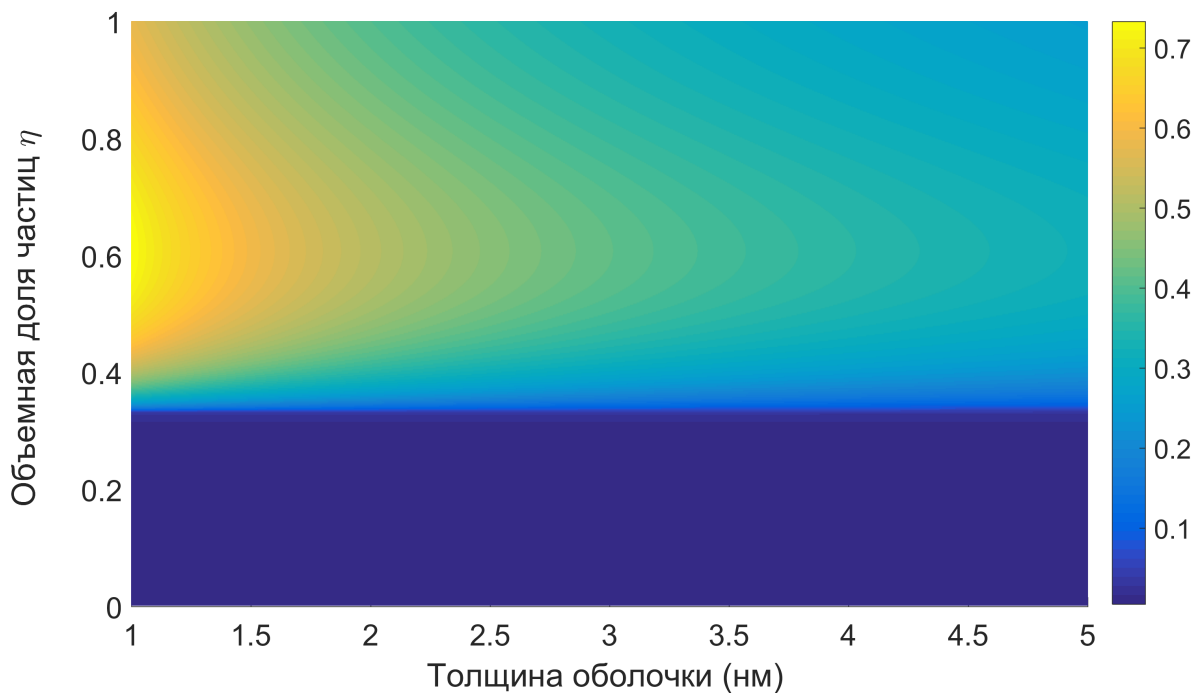


Рисунок 2.2 — Параметр применимости  $\frac{\omega}{c} a \sqrt{\epsilon_{\text{eff}} \mu_{\text{eff}}}$  разработанной модели расчета эффективной магнитной проницаемости в зависимости от толщины диэлектрической оболочки частиц и относительной объемной концентрации частиц. Медный порошок, радиус частиц  $a=10$  мкм, проводимость  $\sigma=5,96 \cdot 10^7$  См/м, частота  $f = \omega/(2\pi)=24$  ГГц

ли, не учитывающей взаимное влияние частиц, представленная в данной работе модель при больших концентрациях не приводит к получению отрицательных значений действительной части эффективной магнитной проницаемости.

Расчеты эффективной магнитной проницаемости металлических частиц в микроволновом диапазоне в рамках полученной модели хорошо совпадают с результатами численного моделирования, приведенными в работе [56]. На рисунке 2.4 приведено сравнение частотных зависимостей эффективной магнитной проницаемости среды из сферических медных частиц различных размеров частиц и относительной объемной концентрации  $\eta=0,74$ .

Если среда состоит из частиц, обладающих магнитными свойствами, эффективная магнитная проницаемость среды определяется из уравнения (2.22). В уравнение (2.22) входит собственная магнитная проницаемость материала частиц. Данные о значениях высокочастотной комплексной магнитной проницаемости ферромагнетиков при высоких температурах автору неизвестны. При комнатных температурах магнитная проницаемость железа и никеля убывает

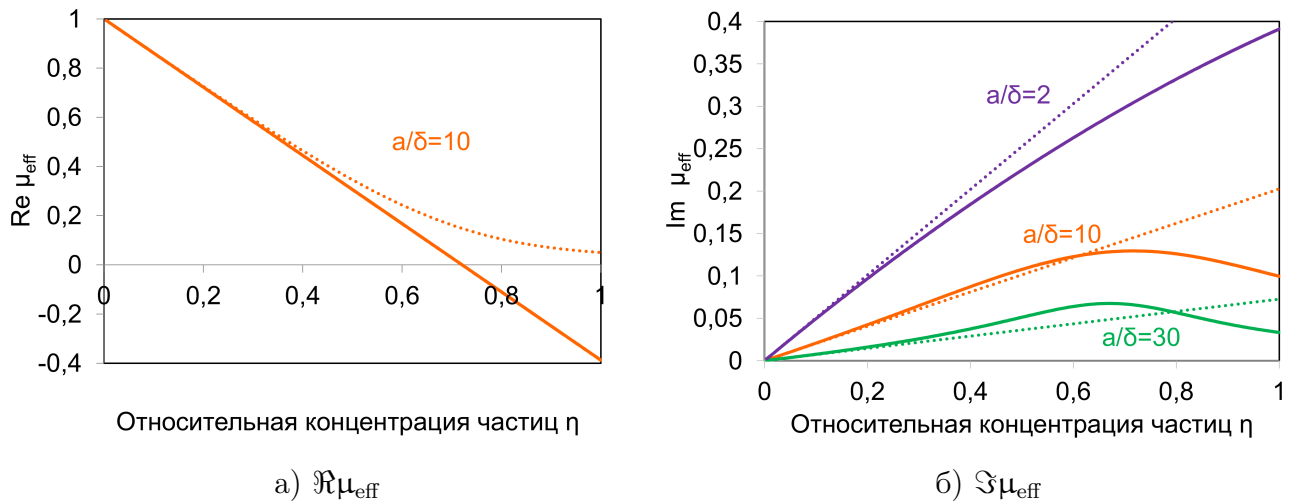


Рисунок 2.3 — Эффективная магнитная проницаемость металлического порошка в зависимости от относительной объемной концентрации твердого вещества  $\eta$  при различных отношениях радиуса частицы к толщине скин-слоя  $a/\delta$ . Сплошные линии соответствуют вновь разработанной модели (2.24), пунктирные — ранее использовавшейся модели (2.3).

при увеличении частоты, приближаясь к единице на частотах миллиметрового диапазона [57]. При более высоких частотах (в частности, в оптическом диапазоне) учет магнитной проницаемости в дополнение к диэлектрической проницаемости является превышением точности [9]. Представляет интерес исследование зависимости эффективной магнитной проницаемости среды, получаемой в разработанном приближении, от величины собственной магнитной проницаемости материала частиц. Как следует из экспериментально полученных данных, приведенных в [57], в выбранном диапазоне параметров максимальные значения действительной и мнимой части эффективной магнитной проницаемости, вычисленные в разработанном приближении эффективной среды, порядка единицы. Следовательно, наличие у частиц собственных магнитных свойств не оказывает заметного влияния на условия применимости (2.23) разработанной модели.

Предложенная модель эффективной среды для определения эффективной магнитной проницаемости затем была использована для моделирования быстрого микроволнового нагрева до температуры плавления сферических кластеров металлических частиц [A3], а также при моделировании спекания компактированных порошков из проводящих материалов при нагреве микроволновым излучением [A4]. В работе [A4] также учитывалось влияние проводимости ок-

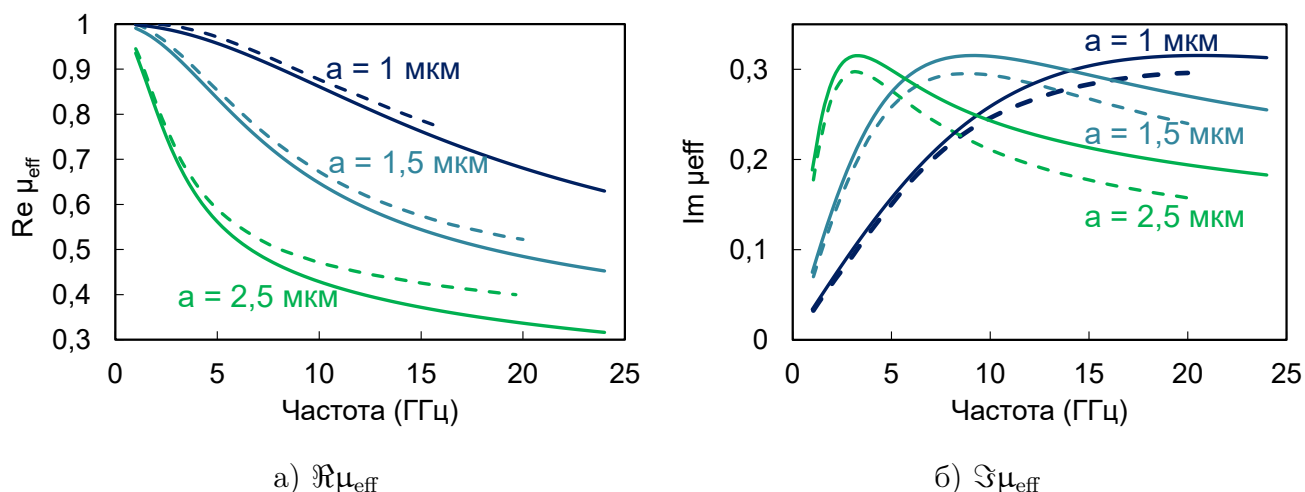


Рисунок 2.4 — Частотные зависимости эффективной магнитной проницаемости медного порошка при различных размерах частиц и относительной объемной концентрации 0,74. Сплошные линии соответствуют предложенной модели, а пунктирные линии соответствуют результатам, полученным в работе [56]

сидных оболочек на эффективную диэлектрическую и магнитную проницаемости металлических порошков, и было показано, что потери в пограничных слоях могут стабилизировать процесс микроволнового нагрева, способствуя быстрому уплотнению.

### 2.3 Измерение коэффициента поглощения микроволнового излучения в керамических и композиционных материалах при высоких температурах

Проектирование процессов, основанных на микроволновом нагреве материалов, требует знания диэлектрических свойств материалов и их температурных зависимостей. Разработка гиротронов средней мощности (3-15 кВт) в диапазоне частот 20-100 ГГц, создание на их основе специализированных гиротронных комплексов для нагрева и обработки материалов [58] и продолжающиеся исследования в области создания материалов и изделий с их использованием, делают актуальной задачу определения диэлектрических свойств широкого класса материалов в миллиметровом диапазоне излучения. Проведен эксперимент

по измерению коэффициента поглощения микроволнового излучения керамическими материалами на основе оксида алюминия в широком диапазоне температур [А5]. Метод основан на сравнении добротностей ненагруженного резонатора и резонатора с поглощающим образцом, помещенным внутри [59; 60]. Измерения проводились с использованием гиротронного комплекса для микроволновой обработки материалов [61]. Комплекс работает на частоте 24 ГГц, выходная мощность гиротрона плавно регулируется в диапазоне 0,1-3 кВт. Рабочая камера гиротронного комплекса представляет собой сверхмногомодовый ненастроенный резонатор ( $L \gg \lambda$ ). В экспериментах было исследовано два типа материалов алюмооксидной керамики: А0 ( $> 99,5\% \text{ Al}_2\text{O}_3$ ) в интервале температур 200 – 1100 °С и АZ11 ( $88\% \text{ Al}_2\text{O}_3 + 11\% \text{ ZrO}_2 + 1\% \text{ Y}_2\text{O}_3$ ) в интервале 200 – 600 °С. Образцы обоих составов предварительно были спечены в печи резистивного нагрева до плотности примерно 80% от теоретической плотности (пористость составляла 20%). Отличительная особенность используемого метода – использование излучения одновременно как для диагностики свойств (измерение коэффициента поглощения), так и для нагрева образца. Метод позволяет проводить измерения при высоких температурах материала, так как не требует контакта измерительных элементов с горячими поверхностями.

Эксперименты проводились следующим образом. В рабочую камеру гиротронного комплекса подавалось СВЧ-излучение заданной мощности, уровни мощности выдерживались в течение 10-15 минут, что соответствовало установлению стационарной температуры образца. Было проведено несколько серий экспериментов с ненагруженным резонатором (с пустой камерой) и с резонатором с керамическим образцом внутри. Добротность резонатора экспериментально определялась с помощью измерителя мощности СВЧ, подключенного к резонатору через отверстие малого поперечного сечения. Измеренная мощность  $P$  пропорциональна электромагнитной энергии, запасенной в объеме рабочей камеры. Отношение значений сигналов измерителя мощности в случаях ненагруженного резонатора и резонатора, нагруженного образцом, позволяет определить отношение добротностей в этих двух случаях (индекс 0 относится к ненагруженному резонатору):

$$\frac{Q}{Q_0} = \frac{P}{P_0}. \quad (2.25)$$



Добротность ненагруженного резонатора  $Q_0$  известна из независимых измерений. Используя соотношение (2.25), получаем выражение для коэффициента поглощения микроволнового излучения в образце  $\alpha$

$$\alpha = \frac{\omega V}{cSQ_0} \left( \frac{P_0}{P} - 1 \right), \quad (2.26)$$

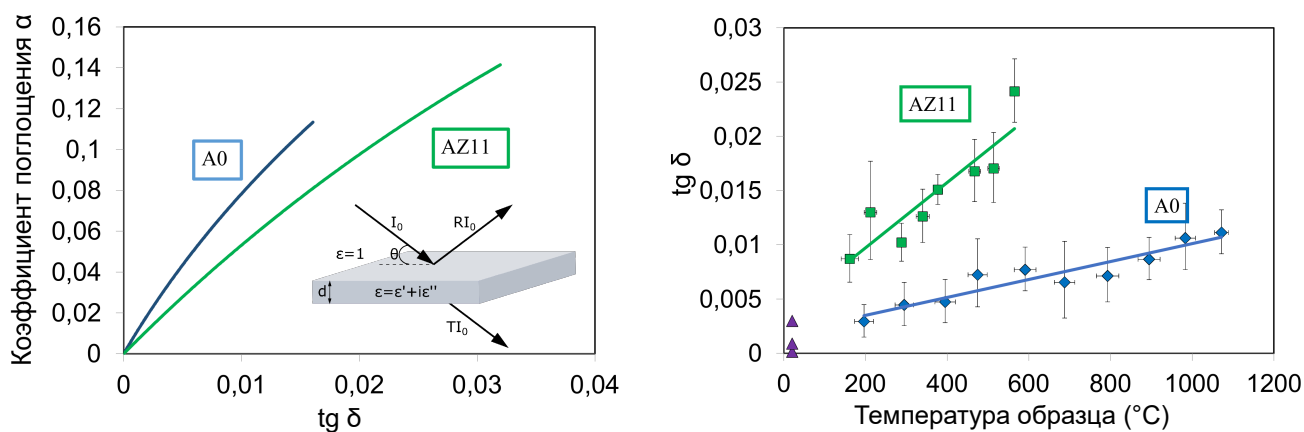
где  $\omega = 2\pi f$  – циклическая частота излучения,  $f=24$  ГГц,  $c$  – скорость света в вакууме,  $V$  – объем резонатора,  $S$  – площадь поверхности образца. Таким образом, результаты измерений сигнала мощности позволяют получить экспериментальную зависимость коэффициента поглощения микроволнового излучения в образце от температуры. Затем по измеренным значениям коэффициента поглощения можно рассчитать тангенс угла диэлектрических потерь исследуемых образцов в зависимости от температуры при известных значениях действительной части диэлектрической проницаемости образцов. Для теоретического расчета коэффициента поглощения использовалось известное решение задачи о поглощении электромагнитного излучения в плоском диэлектрическом слое конечной толщины [60; 62]. Толщина исследуемых образцов много меньше их поперечных размеров, поэтому вкладом боковых поверхностей можно пренебречь. Тогда коэффициент поглощения  $\alpha$  в материале определяется следующим выражением:

$$\alpha = \int_0^\pi A(\theta, \omega, \epsilon', \epsilon'', d) \sin \theta \cos \theta d\theta, \quad (2.27)$$

где  $A = \frac{A_{TE} + A_{TM}}{2}$  – поглощенная мощность, нормированная на мощность падающего излучения и усредненная по двум типам поляризации,  $\theta$  – угол между направлением падающей волны и поверхностью образца,  $d$  – толщина образца,  $\epsilon'$  и  $\epsilon''$  – действительная и мнимая части диэлектрической проницаемости образца.

Для определения диэлектрической проницаемости исследуемых пористых образцов сложного состава использовалось приближение эффективной среды (модель Бруггемана) [51]. Значения диэлектрической проницаемости  $Al_2O_3$  и  $ZrO_2$  при комнатной температуре взяты из экспериментальных исследований [63; 64]. Действительные части диэлектрической проницаемости этих оксидов в сантиметровом диапазоне длин волн слабо зависят от температуры в температурных диапазонах наших экспериментов [65], что позволяет зафиксировать значения действительной части эффективной диэлектрической проницаемости

образцов и получить аналитическую связь коэффициента поглощения с тангенсом угла диэлектрических потерь  $\alpha(\tan \delta)$ . На рисунке 2.5б представлены результаты расчетов и для сравнения приведены данные по тангенсу угла потерь глиноземной керамики аналогичного состава (99,5-99,7%  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) на частоте 15 ГГц при комнатной температуре.



а) Зависимость  $\alpha$  от  $\tan \delta$  (2.27)

б) Зависимость  $\tan \delta$  от температуры

Рисунок 2.5 — Определение температурной зависимости  $\tan \delta$  керамических материалов. Зеленые линии соответствуют образцу A0 с составом ( $>99,5\%$   $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), синие линии соответствуют образцу AZ11 с составом ( $88\%$   $\text{Al}_2\text{O}_3 + 11\%$   $\text{ZrO}_2 + 1\%$   $\text{Y}_2\text{O}_3$ ), пористость образцов составляет 20%. Данные на рисунке 2.5б, обозначенные фиолетовыми треугольниками, соответствуют керамике из чистой окиси алюминия (99,5 – 99,7%  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) на частоте 15 ГГц [66]

Точность определения коэффициентов поглощения составляет 10–30%, что приемлемо для большинства задач, связанных с использованием микроволнового нагрева для исследования и разработки таких прикладных процессов, как спекание и соединение керамических и композиционных материалов. Показано, что при известных диэлектрических проницаемостях компонентов измеряемых композиционных материалов можно определить тангенс угла потерь как функцию температуры материала. На использование предложенного метода действуют следующие ограничения:

- 1) размеры образца должны быть много больше длины волны излучения,
- 2) характерные поперечные размеры образца должны быть много больше его толщины, что необходимо для корректного использования модели равномерно нагретого плоского бесконечного диэлектрического слоя,

3) температура образца определяется мощностью падающего излучения и временем воздействия, и поэтому не является независимым параметром при измерениях.

## 2.4 Заключение по Главе 2

Предложена новая модель расчета эффективных диэлектрической и магнитной проницаемостей смеси частиц. В основе модели лежит равенство дипольного момента заданного объема эффективной однородной среды сумме всех дипольных моментов включений различных сортов. Таким образом, для использования данной модели необходимо рассчитать дипольный момент частицы каждого сорта, помещенной в однородную эффективную среду. Влияние всех частиц среды на поле внутри и снаружи отдельной частицы описывается эффективными характеристиками среды. В случае, когда эффективная среда состоит из сферических частиц, малых по сравнению с длиной волны в эффективной среде, уравнение на эффективную диэлектрическую проницаемость среды, полученное данным методом, полностью совпадает с уравнением, полученным методом усреднения полей по объему. Аналогично можно рассчитать и эффективную магнитную проницаемость смеси частиц, используя равенство полного магнитного момента эффективной среды суммарному магнитному моменту металлических частиц во внешнем высокочастотном магнитном поле, возникающему благодаря возбуждению в частицах вихревых электрических токов. Расчеты в рамках предложенной модели позволяют уточнить значения действительной и мнимой частей магнитной проницаемости металлических порошковых компактов в микроволновом диапазоне. С ростом концентрации частиц характер зависимостей и величины действительной и мнимой частей эффективной магнитной проницаемости, полученные в рамках новой модели, начинают заметно отличаться от результатов, полученных в ранее использовавшейся модели без учета взаимного влияния частиц друг на друга. Предложенная модель хорошо согласуется с результатами расчетов эффективной магнитной проницаемости на основе численного 3D-моделирования электромагнитного поля в микроволновом диапазоне в среде, состоящей из периодически расположенных сфери-

ческих частиц (гранцентрированная кубическая упаковка). Сформулированы условия применимости предложенной модели, и проверено их выполнение для металлических порошковых компактов на частотах микроволнового и миллиметрового диапазонов. Охарактеризован вклад собственной магнитной проницаемости материала частиц (например, для ферромагнетиков) в эффективную магнитную проницаемость. Разработанная модель может использоваться при расчетах микроволнового нагрева компактированных металлических порошковых материалов, лежащего в основе различных инновационных технологических процессов.

Реализован метод измерений диэлектрических свойств керамических композитных материалов в миллиметровом диапазоне, основанный на сравнении интенсивностей электромагнитного излучения в рабочей камере гиротронного комплекса при наличии и при отсутствии образца внутри камеры. Экспериментально получены температурные зависимости тангенса угла диэлектрических потерь на частоте 24 ГГц для материалов на основе  $\text{Al}_2\text{O}_3$  в широком диапазоне температур: для чистого  $\text{Al}_2\text{O}_3$  – при 200 – 1100 °С и для композита 88%  $\text{Al}_2\text{O}_3$  + 11 %  $\text{ZrO}_2$  + 1%  $\text{Y}_2\text{O}_3$  – при 200 – 600 °С. Преимуществом метода является определение диэлектрических потерь образцов, непосредственно размещаемых в нагревной камере установки для микроволновой обработки материалов. При этом микроволновое излучение используется как в качестве источника энергии, необходимой для нагрева образцов до заданной температуры, так и в качестве диагностического сигнала, что позволяет получать наиболее релевантные результаты.

### Глава 3. Генерация оптических гармоник в субволновых диэлектрических резонаторах

#### 3.1 Мультипольное разложение электромагнитного поля в базисе векторных сферических гармоник для задач линейного и нелинейного рассеяния субволновыми объектами

В однородной изотропной среде с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon$  и магнитной проницаемостью  $\mu$  в отсутствие каких-либо источников все векторы, характеризующие электромагнитное поле – напряжённость электрического поля  $\mathbf{E}$ , напряжённость магнитного поля  $\mathbf{H}$  (а также электрическая индукция  $\mathbf{D}$ , магнитная индукция  $\mathbf{B}$ , векторный потенциал  $\mathbf{A}$  и векторы Герца) удовлетворяют одному и тому же дифференциальному волновому уравнению, которое для временной зависимости  $e^{-i\omega t}$  сводится к векторному уравнению Гельмгольца

$$\Delta \mathbf{A} + k^2 \mathbf{A} = 0. \quad (3.1)$$

Здесь  $\Delta$  – векторный оператор Лапласа ( $\Delta \mathbf{A} = \nabla^2 \mathbf{A} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla \times \nabla \times \mathbf{A}$ ),  $k = \sqrt{\epsilon \mu} \omega / c$  – волновое число в среде. Нетрудно показать, что одно из решений векторного уравнения Гельмгольца 3.1 можно найти, просто взяв градиент любого решения  $\psi$  скалярного уравнения Гельмгольца

$$\mathbf{L} = \nabla \psi, \quad \Delta \psi + k^2 \psi = 0. \quad (3.2)$$

Другие независимые решения векторного уравнения Гельмгольца (3.1) можно получить с использованием фиксированного вектора  $\mathbf{a}$ , как это показано в [67]:  $\nabla \times (\mathbf{a}\psi)$  и  $\frac{1}{k} \nabla \times \nabla \times (\mathbf{a}\psi)$ , однако эти векторные поля не будут ни нормальными, ни чисто тангенциальными к сферическим поверхностям. Тангенциальное решение может быть построено с использованием радиального вектора  $\mathbf{r}$  вместо  $\mathbf{a}$ , тогда  $\mathbf{M} = \nabla \times (\mathbf{r}\psi)$ . Ортогональное решение принимает вид  $\mathbf{N} = \frac{1}{k} \nabla \times \nabla \times (\mathbf{r}\psi)$ . Отметим, что процедура построения решений с использованием векторов, пропорциональных координатному единичному вектору, возможна только в ограниченном числе ортогональных систем координат. Так, было показано, что по-

ля можно разложить на поперечную электрическую (ТЕ) и поперечную магнитную (ТМ) составляющие только относительно определенных координатных направлений в ортогональной системе координат [68]. Полученный таким образом набор векторных функций  $\{\mathbf{L}, \mathbf{M}, \mathbf{N}\}$  удовлетворяет теореме разложения Гельмгольца произвольного дифференцируемого векторного поля в виде суммы безвихревого и соленоидального полей.  $\mathbf{L}$  представляет собой продольную составляющую поля, параллельную волновому вектору  $\mathbf{k}$ , в то время как  $\mathbf{M}$  и  $\mathbf{N}$  представляют собой две поперечные волновому вектору составляющие.

Нас интересуют векторные функции, образующие полный набор решений уравнений Максвелла в свободном пространстве в сферической системе координат. Для построения такого набора мы будем использовать решения скалярного уравнения Гельмгольца в сферической системе координат [13]:

$$\psi_{lm}(\mathbf{r}) = z_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (3.3)$$

Здесь  $z_l(r)$  – сферические функции Бесселя порядка  $l$ , определяющие радиальную зависимость решения скалярного уравнения Гельмгольца. В зависимости от граничных условий задачи в качестве радиальной части решения могут использоваться сферические функции Бесселя первого рода  $j_l(r)$ , сферические функции Бесселя второго рода  $n_l(r)$  (сферические функции Неймана) или же сферические функции Ханкеля первого или второго родов  $h_l^{(1,2)}(r)$ , и их линейные комбинации. Угловая зависимость решений скалярного уравнения Гельмгольца определяется сферическими функциями  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  [13]:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}. \quad (3.4)$$

Здесь  $P_l^m(x)$  – присоединенные многочлены Лежандра. Сферические функции ортогональны:  $\int Y_{lm} Y_{l'm'}^* d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$ . Векторные функции  $\mathbf{M}_{lm}$ ,  $\mathbf{N}_{lm}$  и  $\mathbf{L}_{lm}$ , порождаемые скалярным потенциалом  $\psi_{lm}(\mathbf{r})$ , образуют семейство векторных сферических гармоник

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_{lm} &= \nabla \psi_{lm}, \\ \mathbf{M}_{lm} &= -i \hat{\mathbf{L}} \psi_{lm}, \\ \mathbf{N}_{lm} &= -\frac{i}{k} \nabla \times \hat{\mathbf{L}} \psi_{lm}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

$\mathbf{L}_{lm}$  называют продольными векторными сферическими гармониками, тогда как  $\mathbf{M}_{lm}$  и  $\mathbf{N}_{lm}$  называют магнитными и электрическими векторными сферическими гармониками соответственно или поперечными векторными сферическими гармониками. Построенная таким образом  $\mathbf{M}_{lm}$  всегда ортогональна радиус-вектору  $\mathbf{r}$ , а  $\mathbf{N}_{lm}$  содержит радиальную компоненту.

Индексы  $l$  и  $m$  называются соответственно орбитальным и продольным номером гармоники по аналогии с индексами порождающей скалярной гармоники. Индекс  $l$  также еще называют мультипольным порядком, а индекс  $m$  – азимутальным индексом. Ниже записаны компоненты векторных сферических гармоник в сферической системе координат. В качестве производящего потенциала использовалось скалярное решение уравнения Гельмгольца в виде  $\psi_{lm} = z_l(r) P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$ .

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_{lm} &= k \left\{ [z_l(\rho)]' P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \frac{z_l(\rho)}{\rho} \frac{dP_l^m(\cos \theta)}{d\theta} e^{im\varphi}, \frac{z_l(\rho)}{\rho} \frac{P_l^m(\cos \theta)}{\sin \theta} im e^{im\varphi} \right\}, \\ \mathbf{M}_{lm} &= \left\{ 0, z_l(\rho) \frac{P_l^m(\cos \theta)}{\sin \theta} im e^{im\varphi}, -z_l(\rho) \frac{dP_l^m(\cos \theta)}{d\theta} e^{im\varphi} \right\}, \\ \mathbf{N}_{lm} &= \left\{ l(l+1) \frac{z_l(\rho)}{\rho} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \frac{[\rho z_l(\rho)]'}{\rho} \frac{dP_l^m(\cos \theta)}{d\theta} e^{im\varphi}, \right. \\ &\quad \left. \frac{[\rho z_l(\rho)]'}{\rho} \frac{P_l^m(\cos \theta)}{\sin \theta} im e^{im\varphi} \right\}. \end{aligned} \tag{3.6}$$

Набор векторных сферических гармоник  $\{\mathbf{L}_{lm}, \mathbf{M}_{lm}, \mathbf{N}_{lm}\}$  дает полное решение векторного уравнения Гельмгольца для электромагнитного поля в сферической системе координат [44; 67]. Разложение полей по базису из векторных сферических гармоник применимо для решения целого ряда электродинамических задач, в частности для численного решения задач рассеяния электромагнитных волн субволновыми объектами произвольной формы благодаря достаточно быстрой сходимости [69].

### 3.1.1 Мультипольное разложение электромагнитного поля

В этом разделе будет показано, как разложить заданное электромагнитное поле  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{H}$  в ряд по векторным сферическим гармоникам  $\mathbf{L}_{lm}$ ,  $\mathbf{M}_{lm}$ ,  $\mathbf{N}_{lm}$  (3.6). Для этого сначала запишем разложение векторного потенциала  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ :

$$\mathbf{A} = \sum_{l,m} (a_{lm}\mathbf{M}_{lm} + b_{lm}\mathbf{N}_{lm} + c_{lm}\mathbf{L}_{lm}), \quad (3.7)$$

где  $a_{lm}$ ,  $b_{lm}$ ,  $c_{lm}$  – константы разложения, определяемые из граничных условий. Зафиксируем калибровку Лоренца, тогда в однородной изотропной среде с диэлектрической и магнитной проницаемостями  $\epsilon$  и  $\mu$  векторный потенциал  $\mathbf{A}$  связан со скалярным потенциалом  $\varphi$  следующим соотношением:  $\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{\epsilon\mu}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0$  (временная зависимость полей  $e^{-i\omega t}$ ).

Тогда, если волновое число в среде не равно нулю ( $k = \sqrt{\epsilon\mu}\omega/c \neq 0$ ), мы можем записать выражение для скалярного потенциала  $\varphi$  следующим образом:

$$\varphi = \frac{-ic}{\omega\epsilon\mu} \nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{-ic}{\omega\epsilon\mu} \sum_{lm} c_{lm} \nabla \cdot \mathbf{L}_{lm} = \frac{ick^2}{\omega\epsilon\mu} \sum_{lm} c_{lm} \psi_{lm} = \frac{i\omega}{c} \sum_{lm} c_{lm} \psi_{lm}. \quad (3.8)$$

Заметим, что полученное разложение электрического потенциала определяется только продольными гармониками  $\mathbf{L}_{lm}$ . Выражения для электрического поля  $\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$  и магнитного поля  $\mathbf{H} = \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{A}$  окончательно принимают вид

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= -\frac{i\omega}{c} \sum_{lm} c_{lm} \mathbf{L}_{lm} + \frac{i\omega}{c} \sum_{lm} (a_{lm}\mathbf{M}_{lm} + b_{lm}\mathbf{N}_{lm} + c_{lm}\mathbf{L}_{lm}) = \\ &= \frac{i\omega}{c} \sum_{lm} (a_{lm}\mathbf{M}_{lm} + b_{lm}\mathbf{N}_{lm}), \\ \mathbf{H} &= \frac{1}{\mu} \sum_{lm} (a_{lm} \nabla \times \mathbf{M}_{lm} + b_{lm} \nabla \times \mathbf{N}_{lm} + c_{lm} \nabla \times \mathbf{L}_{lm}) = \\ &= \frac{k}{\mu} \sum_{lm} (a_{lm}\mathbf{N}_{lm} + b_{lm}\mathbf{M}_{lm}). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Из полученных выражений следует, что пока  $k \neq 0$ , электрическое и магнитное поля определяются только поперечными векторными сферическими гармоника-



ми  $\mathbf{M}_{lm}$  и  $\mathbf{N}_{lm}$ , а продольные гармоники  $\mathbf{L}_{lm}$  не входят в разложение. Другими словами, для разложения соленоидального векторного поля требуются только поперечные электрические и магнитные гармоники  $\mathbf{M}_{lm}$  и  $\mathbf{N}_{lm}$ . Продольные векторные сферические гармоники  $\mathbf{L}_{lm}$  дают вклад в векторный и скалярный потенциалы и описывают неизлучающую часть электрического поля и ближне-польные эффекты.

Кроме того, нетрудно показать, что монопольные ( $l = 0$ ) электрические и магнитные гармоники также тождественно равны нулю везде в пространстве:  $\mathbf{M}_{00} = 0$ ,  $\mathbf{N}_{00} = 0$ . Таким образом, для поперечных полей суммирование в разложениях (3.9) начинается с  $l = 1$ , а значения продольного индекса  $m$  пробегают значения от  $-l$  до  $l$ .

Продольные гармоники играют роль в случае равенства нулю волнового числа  $k = 0$ , как например в электростатическом случае или в однородной среде с  $\epsilon = 0$ . В 1975 году Р. Руппин расширил классическую теорию Ми для расчета оптических свойств малых металлических сферических частиц [70]. Когда частота падающей волны превышает плазменную частоту свободного электронного газа в металле, падающее излучение возбуждает локализованный поверхностный плазмон. В этом представлении электрическое поле снаружи частицы (сумма электрических полей падающей и рассеянной волн) раскладывается в ряд с использованием только поперечных гармоник  $\mathbf{M}_{lm}$  и  $\mathbf{N}_{lm}$ , а электрическое поле внутри частицы, кроме поперечных гармоник, содержит еще и продольные гармоники  $\mathbf{L}_{lm}$ , соответствующие продольным плазменным колебаниям. При этом магнитное поле не содержит продольных гармоник и всюду определяется только поперечными гармониками. Полный базис векторных сферических гармоник  $\{\mathbf{L}_{lm}, \mathbf{M}_{lm}, \mathbf{N}_{lm}\}$  используется для описания нелокальных эффектов, таких как смещение плазмонного резонанса в синюю область и уширение линий, в металлических наноболочках, димерах металлических наночастиц и нанополосках типа Яги-Уда [71]. Полный базис также используется для описания электромагнитного отклика анизотропных полупроводниковых сферических частиц, когда одновременно учитываются пространственная дисперсия и гиротропия [72], а также для описания оптического отклика и нелокальных эффектов в многослойных металл-диэлектрических сферических наночастицах, в том числе и при отсутствии радиальной симметрии [73]. Электромагнитные поля представляют в виде ряда из соленоидальных  $\mathbf{M}_{lm}$  и  $\mathbf{N}_{lm}$  и безвихревых  $\mathbf{L}_{lm}$

векторных сферических гармоник, а затем из граничных условий определяют коэффициенты разложения.

Еще один вид базисных векторных функций, который часто встречается в литературе [44; 67] – чётные и нечётные векторные сферические гармоники, порождаемые следующими скалярными потенциалами:

$$\psi_{\epsilon lm}(\mathbf{r}) = z_l(\rho) P_l^m(\cos \theta) \begin{cases} \cos m\varphi \\ \sin m\varphi \end{cases}. \quad (3.10)$$

Здесь индексы  $\epsilon$  и  $o$  соответствуют чётным и нечётным решениям скалярного уравнения Гельмгольца. В силу полноты функций  $\cos m\varphi$ ,  $\sin m\varphi$ ,  $P_l^m(\cos \theta)$  и  $z_l(\rho)$  любое решение скалярного уравнения Гельмгольца можно разложить в ряд по функциям  $\psi_{\epsilon lm}$  и  $\psi_{o lm}$ . Также эти чётные и нечётные векторные сферические гармоники можно получить разделением действительной и мнимой частей экспоненциальных функций  $e^{im\varphi}$  и  $ime^{im\varphi}$  в (3.6)

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_{ml} &= \mathbf{L}_{\epsilon ml} + i\mathbf{L}_{o ml}, \\ \mathbf{M}_{ml} &= \mathbf{M}_{\epsilon ml} + i\mathbf{M}_{o ml}, \\ \mathbf{N}_{ml} &= \mathbf{N}_{\epsilon ml} + i\mathbf{N}_{o ml}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Решение векторного уравнения Гельмгольца в сферических координатах можно строить с использованием орбитальных векторных сферических гармоник, содержащих только угловую зависимость  $(\theta, \varphi)$ . В литературе встречаются различные наборы векторных сферических гармоник, удовлетворяющие свойствам ортогональности и полноты, например, базисный набор  $\{\mathbf{Y}_{lm}^{l-1}, \mathbf{Y}_{lm}^l, \mathbf{Y}_{lm}^{l+1}\}$  в книге Варшаловича [74],  $\{\mathbf{Y}_{lm}, \mathbf{\Psi}_{lm}, \mathbf{\Phi}_{lm}\}$  в работе Барреры [75], нормированные векторные сферические гармоники  $\mathbf{X}_{lm}$  в книге Дж. Джексона [13], входящие в полный набор  $\{\mathbf{X}_{lm}, \mathbf{Z}_{lm}, \mathbf{W}_{lm}\}$  [76],[77, см. главу 6]. Эти и другие базисные наборы векторных сферических гармоник эквивалентны друг другу или связаны друг с другом простыми соотношениями. Интерес использования таких наборов векторных полей состоит в том, чтобы разложить векторное поле на радиальную и поперечную составляющие относительно радиус-вектора  $\mathbf{r}$  в сферической системе координат и отделить радиальную зависимость от угловой.

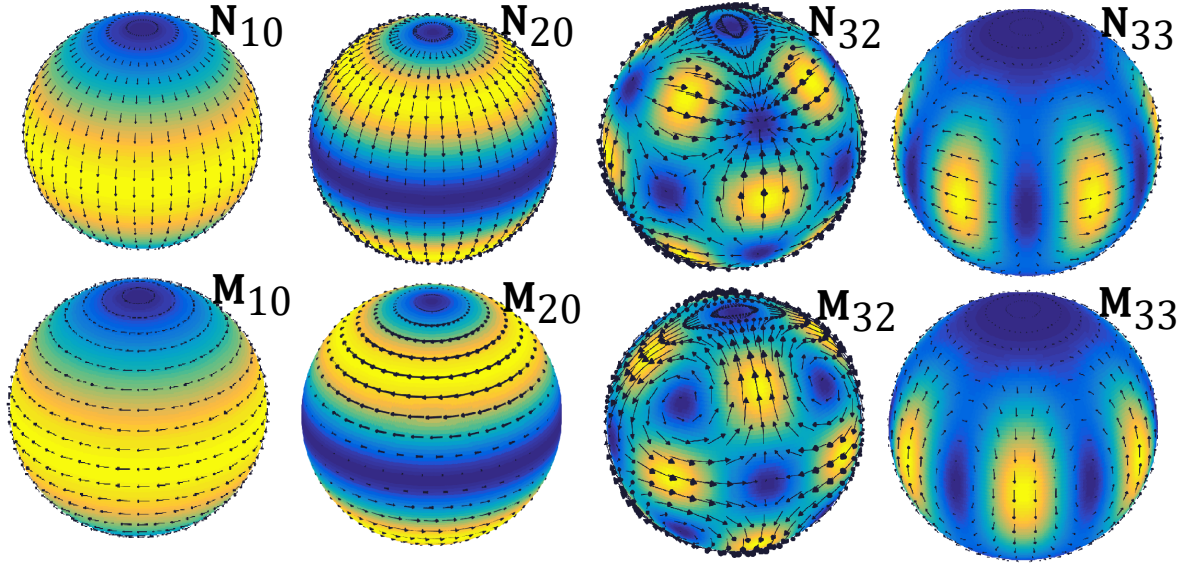


Рисунок 3.1 — Электрическое поле в дальней зоне некоторых членов семейства векторных сферических гармоник. Верхний ряд: электрические векторные сферические гармоники  $\mathbf{N}_{lm}$ . Нижний ряд: магнитные векторные сферические гармоники  $\mathbf{M}_{lm}$ . Стрелками изображена тангенциальная составляющая электрического поля на поверхности сферы радиуса  $R \gg \lambda$ , Цветом показано распределение интенсивности электромагнитного поля  $\propto |E_\theta|^2 + |E_\varphi|^2$ .

### 3.1.2 Векторные сферические гармоники

Этот раздел посвящен подробному рассмотрению угловых зависимостей векторных сферических гармоник  $\{\mathbf{L}_{lm}, \mathbf{M}_{lm}, \mathbf{N}_{lm}\}$  и их представления с использованием набора векторных функций  $\{\mathbf{X}_{lm}, \mathbf{Z}_{lm}, \mathbf{W}_{lm}\}$ , которые часто встречаются как в линейной, так и в нелинейной теории Ми [78; 79]. Угловые векторные сферические гармоники удобно использовать, например, для описания электрических и магнитных полей в дальней зоне, когда радиальная зависимость  $\mathbf{M}_{lm}, \mathbf{N}_{lm}$  аппроксимируется  $e^{ikr}/(kr)$  (см. раздел 3.1.3 ниже), или же, например, для получения правил отбора мультипольных вкладов в излучение на частоте второй гармоники при возбуждении аксиально-симметричных частиц (см. раздел 3.3)

Начнем с магнитных векторных сферических гармоник  $\mathbf{M}_{ml}$ :

$$\mathbf{M}_{lm} = -i\hat{\mathbf{L}}\psi_{lm} \propto z_l(\rho)\hat{\mathbf{L}}Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (3.12)$$

Заметим, что гармоники  $\mathbf{M}_{lm}$  перпендикулярны радиус-вектору  $\mathbf{r} \cdot \mathbf{M}_{lm} = 0$ , а их угловая зависимость определяется выражением  $\hat{\mathbf{L}}Y_{lm}(\theta, \varphi)$ . Это побуждает разделить радиальную и угловую части, и ввести в описание нормированные векторные сферические гармоники, описывающие только угловую зависимость  $(\theta, \varphi)$  и не содержащие радиальных частей  $z_l(kr)$  [13; 75]:

$$\mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{l(l+1)}} \hat{\mathbf{L}}Y_{lm} = \frac{-i}{\sqrt{l(l+1)}} \hat{\mathbf{r}} \times \nabla_{\theta, \varphi} Y_{lm}. \quad (3.13)$$

Здесь оператор  $\nabla_{\theta, \varphi}$  содержит только тангенциальные компоненты оператора градиента в сферической системе координат. Стоит отметить, что в литературе встречаются и другие определения гармоник  $\mathbf{X}_{lm}$ , например, без нормировочного множителя  $1/\sqrt{l(l+1)}$  и без комплексного множителя  $-i$  [75]. Ниже приводим компоненты нормированных векторных сферических гармоник в сферических координатах в терминах сферических функций

$$\mathbf{X}_{lm} = \frac{-1}{\sqrt{l(l+1)}} \left\{ 0, \frac{mY_{lm}(\theta, \varphi)}{\sin \theta}, i \frac{\partial Y_{lm}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right\}, \quad (3.14)$$

$$\mathbf{X}_{l, -m}(\theta, \varphi) = (-1)^{m+1} \mathbf{X}_{lm}^*(\theta, \varphi), \quad (3.15)$$

или в терминах присоединенных многочленов Лежандра

$$\mathbf{X}_{lm} = \frac{-1}{\sqrt{l(l+1)}} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} \left\{ 0, \frac{mP_l^m(\cos \theta)}{\sin \theta} e^{im\varphi}, \frac{dP_l^m(\cos \theta)}{d\theta} e^{im\varphi} \right\}. \quad (3.16)$$

Из ортогональности сферических функций  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  следует ортогональность векторных сферических гармоник  $\mathbf{X}_{lm}$ :

$$\int \mathbf{X}_{lm} \mathbf{X}_{l'm'}^* d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad \int \mathbf{X}_{lm} (\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{l'm'}^*) d\Omega = 0. \quad (3.17)$$

Подобным образом можно ввести нормированные векторные сферические гармоники  $\mathbf{Z}_{lm}$  и  $\mathbf{W}_{lm}$  для описания угловых частей  $\mathbf{N}_{lm}$  и  $\mathbf{L}_{lm}$ :

$$\mathbf{Z}_{lm}(\theta, \varphi) = \hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{i}{\sqrt{l(l+1)}} \nabla_{\theta, \varphi} Y_{lm}, \quad (3.18)$$

$$\mathbf{W}_{lm}(\theta, \varphi) = \hat{\mathbf{r}} Y_{lm}. \quad (3.19)$$

Условия ортогональности справедливы также и для векторных сферических гармоник  $\mathbf{Z}_{lm}$  и  $\mathbf{W}_{lm}$ :  $\int \mathbf{Z}_{lm} \mathbf{Z}_{l'm'}^* d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$  и  $\int \mathbf{W}_{lm} \mathbf{W}_{l'm'}^* d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$ . Оба набора векторных сферических гармоник  $\{\mathbf{X}_{lm}, \mathbf{Z}_{lm}, \mathbf{W}_{lm}\}$  и  $\{\mathbf{M}_{lm}, \mathbf{N}_{lm}, \mathbf{L}_{lm}\}$  одинаково часто встречаются в литературе и используются для описания одних и тех же мультипольных вкладов в разложении полей.

Для того чтобы записать векторные сферические гармоники  $\{\mathbf{M}_{ml}, \mathbf{N}_{ml}, \mathbf{L}_{ml}\}$  в терминах угловых векторных сферических гармоник  $\{\mathbf{X}_{lm}, \mathbf{Z}_{lm}, \mathbf{W}_{lm}\}$ , мы используем следующие соотношения

$$\begin{aligned} \nabla \times [f(kr) \mathbf{X}_{lm}] &= \frac{1}{r} \frac{d}{dr} [r f(kr)] \mathbf{Z}_{lm} + i \sqrt{l(l+1)} \frac{f(kr)}{r} \mathbf{W}_{lm}, \\ \nabla [f(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi)] &= \frac{df(kr)}{dr} \mathbf{W}_{lm} - i \sqrt{l(l+1)} f(kr) \mathbf{Z}_{lm}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

После подстановки вспомогательных выражений (3.20) в (3.5) мы получаем следующие соотношения между векторными гармониками  $\{\mathbf{M}_{lm}, \mathbf{N}_{lm}, \mathbf{L}_{lm}\}$  и  $\{\mathbf{X}_{lm}, \mathbf{Z}_{lm}, \mathbf{W}_{lm}\}$ :

$$\mathbf{M}_{lm} = \frac{-i}{O_{lm}} z_l(\rho) \mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi), \quad (3.21a)$$

$$\mathbf{N}_{lm} = \frac{1}{O_{lm}} \left( -i \frac{[\rho z_l(\rho)]'}{\rho} \mathbf{Z}_{lm} + \sqrt{l(l+1)} \frac{z_l(\rho)}{\rho} \mathbf{W}_{lm} \right), \quad (3.21b)$$

$$\mathbf{L}_{lm} = \frac{1}{O_{lm}} \left( \frac{k}{\sqrt{l(l+1)}} z_l'(\rho) \mathbf{W}_{lm} - i z_l(\rho) \mathbf{Z}_{lm} \right). \quad (3.21c)$$

Здесь  $O_{lm} = \frac{1}{\sqrt{l(l+1)}} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)}}$ , а производные означают дифференцирование по аргументу  $\rho = kr$ .

Наконец, мультипольное разложение произвольного электромагнитного поля в терминах нормированных векторных сферических гармоник  $\mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi)$  принимает вид:

$$\begin{aligned}
\mathbf{E} &= E_0 \sum_{l,m} \left( \frac{i}{k} a_E(l,m) \nabla \times [\mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi) f_l(kr)] + a_M(l,m) \mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi) g_l(kr) \right), \\
\mathbf{H} &= \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} E_0 \sum_{l,m} \left( a_E(l,m) \mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi) f_l(kr) - \frac{i}{k} a_M(l,m) \nabla \times [\mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi) g_l(kr)] \right).
\end{aligned} \tag{3.22}$$

Здесь  $f_l(kr)$  и  $g_l(kr)$  сферические функции Бесселя, Неймана или Ханкеля, или их линейные комбинации. Электрические и магнитные мультипольные коэффициенты  $a_E(l,m)$  и  $a_M(l,m)$  или, другими словами, амплитуды различных мультипольных вкладов в разложении определяются источниками электромагнитного поля и граничными условиями задачи. Такой вид мультипольного разложения используется в книге [13], но в системе единиц СГС. Стоит отметить, что мультипольные коэффициенты  $a_{E,M}$  могут быть определены иначе с точностью до постоянных множителей, в том числе размерных, таких как амплитуда электрического поля падающей волны  $E_0$ . Так, например, в работе [80] в мультипольном разложении перед каждым из мультипольных вкладов есть множитель  $i^l \sqrt{2l+1}$ , при этом сдвиг фаз между электрическими и магнитными мультиполями одного порядка не выделен явным образом.

Электромагнитное поле убегающей волны может быть представлено в общем виде следующим образом

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}_- &= E_0 \sum_{l,m} \left( \frac{i}{k} a_E(l,m) \nabla \times [h_l^{(1)}(kr) \mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi)] + a_M(l,m) h_l^{(1)}(kr) \mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi) \right), \\
\mathbf{H}_- &= \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} E_0 \sum_{l,m} \left( a_E(l,m) h_l^{(1)}(kr) \mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi) - \frac{i}{k} a_M(l,m) \nabla \times [h_l^{(1)}(kr) \mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi)] \right)
\end{aligned} \tag{3.23}$$

Здесь в качестве функций  $z_l^j(kr)$  везде используются сферические функции Ханкеля первого рода  $h_l^{(1)}(kr)$ , что соответствует убегающим волнам.

### 3.1.3 Излучение мультиполей

Рассмотрим электромагнитное поле, создаваемое некоторым ограниченным распределением зарядов и токов на расстояниях, значительно превышающих длину волны  $kr \gg 1$  (дальняя зона). Для того, чтобы записать приближенные выражения для электрического и магнитного полей в дальней зоне с точностью порядка  $o\left(\frac{1}{kr}\right)$ , воспользуемся асимптотическими выражениями для сферических функций Ханкеля первого рода. Так мы получим упрощенные выражения для базисных функций мультипольного разложения рассеянного поля:  $h_l^{(1)}(kr)\mathbf{X}_{lm}$  и  $\nabla \times [h_l^{(1)}(kr)\mathbf{X}_{lm}]$ . При больших значениях аргумента  $kr \gg 1$  сферические функции Ханкеля имеют асимптотику

$$h_l^{(1)}(kr \gg 1) \approx (-i)^{l+1} \frac{e^{ikr}}{kr}. \quad (3.24)$$

Таким образом, получаем приближенное выражение для электрического поля мультипольного вклада магнитного типа в дальней зоне:

$$\mathbf{E}_{-M,lm}(\mathbf{r}) \approx E_0 a_M(l,m) (-i)^{l+1} \frac{e^{ikr}}{kr} \mathbf{X}_{lm}. \quad (3.25)$$

Затем рассмотрим базисные функции, соответствующие электрическому полю мультипольных вкладов электрического типа, и применив оператор ротора в сферической системе координат, разделим радиальную и угловые части радиальной и тангенциальных компонент:

$$\begin{aligned} \nabla \times [h_l^{(1)}(kr)\mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi)] &= \frac{h_l^{(1)}(kr)}{r \sin \theta} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} (X_{lm\varphi} \sin \theta) - \frac{\partial X_{lm\theta}}{\partial \varphi} \right) \hat{\mathbf{r}} + \\ &+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r h_l^{(1)}(kr)) \hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{lm}. \end{aligned} \quad (3.26)$$

На большом расстоянии от рассеивателя мы можем пренебречь первым слагаемым (радиальной компонентой поля), поскольку оно пропорционально  $\frac{e^{ikr}}{(kr)^2}$  и имеет меньший порядок малости, чем  $\frac{1}{kr}$ . Приближенное выражение для ради-

альной части тангенциальной составляющей:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r h_l^{(1)}(kr) \right) = \frac{h_l^{(1)}(kr)}{r} + \frac{\partial}{\partial r} \left( h_l^{(1)}(kr) \right) \approx (-i)^l \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (3.27)$$

Здесь мы воспользовались рекуррентным соотношением для сферических функций Бесселя  $(2l+1)z'_l(\rho) = lz_{l-1}(\rho) - (l+1)z_{l+1}(\rho)$  и асимптотикой (3.24). Тогда вклад электрического мультиполя с индексами  $l, m$  в электрическое поле рассеянной волны принимает вид

$$\mathbf{E}_{-E,lm}(\mathbf{r}) \approx -E_0 a_E(l,m) (-i)^{l+1} \frac{e^{ikr}}{kr} \hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{lm}. \quad (3.28)$$

В результате электромагнитное поле рассеянной волны в дальней зоне можно записать в виде

$$\mathbf{E}_-(kr \gg 1) \approx E_0 \frac{e^{ikr}}{kr} \sum_{l,m} (-i)^{l+1} \left[ -a_E(l,m) \hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{lm} + a_M(l,m) \mathbf{X}_{lm} \right], \quad (3.29a)$$

$$\mathbf{H}_-(kr \gg 1) \approx \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} \hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{E}_-(kr \gg 1). \quad (3.29b)$$

Тогда выражение для вектора Пойтинга принимает вид

$$\mathbf{S} = \frac{c}{8\pi} \Re [\mathbf{E}_-(kr \gg 1) \times \mathbf{H}_-^*(kr \gg 1)] = \frac{c}{8\pi} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} |\mathbf{E}_-(kr \gg 1)|^2 \hat{\mathbf{r}}. \quad (3.30)$$

Для иллюстрации углового распределения интенсивности излучения в дальней зоне используется диаграмма направленности

$$F(\theta, \varphi) = \frac{dP}{d\Omega} = S_r r^2. \quad (3.31)$$

Диаграмма направленности характеризует среднее по времени значение мощности излучения  $P$  в единицу телесного угла  $\Omega$ . Для каждого отдельного мультиполя порядка  $l, m$  диаграмма направленности пропорциональна квадрату модуля соответствующей векторной сферической гармоники  $F_{lm}(\theta, \varphi) \sim |\mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi)|^2$ . Диаграммы направленности отдельных мультипольных вкладов в рассеянное поле для  $l = 1 \dots 3$ ,  $m = -l \dots l$  изображены на рисунке 3.2. Диаграммы направленности становятся многолепестковыми с увеличением мультипольного порядка  $l$ .



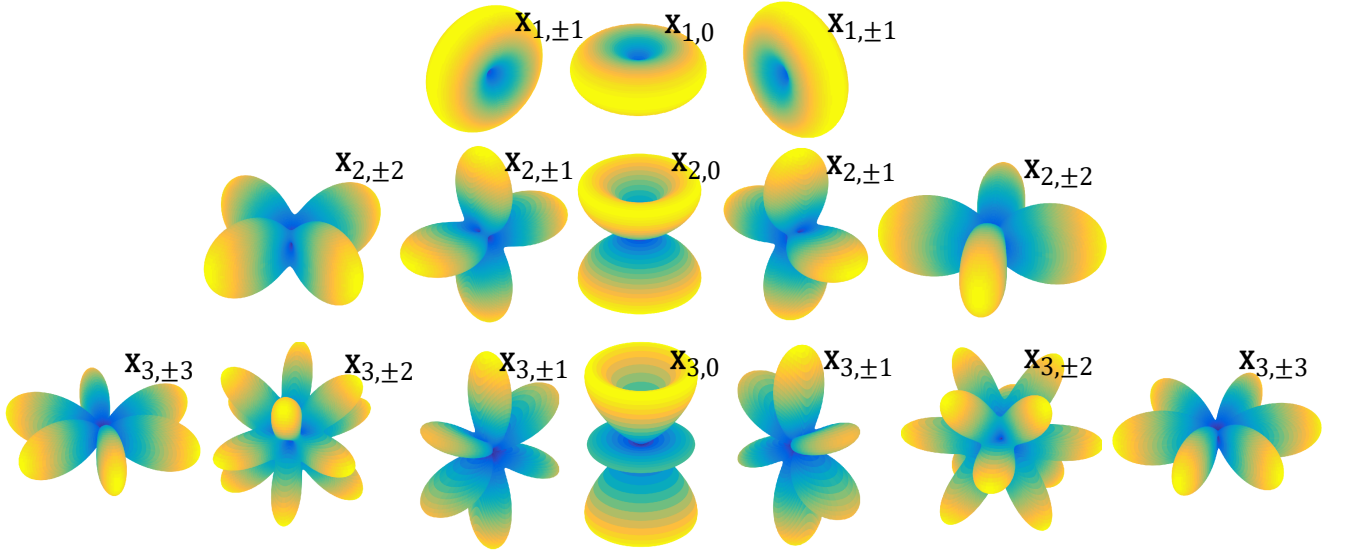


Рисунок 3.2 — Диаграммы направленности мультиполей  $|\mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi)|^2$ . Верхняя строка: дипольные вклады ( $l = 1$ ); средняя строка: квадрупольные вклады ( $l = 2$ ); нижняя строка: октопольные вклады ( $l = 3$ ).

Интегрируя вектор Пойнтинга рассеянного поля по сферической поверхности радиуса  $R$  с центром в начале координат и учитывая ортогональность векторных сферических гармоник, мы получаем мощность рассеяния (полный поток энергии волны рассеяния):

$$P = \oint \mathbf{S} \hat{\mathbf{r}} r^2 d\Omega = \frac{cE_0^2}{8\pi k^2} \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} \sum_{l,m} \left( |a_E(l,m)|^2 + |a_M(l,m)|^2 \right). \quad (3.32)$$

Мощность, переносимая суперпозицией расходящихся сферических волн, представляет собой некогерентную сумму мощностей отдельных мультиполей.

### 3.2 Генерация второй гармоники сферическими наночастицами из AlGaAs и BaTiO<sub>3</sub>

В данном разделе изложено решение задачи генерации второй гармоники (ГВГ) сферическими наночастицами из материалов с высоким значением показателя преломления и тензорной объемной квадратичной нелинейностью (полупроводник AlGaAs и диэлектрический перовскитный материал BaTiO<sub>3</sub>)

при возбуждении первого магнитодипольного резонанса на основной частоте [A6; A14; A15].

Рассмотрим сферическую наночастицу радиуса  $a$  из диэлектрического материала, возбуждаемую плоской линейно поляризованной волной  $\mathbf{E}_{\text{inc}} = E_0 e^{ik_0 z - i\omega t} \hat{\mathbf{x}}$ . Диэлектрическая проницаемость частицы зависит от частоты излучения  $\epsilon_\omega$ , частица окружена однородной средой (воздухом). В качестве исследуемых материалов выбраны AlGaAs или BaTiO<sub>3</sub>. Исследуемые материалы обладают сравнительно большими значениями показателя преломления в оптическом диапазоне и характеризуются малыми омическими потерями, благодаря чему различные мультипольные резонансы в спектре рассеяния для наночастиц из таких материалов имеют выраженный характер, как на основной частоте, так и на частоте второй гармоники. Кроме того, данные материалы способны обеспечить достаточно высокую эффективность нелинейного преобразования [7], поскольку нелинейный отклик исследуемых материалов характеризуется объёмным тензором квадратичной нелинейной восприимчивости  $\hat{\chi}^{(2)}$ . Длина волны падающего излучения в задаче была зафиксирована: 1550 нм для частиц из AlGaAs и 1050 нм для частиц из BaTiO<sub>3</sub>. Эти значения соответствуют частотам лазеров, используемых для наблюдения генерации второй гармоники из этих материалов: лазер Yb<sup>+3</sup> (1050 нм) и волоконный лазер, легированный Er<sup>+3</sup> (1550 нм). Размеры частиц лежат в одном диапазоне значений (радиус 180-250 нм), поскольку показатель преломления AlGaAs на основной частоте  $n \sim 3.5$  (см. рисунок 3.3), а для BaTiO<sub>3</sub> –  $n \sim 2.4$ .

Общая схема решения задачи генерации второй гармоники следующая. Сначала решается задача линейного рассеяния на основе метода мультипольного разложения полей по базису из векторных сферических гармоник, описанного выше в разделе 3.1. В рассматриваемом случае возбуждения сферической частицы плоской волной задача линейного рассеяния имеет точное аналитическое решение (задача Ми) [3]. В случае частиц более сложной формы используются приближенные решения или численные методы. Затем определяется нелинейный источник излучения. Индуцированная нелинейная поляризация на частоте второй гармоники определяется объёмным тензором квадратичной нелинейной восприимчивости  $\hat{\chi}$  и полем внутри частицы на основной частоте:

$$P_i^{(2\omega)}(\mathbf{r}) = \chi_{ijk} E_j^{(\omega)}(\mathbf{r}) E_k^{(\omega)}(\mathbf{r}), \quad (3.33)$$

где  $E_i^{(\omega)}(\mathbf{r})$  – декартовы компоненты электрического поля внутри частицы на основной частоте. Компоненты нелинейной поляризации можно также записать через элементы тензора  $d_{ij}$ :

$$\begin{pmatrix} P_x^{(2\omega)} \\ P_y^{(2\omega)} \\ P_z^{(2\omega)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & d_{14} & d_{15} & d_{16} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} & d_{25} & d_{26} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & d_{34} & d_{35} & d_{36} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x^{(\omega)} E_x^{(\omega)} \\ E_y^{(\omega)} E_y^{(\omega)} \\ E_z^{(\omega)} E_z^{(\omega)} \\ 2E_y^{(\omega)} E_z^{(\omega)} \\ 2E_x^{(\omega)} E_z^{(\omega)} \\ 2E_x^{(\omega)} E_y^{(\omega)} \end{pmatrix}, \quad (3.34)$$

В зависимости от типа кристаллической решетки те или иные элементы тензора могут быть равными друг другу или обращаться в 0 [81]. Плотность тока поляризации на частоте второй гармоники определяется следующим образом:

$$\mathbf{j}^{(2\omega)} = \frac{\partial \mathbf{P}^{(2\omega)}}{\partial t} = -2i\omega \mathbf{P}^{(2\omega)}. \quad (3.35)$$

Наконец, последний шаг заключается в расчете мультипольных полей, генерируемых на частоте второй гармоники заданным источником. В данной задаче вклад в генерацию второй гармоники поверхностными источниками имеет меньший порядок величины и был оставлена за рамками рассмотрения. Подробная теория генерации второй гармоники поверхностными источниками развита в работе [82] на примере сферических частиц из однородных материалов, обладающих центром симметрии.

Вблизи ярко выраженных резонансов Ми распределение поля внутри частицы, возбуждаемое падающей волной, можно аппроксимировать соответствующей собственной модой. Эффективного возбуждения той или иной мультипольной моды можно добиваться подбором типа падающего излучения. В данной задаче рассматриваются частицы, радиус которых соответствует возбуждению первого магнитодипольного резонанса на частоте падающего излучения, и если контраст показателя преломления материала частицы достаточно высокий ( $k_0 a \sqrt{\varepsilon} \cong \pi$ ), то вклад магнитодипольной моды в рассеянное поле будет преобладать над остальными. Тогда электрическое поле внутри частицы  $\mathbf{E}_{\text{in}}^{(\omega)}$  можно аппроксимировать следующим выражением (магнитный момент ориентирован

вдоль направления  $\hat{\mathbf{y}}$ ):

$$\mathbf{E}_{\text{in}}^{(\omega)}(r \leq a) \approx E_0 c_1 j_1(k_0 r \sqrt{\varepsilon_\omega}) \{ \mathbf{X}_{1,1}(\theta, \varphi) + \mathbf{X}_{1,-1}(\theta, \varphi) \}, \quad (3.36)$$

где  $k_0 = \omega/c$  – волновое число в вакууме,  $\varepsilon_\omega$  – диэлектрическая проницаемость частицы на основной частоте,  $j_1(r)$  – сферическая функция Бесселя первого рода порядка  $l = 1$ ,  $\mathbf{X}_{1,\pm 1}(\theta, \varphi)$  – векторные сферические гармоники (3.13),  $c_1$  – мультипольный коэффициент разложения электрического поля внутри частицы, известный из теории Ми.

Электромагнитное поле на частоте второй гармоники снаружи частицы также можно представить в виде разложения по мультипольным вкладам. Генерируемое поле представляет собой суперпозицию убегающих (расходящихся от начала координат) волн, и радиальная часть базисных функций в таком случае определяется сферическими функциями Ханкеля первого рода.

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^{(2\omega)}(r > a) &= \sum_{l,m} \left\{ a_M(l,m) h_l^{(1)}(2k_0 r) \mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{i}{2k_0} a_E(l,m) \nabla \times [h_l^{(1)}(2k_0 r) \mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi)] \right\}, \\ \mathbf{H}^{(2\omega)}(r > a) &= -\frac{i}{2k_0} \nabla \times \mathbf{E}^{(2\omega)} = \sum_{l,m} \left\{ a_E(l,m) h_l^{(1)}(2k_0 r) \mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{i}{2k_0} a_M(l,m) \nabla \times [h_l^{(1)}(2k_0 r) \mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi)] \right\}, \end{aligned} \quad (3.37)$$

где мультипольные коэффициенты  $a_E(l,m)$  и  $a_M(l,m)$  могут быть определены аналитически через интегральные выражения с использованием леммы Лоренца [13; 41]. Данный метод расчета мультипольных коэффициентов полей на второй гармонике сформулирован в работе [82], подробный его вывод изложен ниже в подразделе 3.2.1. Стоит обратить внимание, что введенные мультипольные коэффициенты в (3.37) имеют размерность напряженности электрического поля.

Поля снаружи частицы на частоте второй гармоники представляют собой суперпозицию убегающих волн. Для характеристик поля на частоте второй гармоники в дальней зоне справедливы все выводы, полученные ранее в разделе 3.1 для рассеянного поля снаружи произвольного субволнового рассеивателя (см. (3.29а), (3.31) и (3.32)). Ниже приведены аналогичные выражения для рассмат-

риваемой задачи. На больших расстояниях от частицы  $2k_0r \gg 1$  электрическое и магнитное поля принимают следующий вид:

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_f^{(2\omega)} &\approx \frac{e^{2ik_0r}}{2k_0r} \sum_{l,m} (-i)^{l+1} \left\{ a_M(l,m) \mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi) - a_E(l,m) \hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi) \right\}, \\ \mathbf{H}_f^{(2\omega)} &\approx \hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{E}_f.\end{aligned}\quad (3.38)$$

Используя выражение для вектора Пойнтинга  $\mathbf{S} = \frac{c}{8\pi} \text{Re} \left\{ \mathbf{E}_f^{(2\omega)} \times \mathbf{H}_f^{*(2\omega)} \right\}$ , получаем выражение для диаграммы направленности излучения

$$F(\theta, \varphi) \equiv S_r r^2 = \frac{c}{8\pi} \left| \mathbf{E}_f^{(2\omega)} \right|^2 r^2, \quad (3.39)$$

и выражение для полной мощности излучения на частоте второй гармоники

$$P^{(2\omega)} = \frac{c}{32\pi k_0^2} \sum_{l,m} (|a_E(l,m)|^2 + |a_M(l,m)|^2). \quad (3.40)$$

### 3.2.1 Лемма Лоренца

Неизвестные мультипольные коэффициенты разложения генерируемого поля на удвоенной частоте в ряд по векторным сферическим гармоникам могут быть найдены с использованием леммы Лоренца, записанной в следующем виде [82]:

$$\oint\!\!\!\oint_{S(V)} \left( \mathbf{E}^{(2\omega)} \times \mathbf{H}_1^{(2\omega)} - \mathbf{E}_1^{(2\omega)} \times \mathbf{H}^{(2\omega)} \right) d\mathbf{S} = \frac{4\pi}{c} \iiint \mathbf{j}^{(2\omega)} \mathbf{E}_1^{(2\omega)} dV. \quad (3.41)$$

Неизвестное генерируемое поле на удвоенной частоте  $(\mathbf{E}^{(2\omega)}, \mathbf{H}^{(2\omega)})$  определяется наведенным нелинейным током внутри частицы  $\mathbf{j}^{(2\omega)}$  и известным решением некой вспомогательной задачи  $(\mathbf{E}_1^{(2\omega)}, \mathbf{H}_1^{(2\omega)})$ . Здесь объем  $V$  ограничен сферической поверхностью  $S(V)$  с радиусом  $R \gg \pi c/\omega$ . Распределение тока поляризации известно из решения линейной задачи рассеяния (3.35). Кроме того, из качественного анализа источников мультипольного излучения [13, см. Главу 16, параграф 5], симметричного анализа [А6] или численных расчетов можно

определить, какие именно мультиполи будут генерироваться заданным нелинейным током  $\mathbf{j}^{(2\omega)}$ . В качестве вспомогательной задачи используется задача распределения электромагнитного поля, удовлетворяющего уравнениям Максвелла на частоте  $2\omega$  в среде без внешних источников с распределением диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_{2\omega}(\mathbf{r})$ . Распределение диэлектрической проницаемости во вспомогательной задаче то же, что и в исходной решаемой задаче, а именно: сферическая частица радиуса  $a$  с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_{2\omega}$  расположена в начале координат и окружена вакуумом:

$$\varepsilon_{2\omega}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \varepsilon_{2\omega}, & r \leq a, \\ 1, & r > a. \end{cases} \quad (3.42)$$

Электромагнитное поле  $(\mathbf{E}_1^{(2\omega)}, \mathbf{H}_1^{(2\omega)})$  снаружи частицы соответствует падающей и отраженной электрической (3.43) или магнитной (3.44) мультипольным модам:

$$\mathbf{H}_1^{(2\omega)}(\mathbf{r}) = \begin{cases} t_l^E j_l(2k_0 r \sqrt{\varepsilon_{2\omega}}) \mathbf{X}_{l,m}, & r \leq a \\ \left[ h_l^{(2)}(2k_0 r) + \eta_l^E h_l^{(1)}(2k_0 r) \right] \mathbf{X}_{l,m}, & r > a, \end{cases} \quad (3.43)$$

$$\mathbf{E}_1^{(2\omega)}(\mathbf{r}) = \frac{i}{2k_0 \varepsilon_{2\omega}(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}_1^{(2\omega)}(\mathbf{r}).$$

$$\mathbf{E}_1^{(2\omega)}(\mathbf{r}) = \begin{cases} t_l^M j_l(2k_0 r \sqrt{\varepsilon_{2\omega}}) \mathbf{X}_{l,m}, & r \leq a \\ \left[ h_l^{(2)}(2k_0 r) + \eta_l^M h_l^{(1)}(2k_0 r) \right] \mathbf{X}_{l,m}, & r > a, \end{cases} \quad (3.44)$$

$$\mathbf{H}_1^{(2\omega)}(\mathbf{r}) = -\frac{i}{2k_0} \nabla \times \mathbf{E}_1^{(2\omega)}(\mathbf{r}).$$

Выражения для коэффициентов прохождения  $t_l^{E,M}$  и отражения  $\eta_l^{E,M}$  сферических волн приведены в работе [82]. Они определяются из условий непрерывности тангенциальных компонент электрического и магнитного полей (3.43)-(3.44) на поверхности частицы ( $r = a$ ). Затем при подстановке в интегральное выражение (3.41) искомого и вспомогательных полей в виде мультипольных разложений (3.37) и (3.43)-(3.44), используется ортогональность векторных сферических гармоник (3.17). В результате алгебраических преобразований мультипольные коэффициенты  $a_{E,M}(l,m)$  искомого поля на частоте второй гармоники определяются объемными интегралами перекрытия нелинейного тока с вектор-

ными сферическими гармониками и коэффициентами прохождения сферических волн  $t_l^{E,M}$ :

$$\begin{aligned} a_E(l,m) &= \frac{4\pi i k_0 t_l^E}{c \varepsilon_{2\omega}} \iiint \mathbf{j}^{(2\omega)} \nabla \times (j_l(2k_0 r \sqrt{\varepsilon_{2\omega}}) \mathbf{X}_{l,m}^*(\theta, \varphi)) dV, \\ a_M(l,m) &= -\frac{8\pi k_0^2 t_l^M}{c} \iiint \mathbf{j}^{(2\omega)} \mathbf{X}_{l,m}^*(\theta, \varphi) j_l(2k_0 r \sqrt{\varepsilon_{2\omega}}) dV. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Коэффициенты прохождения сферических волн  $t_l^{E,M}$ , как и значения интегралов в (3.45), зависят от параметра  $k_0 a$ , т.е. соотношения между радиусом частицы и длиной волны, а также от диэлектрической проницаемости материала частицы на частоте второй гармоники  $\varepsilon_{2\omega}$ :

$$\begin{aligned} t_l^E &= \frac{i}{k_0 a} \left\{ j_l(2k_0 r \sqrt{\varepsilon_{2\omega}}) \frac{\partial}{\partial r} [r h_l^{(1)}(2k_0 r)] - \frac{h_l^{(1)}(2k_0 r)}{\varepsilon_{2\omega}} \frac{\partial}{\partial r} [r j_l(2k_0 r \sqrt{\varepsilon_{2\omega}})] \right\}^{-1} \Big|_{r=a}, \\ t_l^M &= \frac{i}{k_0 a} \left\{ j_l(2k_0 r \sqrt{\varepsilon_{2\omega}}) \frac{\partial}{\partial r} [r h_l^{(1)}(2k_0 r)] - h_l^{(1)}(2k_0 r) \frac{\partial}{\partial r} [r j_l(2k_0 r \sqrt{\varepsilon_{2\omega}})] \right\}^{-1} \Big|_{r=a}. \end{aligned} \quad (3.46)$$

В случае сферической частицы можно получить точные аналитические выражения для мультипольных коэффициентов (см. разделы 3.2.2 и 3.2.3 ниже). В случае аксиально-симметричных частиц, например, дисков, интегрирование в (3.45) по азимутальному углу  $\varphi$  дает значения азимутального индекса  $m$  генерируемых мультиполей, что также позволяет делать выводы о некоторых характеристиках генерируемого излучения, например, о направленности излучения (см. раздел 3.3). Для частиц произвольной формы можно найти значения интегралов (3.45) с помощью численных методов.

### 3.2.2 Генерация второй гармоники частицами из AlGaAs

Арсенид алюминия-галлия (AlGaAs) обладает кристаллической структурой типа цинковой обманки, и квадратичный тензор нелинейной восприимчивости содержит только три ненулевых недиагональных элемента  $\chi_{ijk}^{(2)} = \chi^{(2)} = d_{36} \approx 100$  пм/В для  $i \neq j \neq k$  в системе главных кристаллических осей  $[100] \parallel \hat{x}$ ,

$[010] \parallel \hat{y}$  и  $[001] \parallel \hat{z}$ . Компоненты индуцированного нелинейного тока определяются следующим образом  $j_i^{(2\omega)} = -2i\omega\chi^{(2)}E_j^{(\omega)}E_k^{(\omega)}$ . В магнитодипольном приближении (3.36) выражение для нелинейного тока можно записать в виде

$$\mathbf{j}^{(2\omega)} = (c_1 E_0 j_1(k_0 r \sqrt{\epsilon_\omega}))^2 \chi^{(2)} \frac{3i\omega}{\pi} \cdot \left( \sin\theta \sin\varphi \hat{\mathbf{r}} + \cos\theta \sin\varphi \hat{\boldsymbol{\theta}} + \cos\varphi \hat{\boldsymbol{\phi}} \right) \sin\theta \cos\theta \cos\varphi. \quad (3.47)$$

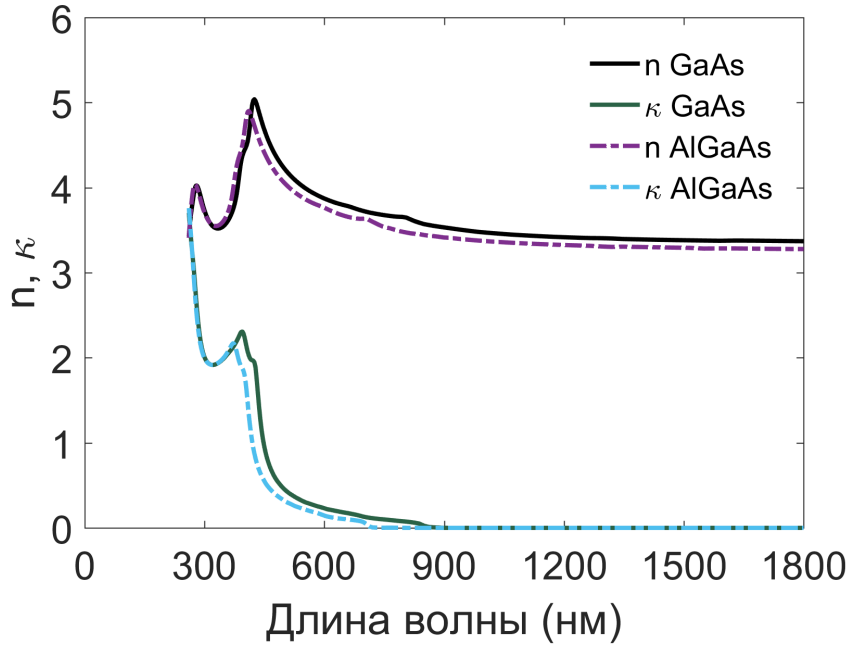


Рисунок 3.3 — Зависимость действительной  $n = \Re\sqrt{\epsilon}$  и мнимой частей  $\kappa = \Im\sqrt{\epsilon}$  показателя преломления GaAs и  $\text{Al}_{0.219}\text{Ga}_{0.781}\text{As}$

Расчеты показывают, что в рамках магнитодипольного приближения (3.36) мультипольный состав генерируемых полей второй гармоники характеризуется электрическим октуполем (EO) с  $l = 3, m = \pm 2$  и магнитными квадрупольями (MQ) с  $l = 2, m = 0$  и  $l = 2, m = \pm 2$ . Таким образом, генерируемое поле снаружи частицы можно представить в виде

$$\mathbf{E}^{(2\omega)}(r > a) \approx \frac{i}{2k_0} a_E(3,2) \nabla \times \left( h_3^{(1)}(2kr) (\mathbf{X}_{3,2} - \mathbf{X}_{3,-2}) \right) + a_M(2,0) h_2^{(1)}(2kr) \mathbf{X}_{2,0} + a_M(2,2) h_2^{(1)}(2kr) (\mathbf{X}_{2,2} + \mathbf{X}_{2,-2}). \quad (3.48)$$



Ниже приведены аналитические выражения для мультипольных коэффициентов на второй гармонике:

$$\begin{aligned}
a_M(2,0) &= (c_1 E_0)^2 \chi^{(2)} t_2^M \frac{8\sqrt{30\pi}}{5\varepsilon_\omega^{3/2}} I_2, \\
a_M(2,2) &= a_M(2,-2) = -\sqrt{\frac{1}{6}} a_M(2,0) = -(c_1 E_0)^2 \chi^{(2)} t_2^M \frac{4\sqrt{20\pi}}{5\varepsilon_\omega^{3/2}} I_2, \\
a_E(3,2) &= -a_E(3,-2) = -(c_1 E_0)^2 \chi^{(2)} t_3^E \frac{16\sqrt{70\pi}}{35\varepsilon_\omega \varepsilon_{2\omega}} \sqrt{\frac{\varepsilon_{2\omega}}{\varepsilon_\omega}} I_2,
\end{aligned} \tag{3.49}$$

где  $I_2$  обозначает следующий определенный интеграл:

$$I_2 = \int_0^{k_0 a \sqrt{\varepsilon_\omega}} j_1^2(x) j_2(\beta x) x^2 dx, \quad \beta = 2\sqrt{\frac{\varepsilon_{2\omega}}{\varepsilon_\omega}}. \tag{3.50}$$

Из выражений для мультипольных коэффициентов (3.49) следует, что вклады отдельных мультиполей в результирующее поле на частоте второй гармоники зависят от радиуса частицы и дисперсии диэлектрической проницаемости. На рисунке 3.4 показаны относительные вклады отдельных мультиполей в генерируемое поле на частоте второй гармоники. Вставки показывают, что при увеличении радиуса частицы диаграмма направленности меняется от квадрупольной при  $a = 200$  нм до многолепестковой октупольной при  $a = 234$  нм. Аналитические результаты совпадают с результатами полноволнового трехмерного численного моделирования методом конечных элементов, полученными способом, описанным в [82]. Эффективность генерации второй гармоники определяется как отношение полной излученной мощности на частоте второй гармоники  $P_{\text{SH}}$  в телесный угол  $4\pi$  к мощности падающего излучения, проходящего через геометрическое сечение частицы  $S = \pi a^2$ :

$$\rho = \frac{P_{\text{SH}}}{I_0 \pi a^2}, \tag{3.51}$$

здесь  $I_0$  – интенсивность падающей плоской волны,  $a$  – радиус частицы. Стоит отметить, что эффективность генерации второй гармоники, определенная таким способом, пропорциональна интенсивности падающего излучения. Действительно, мощность генерации второй гармоники пропорциональна квадрату интенсивности, поскольку определяется суммой квадратов модулей мультипольных коэффициентов, которые в свою очередь пропорциональны квадрату

амплитуды падающего поля. Максимальная эффективность генерации второй гармоники в рассматриваемом случае достигается при магнитооктупольном резонансе ( $a=234$  нм) и составляет порядка  $10^{-4}$  для значения интенсивности падающей волны  $I_0=1$  ГВт/см<sup>2</sup>.

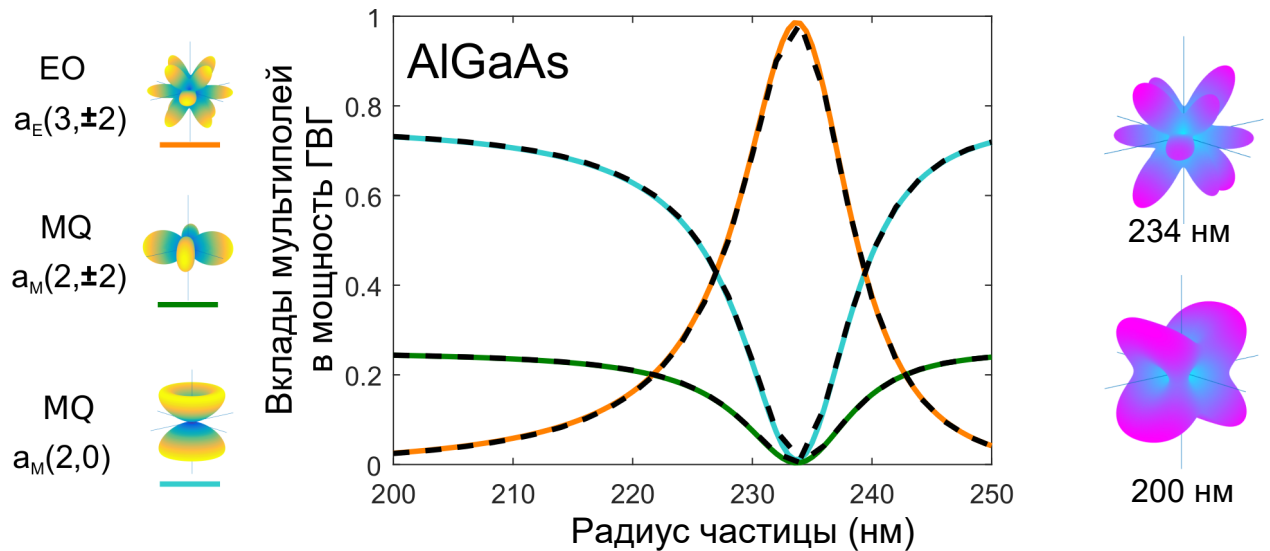


Рисунок 3.4 — Вклады отдельных мультиполей в эффективность генерации второй гармоники сферическими наночастицами из AlGaAs, длина волны падающего излучения  $\lambda=1550$  нм. Цветные сплошные линии соответствуют аналитическим результатам, штриховые линии соответствуют результатам численного моделирования. Слева показаны диаграммы направленности отдельных мультипольных вкладов в излучение на второй гармонике, справа – диаграммы направленности на частоте второй гармоники для частиц с радиусами 200 нм и 234 нм

### 3.2.3 Генерация второй гармоники частицами из ВаТiО<sub>3</sub>

Нелинейная поляризация на частоте второй гармоники в кристалле ВаТiО<sub>3</sub> имеет следующий вид:

$$\begin{pmatrix} P_x^{(2\omega)} \\ P_y^{(2\omega)} \\ P_z^{(2\omega)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x^{(\omega)} E_x^{(\omega)} \\ E_y^{(\omega)} E_y^{(\omega)} \\ E_z^{(\omega)} E_z^{(\omega)} \\ 2E_y^{(\omega)} E_z^{(\omega)} \\ 2E_x^{(\omega)} E_z^{(\omega)} \\ 2E_x^{(\omega)} E_y^{(\omega)} \end{pmatrix}, \quad (3.52)$$

где  $d_{31} = \chi_{zxx} = \chi_{zyy} = 15,7$  пм/В,  $d_{15} = \chi_{xxz} = \chi_{yyz} = 17$  пм/В и  $d_{33} = \chi_{zzz} = 6,8$  пм/В. В одномодовом магнитодипольном приближении (3.36) выражение для нелинейного тока на частоте второй гармоники  $\mathbf{j}^{(2\omega)} = -2i\omega\mathbf{P}^{(2\omega)}$  имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}^{(2\omega)} = & \frac{3i\omega}{2\pi} (c_1 E_0 j_1(k_0 r \sqrt{\epsilon_\omega}))^2 \cdot \\ & \cdot \left[ (-2d_{15} \sin^2 \theta \cos \theta \cos^2 \varphi + d_{13} \cos^3 \theta + d_{33} \sin^2 \theta \cos \theta \cos^2 \varphi) \hat{\mathbf{r}} \right. \\ & + (-2d_{15} \sin \theta \cos^2 \theta \cos^2 \varphi - d_{13} \sin \theta \cos^2 \theta - d_{33} \sin^3 \theta \cos^2 \varphi) \hat{\boldsymbol{\theta}} \\ & \left. + 2d_{15} \sin \theta \cos \theta \sin \varphi \cos \varphi \hat{\boldsymbol{\phi}} \right]. \end{aligned} \quad (3.53)$$

Мультипольный анализ источника показывает, что излучение на второй гармонике можно описать суперпозицией электрического диполя (ED) с  $l = 1, m = 0$ , электрического октуполя (EO) с  $l = 3, m = 0, \pm 2$  и магнитного квадруполя (MQ) с  $l = 2, m = \pm 2$ . В таком случае снаружи частицы электрическое поле генерируемого излучения на частоте второй гармоники можно

представить в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^{(2\omega)}(r > a) \approx \frac{i}{2k_0} \left[ a_E(1,0) \nabla \times \left( h_1^{(1)}(2k_0 r) \mathbf{X}_{1,0} \right) + a_E(3,0) \nabla \times \left( h_3^{(1)}(2k_0 r) \mathbf{X}_{3,0} \right) \right. \\ \left. + a_E(3,2) \nabla \times \left( h_3^{(1)}(2k_0 r) (\mathbf{X}_{3,2} + \mathbf{X}_{3,-2}) \right) \right] + a_M(2,2) h_2^{(1)}(2k_0 r) (\mathbf{X}_{2,2} - \mathbf{X}_{2,-2}), \end{aligned} \quad (3.54)$$

где мультипольные коэффициентов могут быть получены с помощью интегральных выражений (3.45) на основе леммы Лоренца.

$$\begin{aligned} a_E(1,0) &= (c_1 E_0)^2 t_1^E \frac{4\sqrt{6}\pi}{5\varepsilon_\omega \varepsilon_{2\omega}} \left( I_1 (2d_{13} - 3d_{15} - d_{33}) + \beta I_0 (d_{15} + d_{13} + 2d_{33}) \right), \\ a_M(2,2) &= -a_M(2, -2) = -(c_1 E_0)^2 t_2^M \frac{8\sqrt{5}\pi}{5\varepsilon_\omega^{3/2}} (d_{15} + d_{33}) I_2, \\ a_E(3,0) &= -(c_1 E_0)^2 t_3^E \frac{8\sqrt{21}\pi}{35\varepsilon_\omega \varepsilon_{2\omega}} (d_{33} - 2d_{15} - 2d_{13}) \beta I_2, \\ a_E(3,2) &= a_E(3, -2) = -(c_1 E_0)^2 t_3^E \frac{4\sqrt{70}\pi}{35\varepsilon_\omega \varepsilon_{2\omega}} (2d_{15} - d_{33}) \beta I_2. \end{aligned} \quad (3.55)$$

В выражениях (3.55)  $I_2$  – интеграл, вычисляемый по формуле (3.50), а  $I_0$  и  $I_1$  обозначают следующие интегралы:

$$I_0 = \int_0^{k_0 \sqrt{\varepsilon_\omega} a} j_1^2(x) j_0(\beta x) x^2 dx, \quad I_1 = \int_0^{k_0 \sqrt{\varepsilon_\omega} a} j_1^2(x) j_1(\beta x) x dx, \quad (3.56)$$

где  $\beta = 2\sqrt{\varepsilon_{2\omega}/\varepsilon_\omega}$ , как и в интеграле  $I_2$  (3.50). Значения интегралов  $I_0$ ,  $I_1$  и  $I_2$  выражаются через тригонометрические функции и интегральные синусы. При вычислении этих интегралов учитывалась дисперсия диэлектрической проницаемости частицы, для выбранных материалов значения диэлектрической проницаемости на основной и удвоенной частотах различны. Ниже приведены

результаты интегрирования.

$$I_0(x) = \frac{\beta^2 - 2}{8\beta} \left[ \text{Si}((\beta - 2)x) + \text{Si}((\beta + 2)x) - 2\text{Si}(\beta x) \right] + \frac{1}{2\beta x} \left[ \sin(\beta x) \sin(2x) - \beta \cos(\beta x) \sin^2 x \right] - \frac{\sin(\beta x) \sin^2 x}{2\beta x^2}. \quad (3.57)$$

$$I_1(x) = \frac{\beta^2 - 4}{32} \left[ \text{Si}((\beta - 2)x) + \text{Si}((\beta + 2)x) - 2\text{Si}(\beta x) \right] + \frac{1}{8\beta x} \left[ \cos(\beta x) (2 - \beta^2 \sin^2 x) + \beta \sin(2x) \sin(\beta x) \right] - \frac{1}{8\beta^2 x^2} \left[ \sin(\beta x) (\beta^2 \sin^2 x + 2) + 2\beta \sin(2x) \cos(\beta x) \right] + \frac{1}{4\beta^2 x^3} \left[ \beta \sin^2 x \cos(\beta x) + \sin(2x) \sin(\beta x) \right] - \frac{\sin(\beta x) \sin^2 x}{4\beta^2 x^4}. \quad (3.58)$$

$$I_2(x) = \frac{3}{\beta} I_1 - I_0 = -\frac{\beta^2 + 4}{32\beta} \left[ \text{Si}((\beta - 2)x) + \text{Si}((\beta + 2)x) - 2\text{Si}(\beta x) \right] + \frac{1}{8\beta^2 x} \left[ \cos(\beta x) (6 + \beta^2 \sin^2 x) - \beta \sin(2x) \sin(\beta x) \right] + \frac{1}{8\beta^3 x^2} \left[ \sin(\beta x) (\beta^2 \sin^2 x - 6) - 6\beta \sin(2x) \cos(\beta x) \right] + \frac{3}{4\beta^3 x^3} \left[ \beta \sin^2 x \cos(\beta x) + \sin(2x) \sin(\beta x) \right] - \frac{3 \sin(\beta x) \sin^2 x}{4\beta^3 x^4}. \quad (3.59)$$

В выражениях (3.57), (3.58) и (3.59) используется обозначение  $x = k_0 \sqrt{\epsilon_\omega} a$  (верхний предел интегрирования).

Результаты расчетов генерации второй гармоники для сферической наночастицы из  $\text{BaTiO}_3$  представлены на рисунке 3.5. Максимальная эффективность генерации второй гармоники, определенная по формуле (3.51), составляет порядка  $10^{-5}$  для  $I_0=1$  ГВт/см<sup>2</sup>.

Данный метод расчета мультипольных коэффициентов излучения на частоте второй гармоники (3.45) позволяет определять мультипольный состав излучения для различных ориентаций падающего излучения относительно кристаллических осей материала частицы. Получено, что в рамках магнитодипольного приближения для сферической частицы из  $\text{AlGaAs}$ , когда ее магнитный момент  $m_y$  на фундаментальной частоте параллелен кристаллической оси (010), мультипольный состав второй гармоники характеризуется магнитным квадруполем (MQ) с  $m = 0, \pm 2$  и электрическим октуполем (EO) с  $m = \pm 2$  (см.

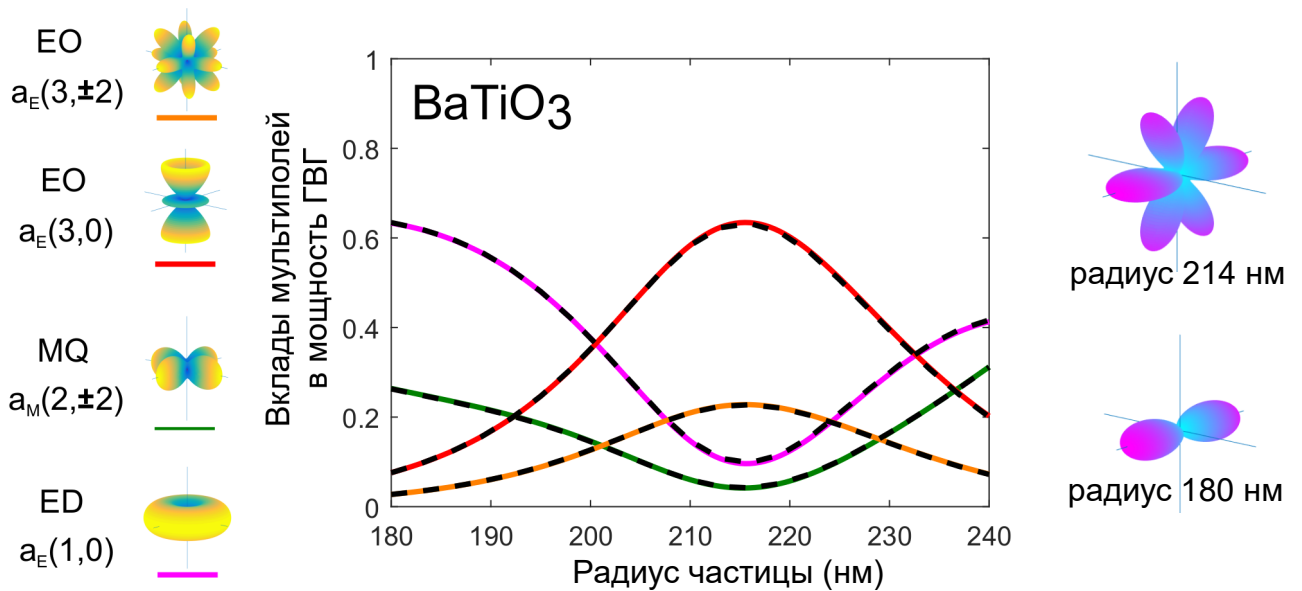


Рисунок 3.5 — Вклады отдельных мультиполей в эффективность генерации второй гармоники сферическими наночастицами из BaTiO<sub>3</sub>, длина волны падающего излучения  $\lambda=1050$  нм. Цветные сплошные линии соответствуют аналитическим результатам, штриховые линии соответствуют результатам численного моделирования. Слева показаны диаграммы направленности отдельных мультипольных вкладов в излучение на второй гармонике, справа - диаграммы направленности на второй гармонике для частиц с радиусами 180 нм и 214 нм

пример расчета на рисунке 3.4). При повороте поляризации падающей волны в плоскости  $(xy)$  на угол  $\pi/4$  ( $m_x = m_y$ ) генерируется еще и электрический диполь (ED) с  $m = 0$ . Частица из BaTiO<sub>3</sub> в случае  $m_y \parallel (010)$  излучает на второй гармонике как суперпозиция электрического диполя (ED) с  $m = 0$ , магнитного квадруполья (MQ) с  $m = \pm 2$  и электрического октуполья (EO) с  $m = 0, \pm 2$ , а при поляризации падающей волны, соответствующей возбуждению  $m_z \parallel (001)$ , магнитные мультипольные коэффициенты равны нулю, и в поле нелинейного рассеяния есть только электродипольный и электрооктупольный вклады с азимутальным индексом  $m = 0$ . Рисунки 3.4 и 3.5 показывают, что аналитические результаты в точности совпали с результатами численного моделирования.

### 3.3 Генерация второй гармоники наночастицами из GaAs, выращенными вдоль различных кристаллографических направлений

Интегральные выражения для мультипольных коэффициентов (3.45), полученные с использованием Леммы Лоренца, можно использовать в более общем случае аксиально симметричных частиц для определения азимутального индекса генерируемых мультиполей. Значения и четность азимутального индекса мультиполей на частоте второй гармоники дают некоторую информацию о характеристиках излучения в дальней зоне. Так, при возбуждении нормально падающим излучением аксиально-симметричных наночастиц из AlGaAs или GaAs, выращенных вдоль кристаллографического направления (100), генерируются мультиполи только с четными азимутальными индексами  $m = 0, \pm 2$ . Диаграмма направленности таких наноантенн характеризуется провалом вдоль оптической оси, излучение направлено преимущественно в боковые стороны, что обусловлено интерференцией генерируемых мультипольных вкладов (см. рисунок 3.2). Цилиндрические наноантенны из (100)-AlGaAs могут быть использованы для генерации пучков на частоте второй гармоники со сложным состоянием поляризации электрического поля, в частности, пучки с радиальной поляризацией [8]. Однако для таких приложений нанопотоники, как создание биологических или химических сенсоров, требуется повышать направленность нелинейных наноантенн вдоль оптической оси, чтобы обеспечить возможность детектирования сигнала при меньших значениях интенсивности падающей волны. Достигнуть лучшей направленности можно путём возбуждения наноантенны при наклонном падении волны накачки [83], или нарушением симметрии наноантенны [84]. Для исследуемых материалов AlGaAs, GaAs вид тензора нелинейной восприимчивости  $\hat{\chi}^{(2)}$  зависит от взаимной ориентации кристаллических осей и поляризации электрического поля падающей волны, поэтому для частиц, выращенных вдоль различных кристаллографических направлений, нелинейный отклик и мультипольный состав излучения на второй гармонике будет отличаться, и это можно использовать для управления характеристиками излучения, в частности, и для достижения лучшей направленности наноантенн

[A7; A8]. Этот раздел посвящен описанию нелинейного отклика наноантенн из GaAs, выращенных вдоль различных кристаллографических направлений.

В системе главных кристаллических осей [100], [010] и [001] тензор нелинейной восприимчивости GaAs имеет вид  $\chi_{ijk}^{(2)} = \chi^{(2)} = d_{36} = 100$  пм/В для  $i \neq j \neq k$ . Обозначим штрихами компоненты электрического поля и нелинейного тока в системе главных кристаллических осей GaAs, тогда их связь определяется соотношением :

$$J_i'^{(2\omega)} = -2i\omega\chi_{ijk}^{(2)}E_j'E_k'. \quad (3.60)$$

Лабораторная система координат выбрана так, что ось наноантенны совпадает с осью  $z$ . В случае наноантенн, выращенных вдоль кристаллографических направлений, отличных от (100), можно связать компоненты электрического поля внутри антенны в разных системах координат с помощью матрицы перехода  $\mathbf{T}$ :

$$\begin{pmatrix} E_x' \\ E_y' \\ E_z' \end{pmatrix} = \mathbf{T} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}. \quad (3.61)$$

Тогда можно получить связь нелинейного тока в системе кристаллических осей с электрическим полем в лабораторной системе координат

$$\begin{pmatrix} J_x' \\ J_y' \\ J_z' \end{pmatrix} = -4i\omega d_{36} \begin{pmatrix} E_y'E_z' \\ E_z'E_x' \\ E_x'E_y' \end{pmatrix} = -4i\omega d_{36} f(\mathbf{T}, \mathbf{E}). \quad (3.62)$$

Выражение для нелинейного тока в лабораторной системе координат можно получить с помощью обратной матрицы  $\mathbf{T}^{-1}$

$$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{pmatrix} = \mathbf{T}^{-1} \begin{pmatrix} J_x' \\ J_y' \\ J_z' \end{pmatrix}. \quad (3.63)$$

Матрица перехода между системами координат  $\mathbf{T}$  может быть представлена через произведение трех матриц поворота на углы Эйлера  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , где  $\alpha$  – угол поворота вокруг оси  $z$  (при этом ось  $x$  переходит в ось  $N$ ),  $\beta$  – угол поворота вокруг оси  $N$  (при этом ось  $z$  переходит в ось  $z'$ ) и  $\gamma$  – угол поворота



вокруг оси  $z'$  (при этом ось  $N$  переходит в ось  $x'$ ).

$$\mathbf{T} = R(\alpha, \mathbf{e}_z)R(\beta, \mathbf{e}_x)R(\gamma, \mathbf{e}_z) = \begin{pmatrix} \cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta \sin \alpha \sin \gamma & \sin \alpha \cos \gamma + \cos \beta \cos \alpha \sin \gamma & \sin \beta \sin \gamma \\ -\cos \alpha \sin \gamma - \cos \beta \sin \alpha \cos \gamma & -\sin \alpha \sin \gamma + \cos \beta \cos \alpha \cos \gamma & \sin \beta \cos \gamma \\ \sin \beta \sin \alpha & -\sin \beta \cos \alpha & \cos \beta \end{pmatrix}. \quad (3.64)$$

Обратная матрица  $\mathbf{T}^{-1}$  имеет следующий вид

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha \cos \gamma - \sin \alpha \cos \beta \sin \gamma & -\cos \alpha \sin \gamma - \sin \alpha \cos \beta \cos \gamma & \sin \alpha \sin \beta \\ \sin \alpha \cos \gamma + \cos \alpha \cos \beta \sin \gamma & -\sin \alpha \sin \gamma + \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma & -\cos \alpha \sin \beta \\ \sin \beta \sin \gamma & \sin \beta \cos \gamma & \cos \beta \end{pmatrix}. \quad (3.65)$$

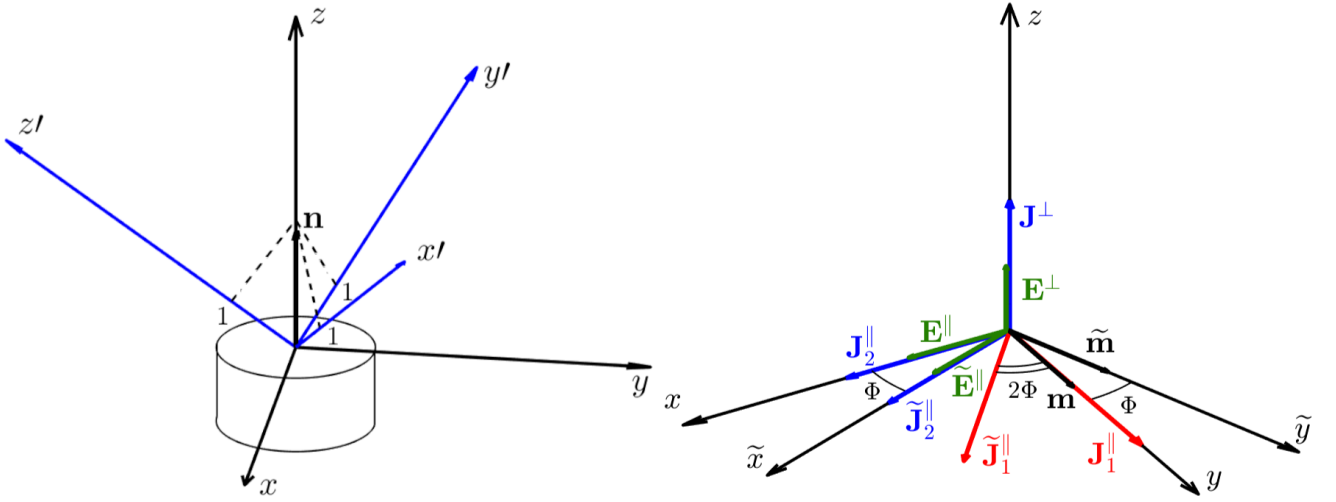
### 3.3.1 Нелинейный отклик наноантенн из (111)-GaAs

В этом разделе будут описаны особенности генерации второй гармоники наноантеннами из GaAs, выращенных вдоль кристаллографического направления (111) в среде с низким показателем преломления. Используемые методы мультипольного анализа помогают объяснить экспериментально наблюдаемые особенности впервые изготовленных наноантенн (111)-GaAs [A7; A16]. В экспериментах наблюдалось, что эффективность генерации второй гармоники в аксиально-симметричных наноантеннах не меняется при вращении поляризации плоской волны, падающей вдоль оси наноантенны в широком диапазоне размеров частиц, при этом диаграмма направленности зависит от угла поворота. Отличительная особенность цилиндрических наноантенн (111)-GaAs состоит в том, что при постоянной эффективности генерации второй гармоники диаграмма направленности излучения зависит от угла поворота падающего излучения, но повторяется каждые  $60^\circ$ , что объясняется трехкратной вращательной симметрией кристалла (111)-GaAs относительно оси наноантенны в сочетании с цилиндрической симметрией наноантенны. Эта особенность позволяет управлять излучением на второй гармонике вращением поляризации падающего из-

лучения, и она может быть использована, например, для передачи идентичных сигналов по разным направлениям.

Для кристалла, выращенного вдоль направления (111), углы Эйлера  $\alpha = 0$ ,  $\beta = \tan^{-1} \sqrt{2}$ ,  $\gamma = \pi/4$ , тогда  $\sin \gamma = \cos \gamma = \frac{1}{\sqrt{2}}$ ,  $\sin \beta = \sqrt{\frac{2}{3}}$ ,  $\cos \beta = \frac{1}{\sqrt{3}}$ , и матрица перехода  $\mathbf{T}$  и ее обратная матрица принимают вид:

$$\mathbf{T} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & 1 & \sqrt{2} \\ -\sqrt{3} & 1 & \sqrt{2} \\ 0 & -2 & \sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T}^{-1} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & -\sqrt{3} & 0 \\ 1 & 1 & -2 \\ \sqrt{2} & \sqrt{2} & \sqrt{2} \end{pmatrix}. \quad (3.66)$$



а) Наноантенна из (111)-GaAs

б) Схема вращения токов

Рисунок 3.6 — (а) Цилиндрическая наноантенна из GaAs, выращенная вдоль направления (111). Лабораторная система координат  $(x, y, z)$  и система координат, связанная с главными кристаллическими осями  $(x', y', z')$ . Пунктирными линиями показаны проекции нормали на  $\mathbf{n}$  на главные кристаллические оси. (б) Схема вращения нелинейного источника в цилиндрической наноантенне из (111)-GaAs в случае одномодового приближения. Предполагается, что поле внутри частицы на основной частоте описывается модой магнитного диполя с магнитным моментом  $\mathbf{m}$

Пусть электрическое поле внутри диэлектрического резонатора в лабораторной декартовой системе координат имеет все три компоненты  $\mathbf{E} = (E_x, E_y, E_z)$ . Тогда с использованием соотношения (3.61) запишем компоненты электрического поля  $\mathbf{E}' = (E'_x, E'_y, E'_z)$  в системе координат, связанной с глав-

ными кристаллическими осями

$$\begin{pmatrix} E'_x \\ E'_y \\ E'_z \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} \sqrt{3}E_x + E_y + \sqrt{2}E_z \\ -\sqrt{3}E_x + E_y + \sqrt{2}E_z \\ -2E_y + \sqrt{2}E_z \end{pmatrix}. \quad (3.67)$$

Затем, используя выражение (3.60), запишем компоненты нелинейного тока в системе главных кристаллических осей

$$\begin{pmatrix} J'_x \\ J'_y \\ J'_z \end{pmatrix} = -4i\omega d_{36} \begin{pmatrix} E'_y E'_z \\ E'_z E'_x \\ E'_x E'_y \end{pmatrix}. \quad (3.68)$$

Используя выражение  $\mathbf{J} = \hat{T}^{-1}\mathbf{J}'$  (3.63), мы получили выражение для нелинейного тока на второй гармонике в лабораторной системе координат. Нелинейный ток можно представить в виде суммы двух токов: продольного (лежащего в плоскости) и поперечного (вдоль оси диска)

$$\mathbf{J}(2\omega) = \mathbf{J}^{\parallel}(2\omega) + \mathbf{J}^{\perp}(2\omega). \quad (3.69)$$

Выражение для поперечной составляющей имеет вид

$$J^{\perp}(2\omega) \equiv J_z(2\omega) = -4i\omega d_{36} \left( -\frac{1}{\sqrt{6}} (E_x^2(\omega) + E_y^2(\omega)) + \frac{1}{\sqrt{3}} E_z^2(\omega) \right), \quad (3.70)$$

а ток, лежащий в плоскости, можно представить в виде двух слагаемых  $\mathbf{J}^{\parallel}(2\omega) = \mathbf{J}_1^{\parallel}(2\omega) + \mathbf{J}_2^{\parallel}(2\omega)$ , где

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_1^{\parallel}(2\omega) &= (J_{1x}^{\parallel}, J_{1y}^{\parallel}) = -4i\omega d_{36} \left( \sqrt{\frac{2}{3}} E_x(\omega) E_y(\omega), \frac{1}{\sqrt{6}} (E_x^2(\omega) - E_y^2(\omega)) \right), \\ \mathbf{J}_2^{\parallel}(2\omega) &= (J_{2x}^{\parallel}, J_{2y}^{\parallel}) = -4i\omega d_{36} \left( -\frac{1}{\sqrt{3}} E_x(\omega) E_z(\omega), -\frac{1}{\sqrt{3}} E_y(\omega) E_z(\omega) \right). \end{aligned} \quad (3.71)$$

### 3.3.1.1 Нелинейный ток в наномантене из (111)-GaAs при вращении поляризации падающего поля

Рассмотрим вопрос, как зависит нелинейный отклик от направления поляризации падающего излучения. Нас интересует случай, когда вектор поляризации электрического поля поворачивается в плоскости на угол  $\Phi$ . Повернутая система координат обозначена тильдами. Схема вращения токов изображена на рисунке 3.6б.

$$\begin{aligned}\tilde{E}_x &= \tilde{E}_{\tilde{x}} \cos \Phi - \tilde{E}_{\tilde{y}} \sin \Phi, & \tilde{J}_x &= \tilde{J}_x \cos \Phi + \tilde{J}_y \sin \Phi, \\ \tilde{E}_y &= \tilde{E}_{\tilde{x}} \sin \Phi + \tilde{E}_{\tilde{y}} \cos \Phi, & \tilde{J}_y &= -\tilde{J}_x \sin \Phi + \tilde{J}_y \cos \Phi, \\ \tilde{E}_z &= \tilde{E}_{\tilde{z}}, & \tilde{J}_z &= \tilde{J}_z.\end{aligned}\quad (3.72)$$

При вращении поляризации электрического поля компонента тока  $J_z$  не меняется, поскольку  $E_x^2(\omega) + E_y^2(\omega) = \text{const}$ ,  $E_z(\omega) = \text{const}$ . Для тока  $\mathbf{J}_1^{\parallel}(2\omega)$  получим

$$\begin{aligned}\tilde{J}_{1x}^{\parallel}(2\omega) &= -4i\omega d_{36} \sqrt{\frac{2}{3}} \tilde{E}_x \tilde{E}_y = -4i\omega d_{36} \sqrt{\frac{2}{3}} \left( \tilde{E}_{\tilde{x}} \tilde{E}_{\tilde{y}} \cos 2\Phi + \frac{\tilde{E}_{\tilde{x}}^2 - \tilde{E}_{\tilde{y}}^2}{2} \sin 2\Phi \right), \\ \tilde{J}_{1y}^{\parallel}(2\omega) &= -4i\omega d_{36} \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{\tilde{E}_x^2 - \tilde{E}_y^2}{2} = -4i\omega d_{36} \sqrt{\frac{2}{3}} \left( -\tilde{E}_{\tilde{x}} \tilde{E}_{\tilde{y}} \sin 2\Phi + \frac{\tilde{E}_{\tilde{x}}^2 - \tilde{E}_{\tilde{y}}^2}{2} \cos 2\Phi \right).\end{aligned}\quad (3.73)$$

Выражение для компонент тока в повернутой системе координат

$$\begin{aligned}\tilde{J}_{1\tilde{x}}^{\parallel}(2\omega) &= -4i\omega d_{36} \sqrt{\frac{2}{3}} \left( \tilde{E}_{\tilde{x}} \tilde{E}_{\tilde{y}} \cos 3\Phi + \frac{\tilde{E}_{\tilde{x}}^2 - \tilde{E}_{\tilde{y}}^2}{2} \sin 3\Phi \right), \\ \tilde{J}_{1\tilde{y}}^{\parallel}(2\omega) &= -4i\omega d_{36} \sqrt{\frac{2}{3}} \left( -\tilde{E}_{\tilde{x}} \tilde{E}_{\tilde{y}} \sin 3\Phi + \frac{\tilde{E}_{\tilde{x}}^2 - \tilde{E}_{\tilde{y}}^2}{2} \cos 3\Phi \right).\end{aligned}\quad (3.74)$$

Для тока  $\mathbf{J}_2^{\parallel}(2\omega)$  получаем, что он поворачивается в плоскости на угол  $\Phi$ , следуя за вращением электрического поля

$$\begin{aligned}\tilde{J}_{2x}^{\parallel}(2\omega) &= 4i\omega d_{36} \frac{\tilde{E}_x \tilde{E}_z}{\sqrt{3}} = 4i\omega d_{36} \frac{1}{\sqrt{3}} \left( \tilde{E}_{\tilde{x}} \tilde{E}_{\tilde{z}} \cos \Phi - \tilde{E}_{\tilde{y}} \tilde{E}_{\tilde{z}} \sin \Phi \right), \\ \tilde{J}_{2y}^{\parallel}(2\omega) &= 4i\omega d_{36} \frac{\tilde{E}_y \tilde{E}_z}{\sqrt{3}} = 4i\omega d_{36} \frac{1}{\sqrt{3}} \left( \tilde{E}_{\tilde{x}} \tilde{E}_{\tilde{z}} \sin \Phi + \tilde{E}_{\tilde{y}} \tilde{E}_{\tilde{z}} \cos \Phi \right).\end{aligned}\quad (3.75)$$

Выражения для компонент тока  $\tilde{\mathbf{J}}_2^{\parallel}(2\omega)$  в повернутой системе координат имеют тот же вид, что и в исходной.

$$\begin{aligned}\tilde{J}_{2\tilde{x}}^{\parallel}(2\omega) &= 4i\omega d_{36} \frac{\tilde{E}_{\tilde{x}} \tilde{E}_{\tilde{z}}}{\sqrt{3}}, \\ \tilde{J}_{2\tilde{y}}^{\parallel}(2\omega) &= 4i\omega d_{36} \frac{\tilde{E}_{\tilde{y}} \tilde{E}_{\tilde{z}}}{\sqrt{3}}.\end{aligned}\quad (3.76)$$

Таким образом, выражения для токов  $\mathbf{J}_2^{\parallel}(2\omega)$  и  $\mathbf{J}^{\perp}(2\omega)$  в исходной системе координат и системе координат, повернутой на угол  $\Phi$ , совпадают, в то время как  $\mathbf{J}_1^{\parallel}(2\omega)$  поворачивается на угол  $(-3\Phi)$ .

### 3.3.1.2 Мультипольный анализ нелинейного отклика (111)-GaAs

Для определения мультипольного состава генерируемого поля на второй гармонике в случае нанополос из (111)-GaAs достаточно провести расчеты в одной фиксированной системе координат. Мультипольные коэффициенты  $a_{E,M}(l, m)$  полей на второй гармонике могут быть найдены аналитически с помощью леммы Лоренца, как это описано выше в разделе 3.2.1. Для упрощения выкладок рассмотрим сферическую частицу, возбуждаемую плоской линейно поляризованной волной  $\mathbf{E}_i = E_0 e^{ik_0 z} \hat{\mathbf{x}}$ . Аналогичные рассуждения и расчеты можно провести и для цилиндрической наночастицы. В терминах векторных сферических гармоник выражения для электрического поля падающей волны и для электрического поля внутри рассеивателя  $\mathbf{E}_{in}$  содержат только функции с  $m = \pm 1$ . Тогда электрическое поле внутри частицы на основной частоте можно

представить в виде

$$\mathbf{E}_{\text{in}}^{(\omega)} = E_0 \sum_{l=1}^{\infty} \left( c_l j_l^{(1)}(k_0 r \sqrt{\varepsilon_\omega}) (\mathbf{X}_{l,1}(\theta, \varphi) + \mathbf{X}_{l,-1}(\theta, \varphi)) + \right. \\ \left. + \frac{1}{k_0 \sqrt{\varepsilon_\omega}} d_l \nabla \times \left[ j_l^{(1)}(k_0 r \sqrt{\varepsilon_\omega}) (\mathbf{X}_{l,1}(\theta, \varphi) - \mathbf{X}_{l,-1}(\theta, \varphi)) \right] \right), \quad (3.77)$$

где амплитудные коэффициенты  $c_l$  и  $d_l$  известны из теории Ми,  $j_l(k_0 r \sqrt{\varepsilon_\omega})$  – сферическая функция Бесселя первого рода порядка  $l$ . Векторные сферические гармоники  $\mathbf{X}_{l,m}(\theta, \varphi)$  содержат в себе множитель  $e^{im\varphi}$ , поэтому четность азимутального индекса  $m$  мультиполей определяется зависимостью нелинейного тока от азимутального угла  $\varphi$ . Определим, какие значения  $m$  содержат в себе различные слагаемые в выражении для нелинейного тока. Поле внутри частицы можно представить в более простом виде, оставив явно лишь зависимость от угла  $\varphi$ :

$$\mathbf{E}_{\text{in}} = f_1(r, \theta) \cos \varphi \hat{\mathbf{r}} + f_2(r, \theta) \cos \varphi \hat{\boldsymbol{\theta}} + f_3(r, \theta) \sin \varphi \hat{\boldsymbol{\phi}}. \quad (3.78)$$

Нелинейный ток (3.60) выражается через компоненты электрического поля внутри частицы в декартовой системе координат:

$$\begin{aligned} E_x &= (f_1 \sin \theta + f_2 \cos \theta) \cos^2 \varphi - f_3 \sin^2 \varphi, \\ E_y &= (f_1 \sin \theta + f_2 \cos \theta + f_3) \sin \varphi \cos \varphi, \\ E_z &= (f_1 \cos \theta - f_2 \sin \theta) \cos \varphi. \end{aligned} \quad (3.79)$$

Декартовы компоненты электрического поля на основной частоте и индуцированного нелинейного тока на частоте второй гармоники содержат разные различные слагаемые, пропорциональные  $e^{im\varphi}$ . Значения азимутального индекса для декартовых компонент электрического поля и нелинейного тока представлены в таблице 1.

Таблица 1 — Значения индекса  $m$  для декартовых компонент электрического тока внутри частицы и нелинейного тока

$E_x$	$E_y$	$E_z$	$J_{1x}^{\parallel}$	$J_{1y}^{\parallel}$	$J_{2x}^{\parallel}$	$J_{2y}^{\parallel}$	$J_z^{\perp}$
$0, \pm 2$	$\pm 2$	$\pm 1$	$\pm 2, \pm 4$	$0, \pm 2, \pm 4$	$\pm 1, \pm 3$	$\pm 1, \pm 3$	$0, \pm 2, \pm 4$

В интегральные выражения для мультипольных коэффициентов (3.45) входят компоненты нелинейного тока в сферической системе координат. После алгебраических преобразований получаем, что два типа токов, которые по-разному вращаются при повороте поляризации падающего поля, генерируют мультиполи различной четности азимутального индекса  $m$ : или только четные, или только нечетные.

$$\mathbf{J}_{\text{odd}} = \mathbf{J}_1^{\parallel}(2\omega), \quad \mathbf{J}_{\text{even}} = \mathbf{J}_2^{\parallel}(2\omega) + \mathbf{J}^{\perp}(2\omega). \quad (3.80)$$

Результаты представлены в таблице 2.

Таблица 2 — Значения индекса  $m$  для компонент нелинейного тока в сферической системе координат

	$J_{\text{odd},r,\theta,\varphi}$	$J_{\text{even},r,\theta,\varphi}$
$m$	$\pm 1, \pm 3, \pm 5$	$0, \pm 2, \pm 4$

Благодаря возможности генерации мультиполей с нечетным азимутальным индексом наноантенны из (111)-GaAs характеризуются лучшей направленностью по сравнению с наноантеннами (100)-GaAs. Запишем выражение для диаграммы направленности дальнего поля на частоте второй гармоники, выделяя вклады четных и нечетных мультиполей, порождаемых нелинейными токами  $\mathbf{J}_{\text{even}}$  и  $\mathbf{J}_{\text{odd}}$ :

$$\begin{aligned} F(\theta, \varphi) &= \frac{c}{8\pi} \text{Re} \left\{ \left( \mathbf{E}_{\text{even}}^{(2\omega)} + \mathbf{E}_{\text{odd}}^{(2\omega)} \right) \times \left( \mathbf{H}_{\text{even}}^{*(2\omega)} + \mathbf{H}_{\text{odd}}^{*(2\omega)} \right) \right\}_r r^2 = \\ &= \frac{c}{8\pi} \left\{ \sqrt{\frac{\varepsilon_h}{\mu_h}} \left( |\mathbf{E}_{\text{even}}^{(2\omega)}|^2 + |\mathbf{E}_{\text{odd}}^{(2\omega)}|^2 \right) + \text{Re} \left( \mathbf{E}_{\text{even}}^{(2\omega)} \times \mathbf{H}_{\text{odd}}^{*(2\omega)} + \mathbf{E}_{\text{odd}}^{(2\omega)} \times \mathbf{H}_{\text{even}}^{*(2\omega)} \right) \right\} r^2. \end{aligned} \quad (3.81)$$

Диаграмма дальнего поля (3.81) зависит от угла поворота  $\Phi$ , в то время как полная мощность излучения на второй гармонике не меняется при вращении поляризации падающей плоской волны. Последние два слагаемых пропорциональны  $e^{\pm i(m' - m'')\varphi}$ , где  $m'$  четно, а  $m''$  нечетно. Они не вносят вклада в полную мощность излучения на второй гармонике, поскольку их интегралы по азимутальному углу  $\varphi$  равны нулю.

$$P_{\text{SH}} = \frac{c|E_0|^2}{32\pi k^2} \sqrt{\frac{\varepsilon_h}{\mu_h}} \sum_{l,m} (|a_E(l,m)|^2 + |a_M(l,m)|^2) , \quad (3.82)$$

где  $k = k_0\sqrt{\varepsilon_h\mu_h}$  – волновое число в окружающей среде.

### 3.3.1.3 Нелинейный отклик частицы из (111)-GaAs при возбуждении магнитодипольного резонанса

Для качественного анализа мультипольного состава излучения на второй гармонике достаточно произвести интегрирование по углам  $\varphi$  и  $\theta$  в выражениях (3.45), чтобы определить, для каких значений  $l$  и  $m$  интегралы не обращаются в ноль. Ниже рассмотрен случай сферической частицы в системе координат с осью  $z$ , ориентированной вдоль направления (111), при возбуждении магнитодипольного резонанса, когда магнитный момент ориентирован вдоль оси  $y$ . В одномодовом магнитодипольном приближении электрическое поле внутри частицы можно аппроксимировать выражением (3.36). В таком случае выражение для четного вклада в нелинейный ток в сферической системе координат принимает вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{\text{even}} = & \frac{3\omega}{\sqrt{6}} d_{36} (c_1 E_0 j_1(k_0 r \sqrt{\varepsilon_\omega}))^2 \left[ \left( -\cos^3 \theta + \sqrt{2} \sin^2 \theta \cos \theta (1 + \cos 2\varphi) \right) \hat{\mathbf{r}} + \right. \\ & \left. + \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \sin \theta \cos 2\theta (1 + \cos 2\varphi) + \sin \theta \cos^2 \theta \right) \hat{\boldsymbol{\theta}} - \frac{\sqrt{2}}{2} \sin \theta \cos \theta \sin 2\varphi \hat{\boldsymbol{\phi}} \right]. \end{aligned} \quad (3.83)$$

В азимутальную зависимость компонент тока  $\mathbf{J}_{\text{even}}$  входят множители  $(1 + \cos 2\varphi)$  и  $\sin 2\varphi$ , следовательно, такой ток будет генерировать только мультиполи с азимутальным индексом  $m = 0, \pm 2$ . Компоненты нечетного вклада в



нелинейный ток запишутся в виде

$$\mathbf{J}_{\text{odd}} = \frac{3\omega}{\sqrt{6}} d_{36} (c_1 E_0 j_1(k_0 r \sqrt{\epsilon_\omega}))^2 \left[ \sin \theta \cos^2 \theta \sin \varphi \hat{\mathbf{r}} + \right. \\ \left. + \cos^3 \theta \sin \varphi \hat{\boldsymbol{\theta}} + \cos^2 \theta \cos \varphi \hat{\boldsymbol{\phi}} \right]. \quad (3.84)$$

В азимутальную зависимость компонент тока  $\mathbf{J}_{\text{odd}}$  входят множители  $(1 + \cos 2\varphi)$  и  $\sin 2\varphi$ , следовательно, такой ток будет генерировать только мультиполи с азимутальным индексом  $m = \pm 1$ . В случае сферической частицы интегрирование по углу  $\theta$  позволяет сделать вывод, что ток  $\mathbf{J}_{\text{even}}$  генерирует электрический диполь  $a_E(1,0)$ , электрические октуполи  $a_E(3,0)$  и  $a_E(3,2) = a_E(3,-2)$ , а также магнитный квадруполь  $a_M(2,2) = -a_M(2,-2)$ . При этом ток  $\mathbf{J}_{\text{odd}}$  генерирует электрический диполь  $a_E(1,1) = a_E(1,-1)$ , электрический октуполь  $a_E(3,1) = a_E(3,-1)$  и магнитный квадруполь  $a_M(2,1) = -a_M(2,-1)$ . Полученные результаты согласуются с результатами численного моделирования.

### 3.3.1.4 Моделирование нелинейного отклика цилиндрической нанопленки из (111)-GaAs

Было проведено численное моделирование генерации второй гармоники в нанодиске из (111)-GaAs при вращении поляризации плоской волны, падающей вдоль оси диска. Радиуса диска  $r=200$  нм, высота  $h=400$  нм, показатель преломления окружающей среды  $n_h = 1$ . На рисунке 3.7 показана расчетная зависимость эффективности генерации второй гармоники от угла поворота. Эффективность генерации второй гармоники определена здесь как отношение полной излучаемой мощности на второй гармонике к потоку энергии падающей волны через геометрическое сечение частицы (3.51). Нижние вставки показывают, что диаграмма направленности излучения на второй гармонике повторяет трехкратную симметрию решетки типа цинковой обманки относительно направления (111) и повторяется каждые  $60^\circ$  при вращении поляризации дающего излучения. Расчетная эффективность генерации второй гармоники составляет в

таком случае  $\rho = 4.5 \cdot 10^{-5}$  и остается независимой от угла поворота, что согласуется с экспериментальными результатами.

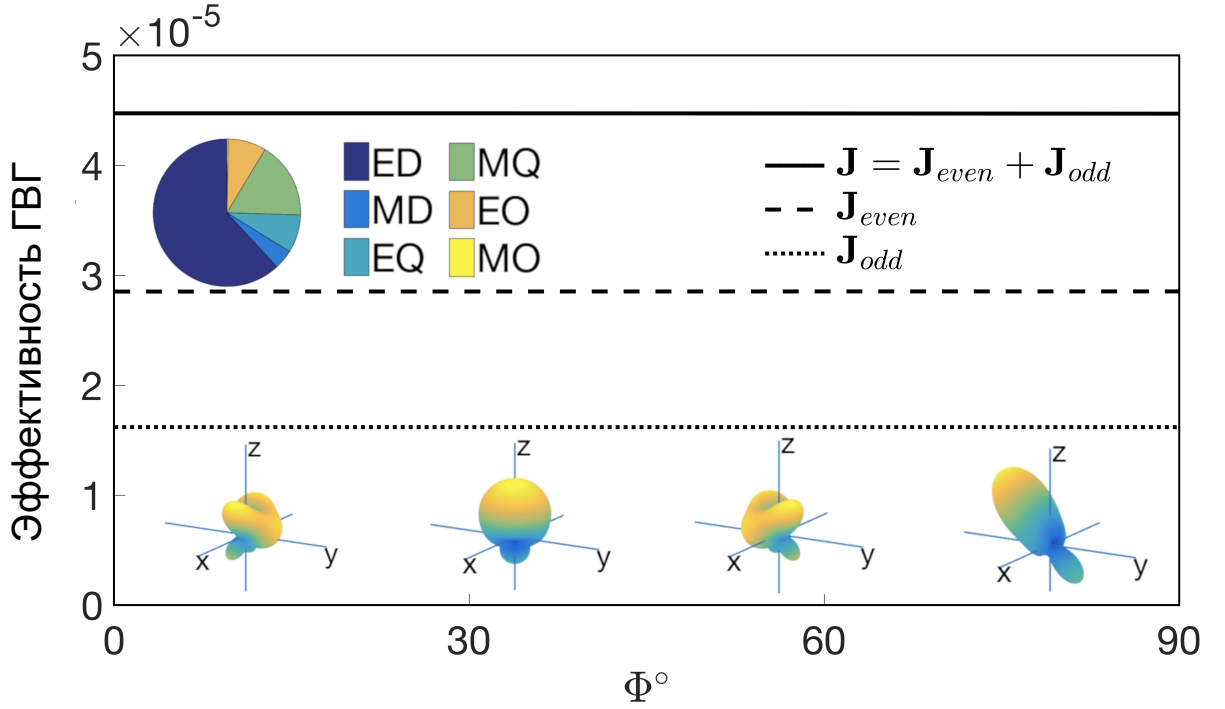


Рисунок 3.7 — Зависимость эффективности генерации второй гармоники от угла поворота поляризации падающего излучения  $\Phi$ , рассчитанная для нанодиска (111)-GaAs с радиусом  $r = 200$  нм и высотой  $h = 400$  нм в вакууме. Верхняя вставка показывает мультипольный состав излучения на второй гармонике, не меняющийся при вращении. Нижние вставки показывают диаграммы направленности излучения на второй гармонике для углов поворота  $\Phi = 0^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$

Нелинейный ток  $\mathbf{J}_{\text{even}}$  порождает электрический диполь  $a_E(1,0)$ , электрический квадруполь  $a_E(2,0)$  электрические октуполи  $a_E(3,0)$  и  $a_E(3,2) = a_E(3,-2)$ , магнитные квадруполи  $a_M(2,2) = -a_M(2,-2)$  и магнитные октуполи  $a_M(3,2) = -a_M(3,-2)$ , а нелинейный ток  $\mathbf{J}_{\text{odd}}$  порождает электрический диполь  $a_E(1,1) = a_E(1,-1)$ , электрические квадруполи  $a_E(2,1) = a_E(2,-1)$ , электрические октуполи  $a_E(3,1) = a_E(3,-1)$ , магнитные диполи  $a_M(1,1) = -a_M(1,-1)$ , магнитные квадруполи  $a_M(2,1) = -a_M(2,-1)$ , магнитные октуполи  $a_M(3,1) = -a_M(3,-1)$ . Две системы токов, вращающиеся по-разному, генерируют мультиполи на второй гармонике с различной четностью азимутального индекса  $m$ . При этом вклад в эффективность генерации второй гармоники четного и нечетного токов не зависит от угла поворота электрического поля на основной частоте.

те в плоскости на угол  $\Phi$ , и таким образом полная эффективность генерации второй гармоники не меняется.

### 3.3.2 Нелинейный отклик наноантенн из (110)-GaAs

Этот раздел посвящен мультипольному анализу нелинейного отклика наноантенн из GaAs, выращенных вдоль направления (110) [A8; A17]. Аналогично тому, как это было сделано для наноантенн из (111)-GaAs в разделе 3.3.1, матрица перехода  $\hat{\mathbf{T}}$  между системами координат позволяет получить выражение для нелинейного тока внутри частицы и затем определить мультипольный состав генерируемого излучения на второй гармонике и его характеристики. Мультипольный анализ показал, что при нормальном падении линейно поляризованного излучения нелинейный ток в таких наноантеннах генерирует мультиполи только с нечетными значениями азимутального индекса  $m$ . Эта особенность обеспечивает наилучшую направленность излучения на второй гармонике вдоль оптической оси по сравнению с наноантеннами, выращенными вдоль других направлений, что было подтверждено в эксперименте с цилиндрическими наноантеннами [A8] в широком диапазоне радиусов частиц. Кроме того, экспериментально было продемонстрировано, что при определенных параметрах наноантенны из (110)-GaAs обладают свойствами направленного нелинейного оптического переключателя излучения вперед-назад, что достигается путем вращения поляризации волны, падающей вдоль оси наноантенны.

Для кристалла, выращенного вдоль направления (110), углы Эйлера  $\beta = \pi/4$ ,  $\gamma = 0$ ,  $\alpha$  – угол между осями  $x$  и  $x'$  в лабораторной системе координат и в системе координат, связанной с кристаллическими осями, соответственно. Тогда матрица перехода  $\mathbf{T}$  и обратная матрица  $\mathbf{T}^{-1}$  принимают следующий вид:

$$\mathbf{T} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{2} \cos \alpha & \sqrt{2} \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 1 \\ \sin \alpha & -\cos \alpha & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T}^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & -\sin \alpha & \sin \alpha \\ \sqrt{2} & \cos \alpha & -\cos \alpha \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.85)$$

Используя связь  $\mathbf{J} = \hat{T}^{-1}\mathbf{J}'$ , получаем выражение для нелинейного тока на второй гармонике в лабораторной системе координат

$$\begin{aligned} J_x &= i\omega\chi^{(2)}[-E_y^2 \cos^3 \alpha + 2E_x E_y \sin \alpha (3 \cos^2 \alpha - 1) + \\ &+ \cos \alpha \{E_z^2 + (-3E_x^2 + 2E_y^2) \sin^2 \alpha\}], \\ J_y &= i\omega\chi^{(2)}[-2E_x E_y \cos^3 \alpha - E_z^2 \sin \alpha + (2E_x^2 - E_y^2) \cos^2 \alpha \sin \alpha + E_x^2 \sin^3 \alpha], \\ J_z &= 2i\omega\chi^{(2)} E_z [E_x \cos \alpha + E_y \sin \alpha]. \end{aligned} \tag{3.86}$$

Для определения возможных значений азимутального индекса  $m$  генерируемых мультиполей выделим отдельные слагаемые  $e^{im\varphi}$  в выражении для компонент нелинейного тока в сферической системе координат. В случае возбуждения диска нормально падающей линейно поляризованной плоской волной поле внутри частицы описывается мультиполями с азимутальным индексом  $m = \pm 1$  и представимо в виде (3.78). Полученные значения индекса  $m$  записаны в таблице 3. В случае частицы из (110)-GaAs компоненты нелинейного тока в сферической системе координат содержат слагаемые только с нечетными значениями азимутального индекса  $m$ , а именно  $m = \pm 1, \pm 3, \pm 5$ , и можно сделать вывод, что мультиполи именно с такими азимутальными индексами будут генерироваться на частоте второй гармоники.

Таблица 3 — Значения индекса  $m$  для компонент электрического поля внутри частицы и нелинейного тока поляризации

$E_x$	$E_y$	$E_z$	$J_{x,y}$	$J_z$	$J_{r,\theta,\varphi}$
$0, \pm 2$	$\pm 2$	$\pm 1$	$0, \pm 2, \pm 4$	$\pm 1, \pm 3$	$\pm 1, \pm 3, \pm 5$

На рисунке 3.8 показаны расчетные зависимости эффективности генерации второй гармоники и наиболее значимых вкладов отдельных мультиполей от угла поворота поляризации падающего излучения для цилиндрической наноантенны из (110)-GaAs. Радиус наноантенны  $r_0 = 210$  нм, высота  $h = 400$  нм, показатель преломления окружающей среды  $n = 1.44$ , вакуумная длина волны падающего излучения  $\lambda_0 = 1450$  нм. При таких параметрах в эксперименте достигалось переключение направления излучения вперёд-назад путем вращения поляризации накачки. На рисунке 3.8 справа приведены сечения диаграмм направленности излучения на второй гармонике во взаимно ортогональных плос-

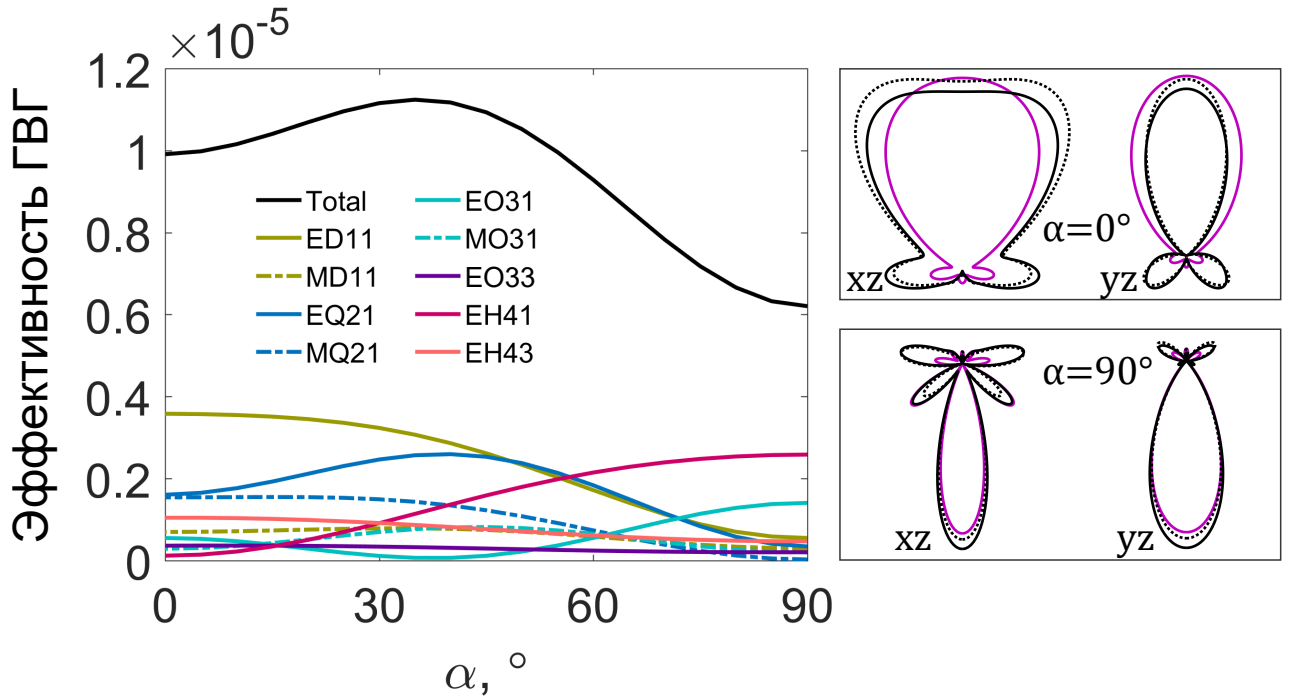


Рисунок 3.8 — Зависимость эффективности генерации второй гармоники и вкладов отдельных мультиполей от угла поворота поляризации падающего излучения  $\alpha$  в плоскости  $xy$  для нанодиска из (110)-GaAs. Радиус  $r = 210$  нм, высота  $h = 400$  нм, длина волны падающего излучения  $\lambda = 1450$  нм, показатель преломления окружающей среды  $n_h = 1,44$ . Вставки справа показывают поперечные сечения диаграмм направленности дальнего поля на второй гармонике во взаимно ортогональных плоскостях ( $xz$ ) и ( $yz$ ) (черные сплошные линии), диаграммы направленности наборов мультиполей до  $l = 4$  (черные пунктирные линии) и диаграммы направленности сокращенных наборов мультиполей, отвечающих за направленность (фиолетовые сплошные линии): электрический диполь (ED)  $a_E(1, \pm 1)$ , электрический (EQ) и магнитный (MQ) квадруполь,  $a_{E,M}(2, \pm 1)$  и электрический гексадекаполь (EH)  $a_E(4, \pm 1)$  при  $\alpha = 0^\circ$ ; ED  $a_E(1, \pm 1)$ , электрические (EO) и магнитные (MO) октуполь  $a_{E,M}(3, \pm 1)$  и EH  $a_E(4, \pm 1)$  при  $\alpha = 90^\circ$

костях для двух ортогональных поляризаций падающей волны. Мультипольный состав излучения на второй гармонике для данных параметров системы достаточно сложный, и возникает вопрос, какие именно мультиполи отвечают за прямую и обратную направленность излучения для углов поворота  $\alpha = 0^\circ$  и  $\alpha = 90^\circ$ . В случае  $\alpha = 0^\circ$  излучение в направлении  $z^+$  определяется интерференцией электрического диполя (ED)  $a_E(1, \pm 1)$ , электрического (EQ) и магнитного (MQ) квадруполь  $a_{E,M}(2, \pm 1)$  и электрического гексадекаполя (EH)  $a_E(4, \pm 1)$ .

В случае  $\alpha=90^\circ$  направленное излучение в направлении  $z^-$  формируется за счёт интерференции электрического диполя (ED)  $a_E(1, \pm 1)$ , электрического (EO) и магнитного (MO) октуполей  $a_{E,M}(3, \pm 1)$  и электрического гексадекаполя EH  $a_E(4, \pm 1)$ . На рисунке также показано сравнение поперечных сечений диаграмм направленности излучения на второй гармонике во взаимно ортогональных плоскостях  $xz$  и  $yz$ , соответствующих этим указанным мультипольным составам (фиолетовые линии), составу всех сгенерированных мультиполей вплоть до  $l = 5$  (черные сплошные линии) и мультипольному составу из наиболее значимых мультиполей (черные пунктирные линии), дающих основной вклад в мощность излучения на второй гармонике, (зависимости вкладов этих мультиполей от угла поворота приведены на рисунке 3.8 слева).

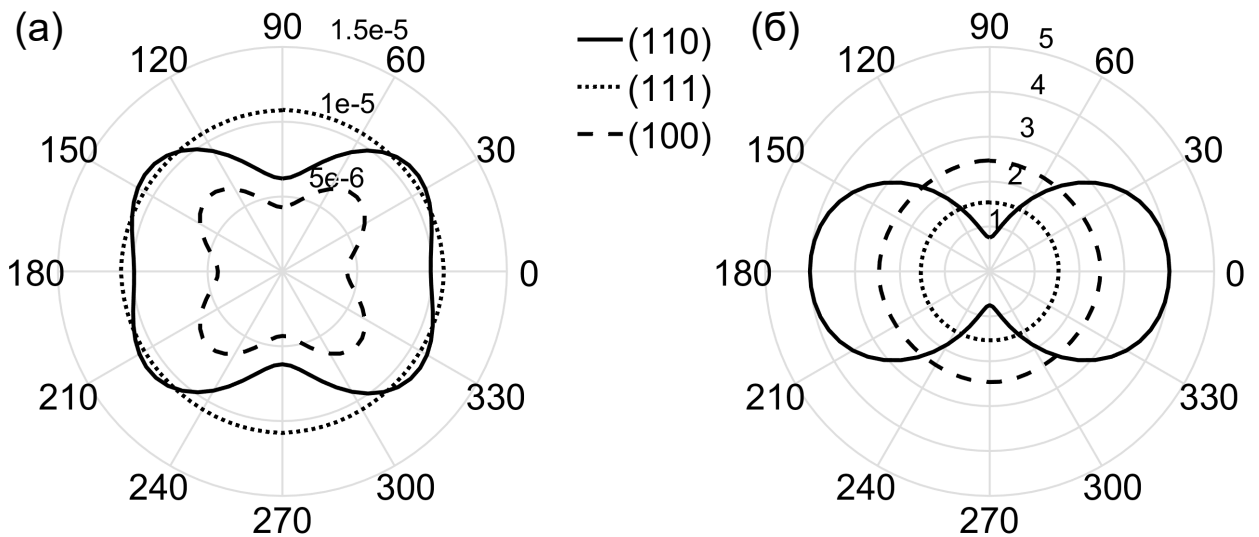


Рисунок 3.9 — Эффективность генерации второй гармоники для различных ориентаций кристаллической решетки диска GaAs в зависимости от угла поворота поляризации падающего излучения. Длина волны падающего излучения 1450 нм, радиус диска 210 нм, высота 400 нм, показатель преломления окружающей среды 1.44; (б) Отношение полных мощностей на частоте второй гармоники, излученных вперед и назад в верхней и нижней полуплоскостях соответственно, в зависимости от угла поворота поляризации падающей волны

Для вышеуказанных параметров было проведено сравнение нелинейного отклика наноантенн, выращенных вдоль различных кристаллографических направлений (100), (110) и (111). На рисунке 3.9(а) приведены результаты расче-

тов эффективности генерации второй гармоники  $\rho$  в цилиндрических наноантеннах из GaAs в зависимости от угла поворота поляризации плоской линейно поляризованной волны. Рисунок 3.9(б) показывает отношение полных мощностей на частоте второй гармоники, излученных вперед и назад в верхней и нижней полуплоскостях соответственно,  $\frac{P_{SH}(z > 0)}{P_{SH}(z < 0)}$ . Наилучшая направленность излучения вдоль оси наноантенны соответствует случаю (110).

### 3.4 Генерация второй гармоники при возбуждении высокодобротных резонансных состояний в диэлектрическом субволновом резонаторе

В разделе 3.3 рассматривались возможности управления направленностью излучения с помощью нелинейных наноантенн. Еще одна, не менее важная характеристика нелинейной наноантенны – эффективность частотного преобразования. Эффективность нелинейных процессов определяется усилением и локализацией электромагнитного поля внутри материала структуры, что в свою очередь связано с добротностью возбуждаемых мод. Выше рассматривались случаи генерации второй гармоники при возбуждении на основной частоте низших дипольных мод, в частности магнитодипольной моды. В оптическом и инфракрасном диапазонах добротность сферических или цилиндрических резонаторов из диэлектрических и полупроводниковых материалов, часто используемых в экспериментах (AlGaAs, GaAs, GaP, Si, Ge, BaTiO<sub>3</sub>), при возбуждении магнитодипольной моды не превышает значений  $Q \lesssim 20$  [29], что также следует из выражения (1.45). В таком случае эффективность генерации второй гармоники наноантеннами из материалов, обладающих ненулевой объемной квадратичной восприимчивостью (AlGaAs, BaTiO<sub>3</sub>), достигает значений  $10^{-5}$ - $10^{-4}$  [8; А6; 85; 86], что на несколько порядков превышает эффективность генерации второй гармоники металлическими плазмонными наноантеннами [87]. Однако для применения наноантенн в различных приложениях, например, для создания чувствительных сенсоров или новых источников света, требуется повышать эффективность нелинейного преобразования. На сегодняшний день одна из перспективных концепций – возбуждение незатухающих мод метаповерхностей,

так называемых связанных состояний в континууме или локализованных состояний непрерывного спектра (ЛСНС) [88]. Добротность реальных структур, используемых в экспериментах, ограничена из-за наличия омических потерь, неидеальности формы структуры и конечных размеров, из-за чего в названии таких состояний используют приставку «квази» (квази-ЛСНС, quasi-VIC). Так, например, локализованные высокодобротные моды двумерного периодического массива дисков из InGaAsP использовались для эффективной лазерной генерации на длине волны 1.55 мкм [89]. В работе [33] продемонстрирована высокоэффективная генерация узконаправленного вихревого пучка с радиальной поляризацией при возбуждении связанного состояния в континууме в резонаторе из двумерного перфорированного фотонного кристалла из GaN на частоте второй гармоники. Концепция квазисвязанных состояний в континууме используется и для описания суперрезонансных мод отдельного субволнового диэлектрического резонатора с высоким показателем преломления [90]. В данном разделе изложена теория генерации второй гармоники при возбуждении такого суперрезонансного состояния в нанодиске из AlGaAs.

В случае отдельного субволнового резонатора эффективность генерации второй гармоники  $\tilde{\rho}$  пропорциональна квадрату добротности возбуждаемого резонанса на основной частоте:

$$\tilde{\rho} \sim Q_{\text{FF}}^2 Q_{\text{SH}} \left( \frac{\gamma_{\text{FF}}^2}{(\omega - \omega_{\text{FF}})^2 + \gamma_{\text{FF}}^2} \right)^2 \frac{\gamma_{\text{SH}}^2}{(2\omega - \omega_{\text{SH}})^2 + \gamma_{\text{SH}}^2}. \quad (3.87)$$

Здесь  $Q_{\text{FF}}$  и  $Q_{\text{SH}}$  – добротности резонансов на основной частоте и на частоте второй гармоники,  $\omega_{\text{FF}}$  и  $\omega_{\text{SH}}$  – резонансные частоты,  $\gamma_{\text{FF}}$  и  $\gamma_{\text{SH}}$  – константы затухания. Таким образом, один из путей повышения эффективности частотного преобразования – поиск способов возбуждения наиболее добротных мод резонатора. Линейно поляризованное излучение позволяет возбуждать низкодобротные дипольные резонансы субволновых резонаторов. Для возбуждения более высокодобротных мод требуется подбирать тип поляризации накачки в зависимости от мультипольного состава возбуждаемых мод и из соображений симметрии. В данном разделе будет показано, что для возбуждения высокодобротного резонанса можно использовать лазерные пучки с осесимметричным состоянием поляризации.



Цилиндрические субволновые резонаторы часто используются в экспериментах, как в качестве отдельных наноантенн, так и в составе олигомеров или метаповерхностей [91]. Ниже приведено мультипольное описание механизма формирования высокодобротного состояния в диэлектрическом диске на примере возбуждения двух сильно связанных ТЕ-поляризованных мод с азимутальным распределением электрического поля (аксиально симметричные моды). Электромагнитное поле рассматриваемых мод не зависит от азимутального угла  $\varphi$ , и в мультипольный состав мод входят магнитный диполь ( $l = 1, m = 0$ ) и магнитный октуполь  $l = 3, m = 0$ .

На рисунке 3.10 показана дисперсия двух связанных мод диэлектрического диска в зависимости от его аспектного отношения  $r/h$  (отношения радиуса к высоте) и отношения радиуса к длине волны  $r/\lambda_0$ . Каждая мода имеет два канала радиационных потерь: дипольный и октупольный. Синие кружки соответствуют магнитному диполю, розовые кружки соответствуют магнитному октуполю, размеры кружков показывают относительный вклады мультиполей и радиационные потери: чем больше размер кружка, тем больше потери и меньше добротность. Верхняя ветвь соответствует высокодобротной моде, и здесь есть особое состояние при значениях параметров  $r/h=0,71$  и  $r/\lambda_0=0,28$ , соответствующее чистому магнитному октуполю, где радиационные потери минимальны. В этом состоянии происходит деструктивная интерференция излучения магнитных диполей двух связанных мод, добротность достигает своего максимума, и формируется суперрезонансная мода. Из-за механизма образования такое высокодобротное состояние называют квазисвязанным состоянием в континууме (quasi-BIC) [92]. Черная линия здесь показывает дисперсию моды вблизи частоты второй гармоники, которая может возбуждаться нелинейным током в нанодиске из (100)-AlGaAs. Более подробное описание этой моды приведено ниже (см. рисунок 3.11).

На частоте второй гармоники цилиндрический резонатор из (100)-AlGaAs в рассматриваемом диапазоне параметров поддерживает несколько собственных мод с различным мультипольным составом. Но нас интересуют лишь те моды, которые могут генерироваться заданным нелинейным источником (3.35). В рассматриваемом случае, когда поле на основной частоте определяется магнитным диполем и магнитным октуполем с нулевым азимутальным индексом, нелинейный источник в (100)-AlGaAs, возбуждает лишь те моды, в мультипольный

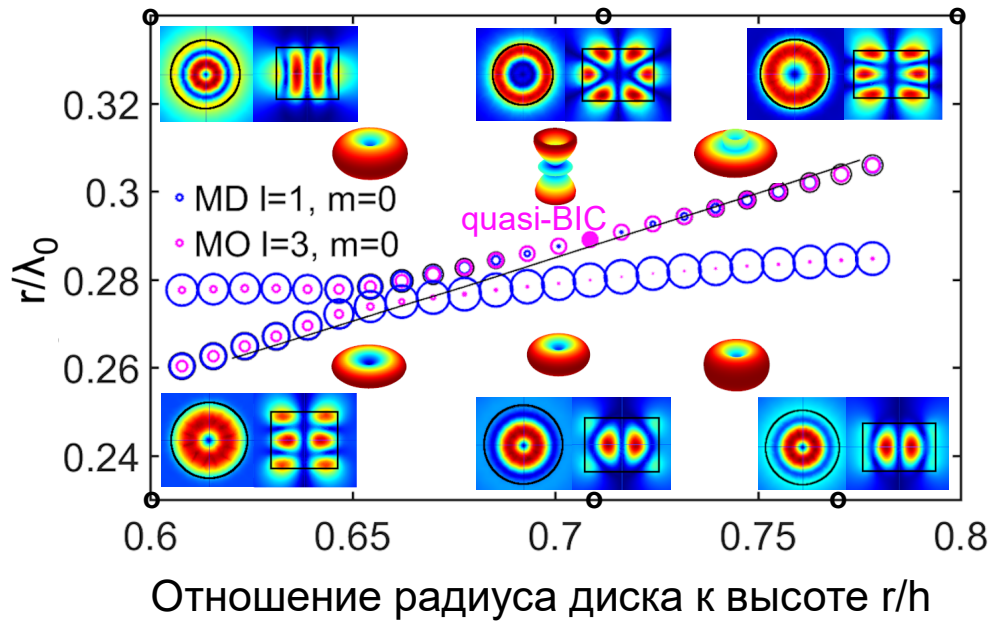


Рисунок 3.10 — Дисперсия двух аксиально симметричных связанных мод нанодиска из AlGaAs в зависимости от отношения радиуса диска к высоте  $r/h$  и отношения радиуса диска к длине волны  $r/\lambda_0$ . Размеры цветных кружков показывают относительные вклады мультиполей, а также радиационные потери. Верхняя ветка соответствует высокодобротной моде, розовой точкой отмечены параметры ( $r/h=0,71$  и  $r/\lambda_0=0,28$ ), при которых добротность достигает максимума и возникает особое магнитооктупольное суперрезонансное состояние. Вставки показывают ближнепольные распределения электрического поля и диаграммы направленности дальнего поля: верхний ряд соответствует высокодобротной моде при  $r/h = 0,6, 0,71, 0,8$ ; нижний ряд соответствует низкодобротной моде  $r/h = 0,6, 0,71$  и  $0,77$ . Сплошная тонкая линия показывает дисперсию одной из мод вблизи частоты второй гармоники (длина волны удвоена для прямого сравнения)

состав которых входят нечетные электрические и четные магнитные мультиполи с азимутальным индексом  $m = \pm 2$ . Вблизи высокодобротной ветки с таким мультипольным составом есть только одна собственная мода на второй гармонике, которая пересекает высокодобротную ветку вблизи магнитооктупольного резонанса. Дисперсия этой моды, мультипольный состав и радиационные потери в зависимости от аспектного отношения изображены на рисунке 3.11. Для более наглядного сопоставления с рисунком 3.10 длина волны собственной моды на второй гармонике удвоена. Диаграмма направленности этой моды

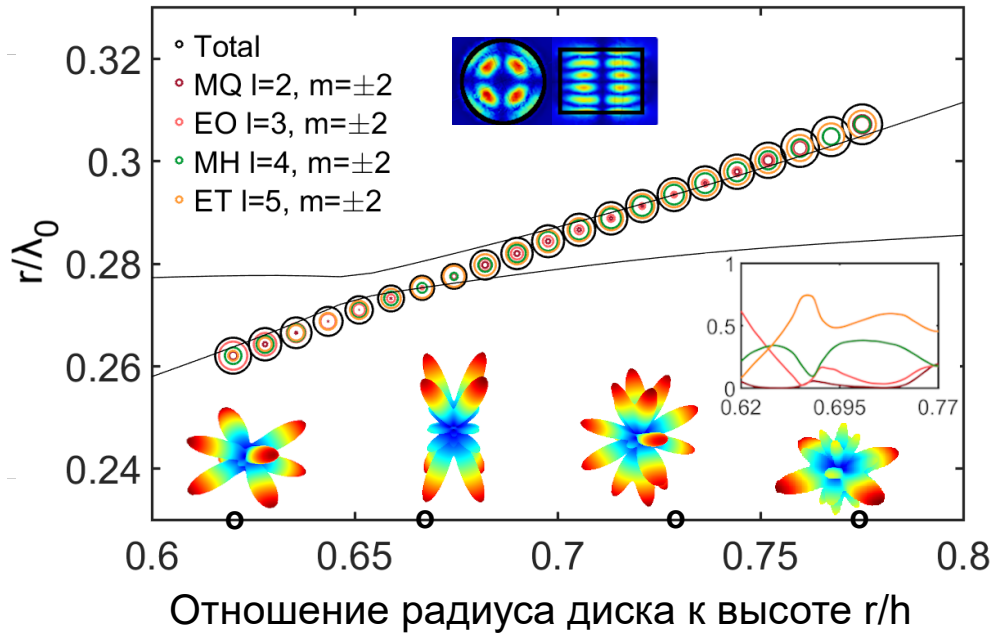


Рисунок 3.11 — Дисперсия высокодобротной моды на частоте второй гармоники нанодиска из AlGaAs в зависимости от отношения радиуса диска к высоте  $r/h$  и отношения радиуса диска к длине волны на основной частоте  $r/\lambda_0$  (длина волны удвоена). Цветными кружками показаны мультипольные вклады, аналогично рисунку 3.10. Верхняя вставка изображает распределение ближнего поля, в указанном диапазоне параметров. Вставки снизу показывают диаграммы направленности дальнего поля при  $r/h = 0,62, 0,667$  и  $0,775$ . Тонкие сплошные линии соответствуют связанным модам на основной частоте, изображенным на рисунке 3.10

многолепестковая, что объясняется большими относительными вкладами старших мультиполей с  $l = 4,5$  (см.вставку). Количество основных лепестков и их направление меняются в зависимости от аспектного отношения, тогда как распределение ближнего поля слабо зависит от него. И мы ожидаем, что наиболее эффективная генерация второй гармоники будет происходить в случае одновременного возбуждения двух резонансов, т.е. для параметров вблизи пересечения ветвей дисперсии двух мод: высокодобротной магнитооктупольной моды и моды на частоте второй гармоники. Зависимость добротностей рассматриваемых мод от аспектного отношения  $r/h$  представлена на рисунке 3.12.

В работе [A9] для описания механизма возникновения высокодобротного резонансного состояния (квазисвязанного состояния в континууме) был использован также формализм теории связанных мод (ТСМТ – temporal coupled mode

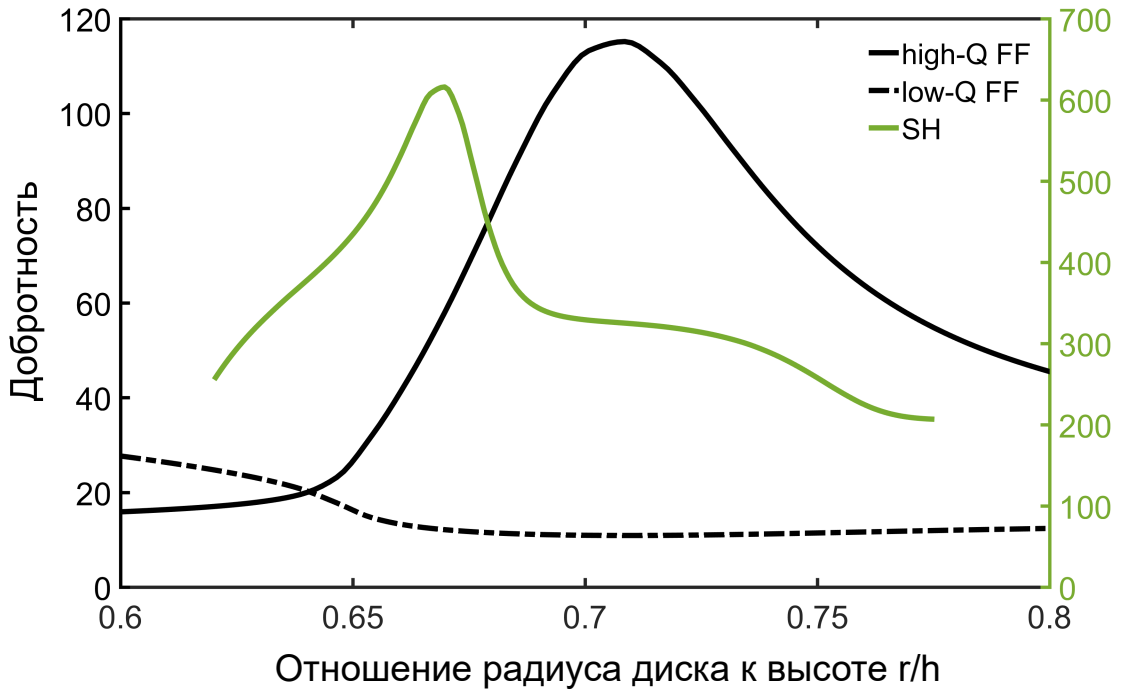


Рисунок 3.12 — Добротности рассматриваемых собственных мод диска на основной частоте (черные линии) и собственной моды на частоте второй гармоники (зеленая линия)

theory). Рассматривалась трехуровневая модель взаимодействия мод: два магнитодипольных состояния с частотами  $\omega_1$  и  $\omega_2$  и одно магнитооктупольное с частотой  $\omega_0$ . Падающее излучение тоже можно представить в виде суммы дипольной и октупольной составляющих. Гамильтониан такой системы можно представить в следующем виде:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \omega_1 + id_1^2 & id_1d_2 & \tau_1 \\ id_1d_2 & \omega_2 + id_2^2 & \tau_2 \\ \tau_1 & \tau_2 & \omega_0 + id_0^2 \end{pmatrix}. \quad (3.88)$$

Коэффициенты  $d_{1,2}$  и  $d_0$  соответствуют эффективным дипольным и октупольному моментам, коэффициенты  $\tau_{1,2}$  описывают связь между дипольными и октупольными состояниями. Омическими потерями в системе в рассматриваемом случае можно пренебречь. Частота высокодобротного магнитооктупольного состояния соответствует подавлению дипольных радиационных потерь в выражении для коэффициента рассеяния и определяется выражением:

$$\omega_{\text{VIC}} = \frac{\omega_1 d_2 \tau_2 + \omega_2 d_1 \tau_1}{d_1 \tau_1 + d_2 \tau_2}. \quad (3.89)$$

Затем возникает вопрос, как наиболее эффективно возбудить магнитооптупольную суперрезонансную моду. Эффективность возбуждения связанных мод на основной частоте, а следовательно, и эффективность генерации второй гармоники зависят от типа падающего излучения, а именно, от его мультипольного состава. Было рассмотрено два типа падающего излучения, магнитное поле которого направлено вдоль оси диска (вдоль оси  $z$ ), как в рассматриваемых модах: линейно поляризованная плоская волна  $\mathbf{E} = E_0 e^{ik_x x} \hat{\mathbf{y}}$  и азимутально поляризованный цилиндрический векторный пучок (АП) [93]:

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \hat{\phi} 2E_0 \int_0^{\alpha_M} \sqrt{\cos \alpha} \sin \alpha l_0(\alpha) J_1(\kappa_{\perp} \rho) e^{-ik_{\parallel} z} d\alpha, \\ l_0(\alpha) &= \exp\left(-\left(\beta_0 \frac{\sin \alpha}{\sin \alpha_M}\right)^2\right) J_1\left(2\beta_0 \frac{\sin \alpha}{\sin \alpha_M}\right), \end{aligned} \quad (3.90)$$

где  $l_0(\alpha)$  – функция аподизации,  $J_1(\kappa_{\perp} \rho)$  – функция Бесселя первого рода первого порядка,  $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ ,  $k_h = \frac{2\pi n_h}{\lambda}$ ,  $\kappa_{\perp} = k_h \sin \alpha$ ,  $k_{\parallel} = k_h \cos \alpha$ ,  $\alpha_M = \arcsin\left(\frac{NA}{n_h}\right)$ ,  $\beta_0$  – отношение входной ширины пучка и ширины перетяжки,  $NA$  – числовая апертура,  $n_h$  – показатель преломления окружающей среды.

Мультипольное разложение падающего излучения по базису из векторных сферических гармоник может быть представлено в следующем виде:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\text{inc}} &= E_0 \sum_{l,m} \left\{ A_M(l,m) \mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi) j_l(kr) - \frac{i}{k} A_E(l,m) \nabla \times [j_l(kr) \mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi)] \right\}, \\ \mathbf{H}_{\text{inc}} &= \frac{i}{k} \nabla \times \mathbf{E}_{\text{inc}} = E_0 \sum_{l,m} \left\{ A_E(l,m) \mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi) j_l(kr) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{i}{k} A_M(l,m) \nabla \times [j_l(kr) \mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi)] \right\}. \end{aligned} \quad (3.91)$$

Здесь  $A_{E,M}(l,m)$  – мультипольные коэффициенты разложения падающего излучения,  $\mathbf{X}_{lm}(\theta, \varphi)$  – векторные сферические гармоники,  $j_l(kr)$  – сферические функции Бесселя порядка  $l$ ,  $k$  – волновое число в среде. С использованием условий ортогональности векторных сферических гармоник (3.17) можно получить выражения для мультипольных коэффициентов через интегралы по поверхно-

сти сферы радиуса  $R$  [44]:

$$\begin{aligned} A_E(l, m) &= \frac{\iint \mathbf{H}_{\text{inc}} \mathbf{X}_{lm}^*(\theta, \varphi) dS}{E_0 R^2 j_l(kR)}, \\ A_M(l, m) &= \frac{\iint \mathbf{E}_{\text{inc}} \mathbf{X}_{lm}^*(\theta, \varphi) dS}{E_0 R^2 j_l(kR)}, \end{aligned} \quad (3.92)$$

где  $dS = R^2 \sin \theta d\theta d\varphi$ . Эти выражения можно переписать через угловые функции  $\pi_{lm}(\theta)$  и  $\tau_{lm}(\theta)$  [44]:

$$\begin{aligned} A_E(l, m) &= \frac{iO_{lm}}{E_0 R^2 j_l(kR)} \iint [H_{\text{inc}\theta} \pi_{lm}(\theta) - iH_{\text{inc}\varphi} \tau_{lm}(\theta)] e^{-im\varphi} dS, \\ A_M(l, m) &= \frac{iO_{lm}}{E_0 R^2 j_l(kR)} \iint [E_{\text{inc}\theta} \pi_{lm}(\theta) - iE_{\text{inc}\varphi} \tau_{lm}(\theta)] e^{-im\varphi} dS. \end{aligned} \quad (3.93)$$

Мультипольный анализ показывает, что азимутально поляризованный пучок состоит из магнитных мультиполей с нулевым азимутальным индексом  $m = 0$ , что соответствует мультипольному составу возбуждаемых мод. С помощью численного интегрирования можно получить соотношения между октупольным и дипольным вкладами в падающее излучение. Для азимутально поляризованного пучка мы получили  $\left| \frac{A_M(3,0)}{A_M(1,0)} \right| = 2.203$ . В случае линейно поляризованной плоской волны для произвольного направления падения мультипольные коэффициенты разложения известны и выражаются аналитически [94]. Плоская волна с ориентацией  $(E_y, H_z, k_x)$  состоит из электрических и магнитных мультиполей с различными азимутальными индексами  $m$ , как с четными, так и с нечетными. В её состав входят магнитный диполь с  $l = 1, m = 0$  и магнитные октуполи с  $l = 3, m = 0, \pm 2$ . Отношение интересующих нас вкладов составляет  $\left| \frac{A_M(3,0)}{A_M(1,0)} \right| = 0.935$ . Таким образом, относительный вклад магнитного октуполя значительно выше в азимутально поляризованном пучке, чем в плоской волне, и можно сделать вывод, что азимутально поляризованный пучок лучше подходит для возбуждения высокооборотного резонанса на основной частоте, поскольку он обеспечит более высокие значения эффективности генерации второй гармоники.

На рисунке 3.13 показаны карты линейного рассеяния азимутально поляризованного пучка на диске из AlGaAs, карты дипольного и октупольного вкладов в линейное рассеяние и карта мощности второй гармоники. Здесь вы-

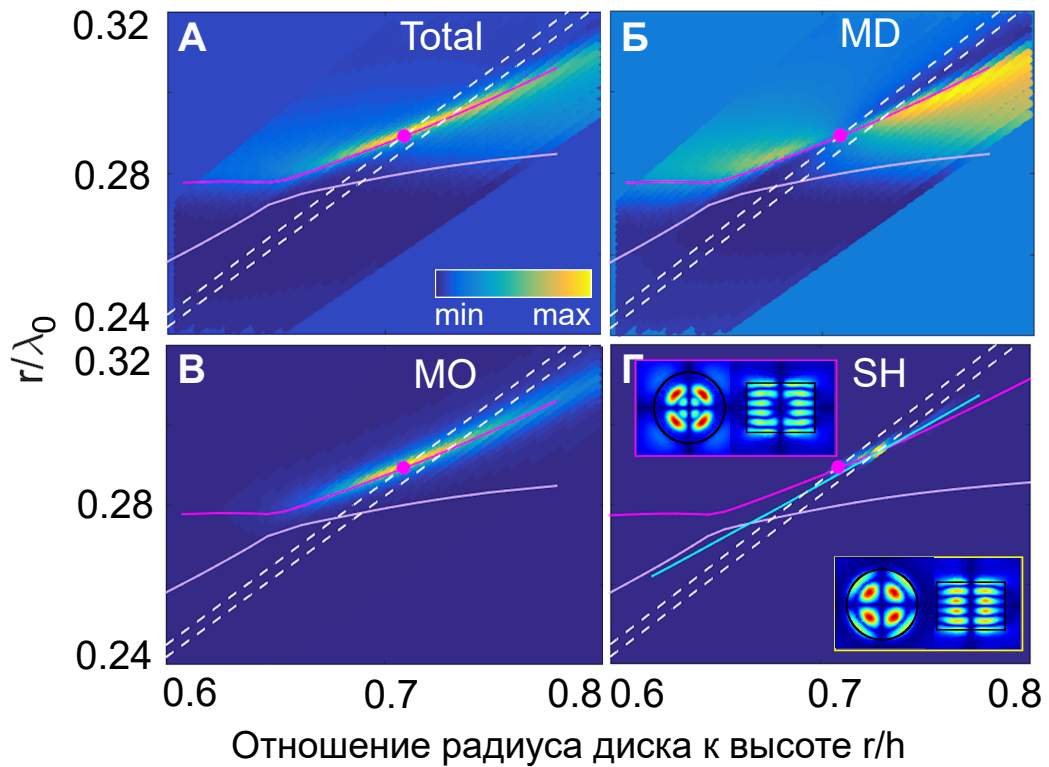


Рисунок 3.13 — Карты линейного рассеяния азимутально поляризованного цилиндрического векторного пучка на диске из AlGaAs (А) и генерируемой мощности на частоте второй гармоники (Г). Панели (Б) и (В) соответствуют дипольному и октупольному вкладам в линейное рассеяние. Сплошные розовые линии соответствуют дисперсионным кривым собственных мод на основной частоте, сплошная голубая линия соответствует дисперсионной кривой моды на частоте второй гармоники. Розовая точка соответствует высокодобротному магнитооктупольному состоянию (quasi-BIC). Пунктирные линии – два среза  $\lambda_0 = 1580$  нм и  $\lambda_0 = 1600$  нм. Вставки на панели (Г) показывают распределение электрического поля для параметров quasi-BIC (в розовой рамке) и в точке пересечения дисперсионных кривых (при максимальной мощности генерации второй гармоники) (в желтой рамке).

сота диска была зафиксирована, радиус менялся в диапазоне 400–500 нм, длина волны менялась в диапазоне 1500–1700 нм. Омические потери как на основной частоте, так и на частоте второй гармоники пренебрежимо малы для выбранного материала  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$  [95] (см. рисунок 3.3). По осям отложены аспектное отношение диска и параметр отношения радиуса диска к длине волны накачки. Розовые линии соответствуют двум модам на основной частоте, а голубая линия – моде на второй гармонике. На карте линейного рассеяния отчетливо видна

ветка высокодобротной моды. Розовая точка соответствует максимуму линейного рассеяния, и четко видно, что здесь магнитодипольный вклад подавлен, в то время как магнитооктупольный вклад в рассеяние достигает максимума. Однако максимум генерации второй гармоники находится не совсем в этой точке, а в точке пересечения дисперсионных кривых двух мод, как мы и предсказывали.

В предыдущих разделах эффективность генерации второй гармоники определялась как отношение полной мощности излучения на второй гармонике к потоку энергии падающей волны, проходящей через геометрическое сечение частицы (3.51). Такое определение корректно, когда добротности возбуждаемых резонансов не столь велики, и эффективная площадь взаимодействия падающей волны с рассеивателем (сечение рассеяния  $\sigma_{sca}$ ) сравнима с площадью сечения рассеивателя  $S$ . Отношение этих площадей показывает эффективность рассеяния  $\tilde{\sigma} = \frac{\sigma_{sca}}{S}$ , которая определяется как отношение мощности рассеяния к потоку энергии падающей волны, проходящей через геометрическое сечение частицы. Эффективность рассеяния в случае падения азимутально поляризованного пучка вдоль оси диска может достигать значений  $\tilde{\sigma} \approx 40$  вблизи магнитооктупольного резонанса. Для того чтобы учесть такое сильное взаимодействие падающего излучения с возбуждаемым высокодобротным резонансом, в расчетах использовалось другое определение эффективности генерации второй гармоники:

$$\rho = \frac{P_{SH}}{P_{sca}}. \quad (3.94)$$

Здесь  $P_{SH}$  – полная мощность излучения на второй гармонике,  $P_{sca}$  – полная мощность рассеяния. Эффективность генерации второй гармоники в случае двойного резонанса может достигать 1% для интенсивностей падающего излучения порядка 1 ГВт/см<sup>2</sup>. Таким образом, важно одновременное возбуждение двух резонансов: на основной и на удвоенной частотах. Кроме того, была рассчитана эффективность генерации второй гармоники, не зависящая от интенсивности падающего излучения:

$$\tilde{\rho} = \frac{P_{SH}}{P_{sca}^2}. \quad (3.95)$$

Результаты расчетов для двух типов возбуждения приведены ниже в таблице 4. Кроме того, был проведён мультипольный анализ излучения на второй гармонике. Наиболее интересные случаи отмечены пунктирными линиями на



картах рисунка 3.13. Пунктирные линии соответствуют двум срезам, один для длины волны 1580 нм, проходит через максимум линейного рассеяния (точку quasi-BIC), а второй для длины волны 1600 нм, проходит через точку максимума мощности на второй гармонике (точку пересечения ветвей дисперсии мод на основной и удвоенной частотах). Получено, что в первом случае излучение на второй гармонике определяется в основном магнитным квадруполем  $a_M(2, \pm 2)$ , а для случая максимума генерации порядок доминирующих мультиполей увеличиваются с  $l = 2$  до  $l = 4$  и  $l = 5$ , и диаграмма направленности становится многолепестковой. Также было проведено моделирование и для случая возбуждения плоской волной. В спектре линейного рассеяния присутствуют различные мультиполи с разными азимутальными индексами и поле внутри диска уже не является независимым от азимутального угла  $\varphi$ . При этом эффективность генерации второй гармонике на порядок меньше, но все так же максимум соответствует точке пересечения собственных мод на основной и удвоенной частотах и определяется старшими мультиполями 4 и 5 порядка. Сравнение мультипольного состава и диаграмм направленности собственной моды на удвоенной частоте, и излучения на второй гармонике для случая двух типов возбуждения для параметров, соответствующих максимуму генерации, показало, что генерируется только нужная собственная мода на частоте второй гармонике. Характеристики падающего излучения, такие как интенсивность падающего излучения и мощность падающего излучения  $P_0$ , приходящаяся на геометрическое сечение частицы  $S$ , приведены в таблице 5.

При моделировании также были учтены нелинейные эффекты обратного влияния второй гармонике на первую. Генерация второй гармонике происходит наиболее эффективно при одновременном возбуждении двух резонансных состояний: магнитооктупольного резонанса на основной частоте и высокодобротной моды на частоте второй гармонике. В этом случае амплитуды электрических полей внутри наночастицы на основной и удвоенной частотах становятся сравнимы, и уже нельзя пренебрегать нелинейной поправкой к поляризации на основной частоте  $\mathbf{P}_{nl}^{(\omega)}$ . Моделирование эффекта обратного влияния поля на частоте второй гармонике на поле на основной частоте состояло в численном решении волнового уравнения с нелинейным источником одновременно на ос-

новной частоте и на частоте второй гармоники:

$$\Delta \mathbf{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left( \mathbf{P}_{\text{nl}}^{(\omega)} + \mathbf{P}_{\text{nl}}^{(2\omega)} \right). \quad (3.96)$$

Нелинейная поправка к поляризации на основной частоте имеет вид:

$$\begin{pmatrix} P_x^{(\omega)} \\ P_y^{(\omega)} \\ P_z^{(\omega)} \end{pmatrix} = 2\chi^{(2)} \begin{pmatrix} E_y^{(2\omega)} E_z^{(\omega)*} + E_z^{(2\omega)} E_y^{(\omega)*} \\ E_x^{(2\omega)} E_z^{(\omega)*} + E_z^{(2\omega)} E_x^{(\omega)*} \\ E_x^{(2\omega)} E_y^{(\omega)*} + E_y^{(2\omega)} E_x^{(\omega)*} \end{pmatrix}. \quad (3.97)$$

Учет эффекта истощения накачки в численных расчетах позволил уточнить значения излучаемой мощности. Ошибка в расчетах в приближении неистощающейся накачки составила около 6% в случае возбуждения азимутального пучка и около 1% в случае возбуждения плоской волной. Результаты расчетов представлены в таблице 4.

Таблица 4 — Эффективность рассеяния и эффективность генерации второй гармоники

	$\tilde{\sigma}$	$\rho$	$\tilde{\rho}$ , Вт <sup>-1</sup>
пучок AP, неистоц. накачка	34.14	0.02	$1.33 \cdot 10^{-4}$
пучок AP, обратное влияние	32.93	0.0182	$1.25 \cdot 10^{-4}$
плоская волна, неистоц. накачка	3.97	0.0031	$5.49 \cdot 10^{-5}$
плоская волна, обратное влияние	3.95	0.0031	$5.44 \cdot 10^{-5}$

Таблица 5 — Характеристики накачки и сечение образца  $S$

	$I_{\text{min}}, \frac{\text{ГВт}}{\text{см}^2}$	$I_{\text{max}}, \frac{\text{ГВт}}{\text{см}^2}$	$S \cdot 10^{13}, \text{м}^2$	$P_0, \text{Вт}$
пучок AP	0.89	2.16	6.94	4.404
плоская волна	2.37	2.37	6.06	14.36

В моделировании также учитывалась конечность длительности лазерных импульсов. Эффективность генерации второй гармоники существенно зависит от отношений длительности импульса накачки  $\tau_s$  и времен жизни резонансов, возбуждаемых на основной и удвоенной частотах  $\tau_\omega$  и  $\tau_{2\omega}$ . Рисунок

3.14 иллюстрирует зависимость коэффициента ослабления мощности излучения на второй гармонике от соотношения длительности прямоугольного лазерного импульса и времени жизни резонанса на основной частоте. Выражение для  $g_{2\omega} \left( \frac{\tau_s}{\tau_\omega}, \frac{\tau_\omega}{\tau_{2\omega}} \right)$  достаточно громоздкое и здесь не приводится, его можно найти в дополнительных материалах к работе [A9]. Для параметров, соответствующих максимальной эффективности генерации, добротности на основной частоте и на частоте второй гармоники  $Q_{\text{FF}} = 96,4$  и  $Q_{\text{SH}} = 309,5$  соответственно (см. рисунок 3.12 при  $r/h = 0.728$ ). Соответствующие времена жизни резонансов при длине волны падающего излучения  $\lambda_0 = 1600$  нм  $\tau_\omega = \frac{2Q_{\text{FF}}}{\omega_{\text{FF}}} = 163,7$  фс и  $\tau_{2\omega} = \frac{2Q_{\text{FF}}}{\omega_{\text{SH}}} = 262,7$  фс. Оценки показывают, что для длительности импульса 2 пс мощность излучения на второй гармонике составляет 76% от максимальной (рассчитанной в приближении бесконечной длительности), а длительности импульса 300 фс – 11%.

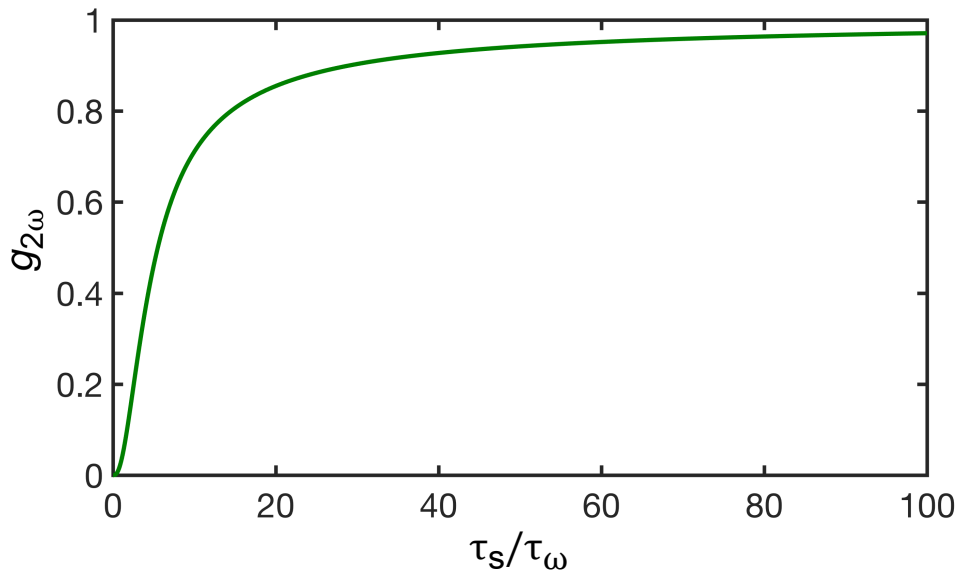


Рисунок 3.14 — Фактор ослабления мощности генерации второй гармоники в зависимости от соотношения длительности импульса  $\tau_s$  и времени жизни магнитооктупольного резонанса  $\tau$

### 3.5 Особенности генерации третьей гармоники в наноструктурах из Si

Кристаллическая структура кремния в отличие от GaAs обладает центром симметрии, соответственно нелинейный отклик кремниевых наночастиц определяется тензором нелинейной восприимчивости третьего порядка  $\chi^{(3)}$ .

$$\mathbf{P}^{(3\omega)} = \chi^{(3)} \mathbf{E}^{(\omega)} E^{(\omega)^2} + \dots, \quad (3.98)$$

где  $\chi^{(3)} = 2.2 \cdot 10^{-19} \text{ м}^2/\text{В}^2$  – кубичная нелинейная восприимчивость. На рисунке 3.15 дисперсия действительной и мнимой частей показателя преломления изучаемого материала (аморфного кремния).

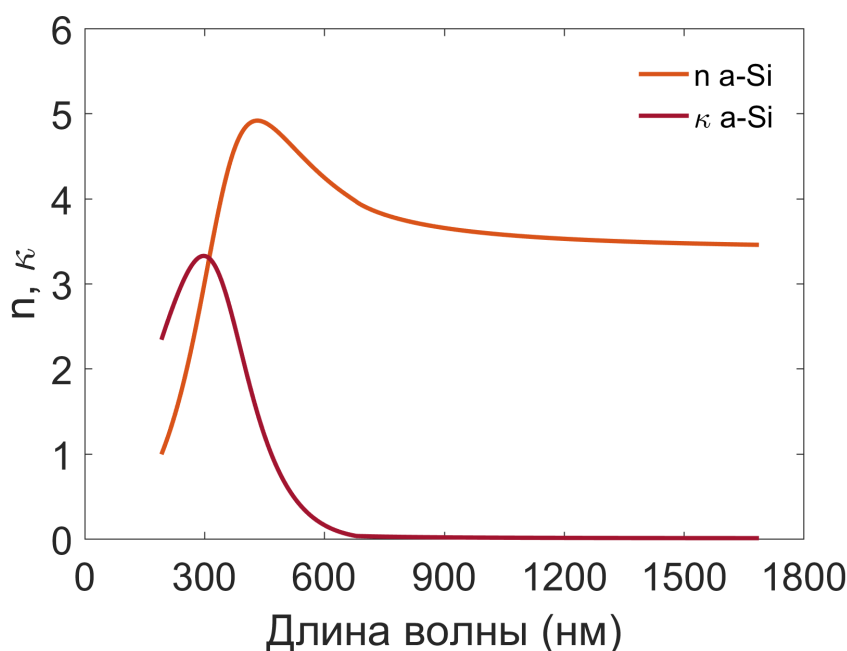


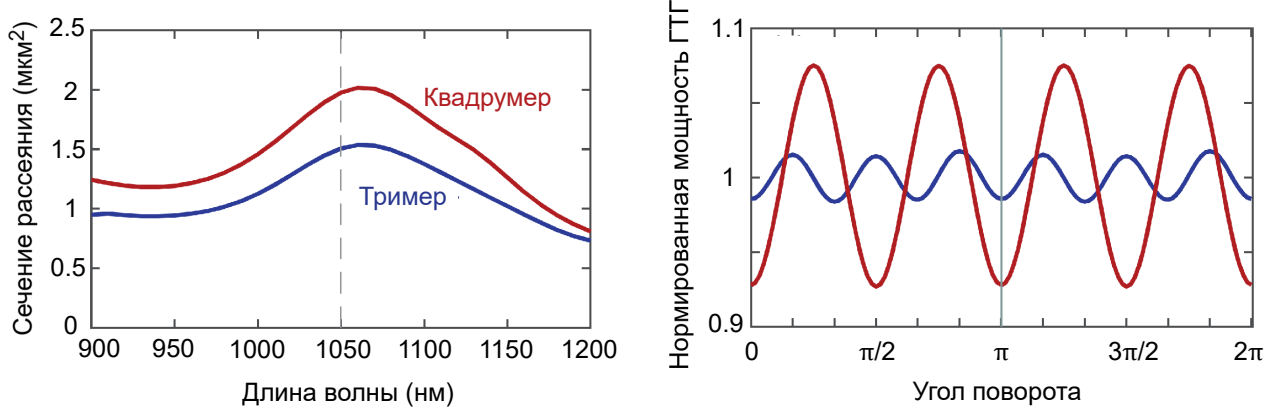
Рисунок 3.15 — Зависимость действительной  $n = \Re\sqrt{\epsilon}$  и мнимой частей  $\kappa = \Im\sqrt{\epsilon}$  показателя преломления аморфного кремния a-Si от длины волны

Аморфный кремний – это изотропный материал, соответственно линейный и нелинейный отклик одного кремниевого диска не меняется при вращении поляризации падающего излучения, как это было продемонстрировано в случае нанодиска из GaAs. Однако анизотропию нелинейного отклика можно создать искусственно, если расположить рядом три или четыре кремниевых нанодиска. Такие структуры в оптике называют олигомерами.

### 3.5.1 Анизотропия генерации третьей гармоники кремниевыми наноструктурами

С помощью развитых численных методов и мультипольного анализа удалось объяснить наблюдаемую в эксперименте анизотропию генерации третьей гармоники наноструктурами из трех или четырех близко расположенных нанодисков (тримеры, квадрумеры), изготовленных из аморфного кремния [A10]. В экспериментах продемонстрировано, что при нормальном падении плоской волны на структуры из одного, трех или четырех кремниевых нанодисков линейное рассеяние остается изотропным при вращении поляризации, в то время как нелинейный отклик дисков на третьей гармонике зависит от угла поворота в соответствии с симметрией точечной группы ( $C_3$  или  $C_4$ ). На рисунке 3.16 представлены результаты моделирования линейного и нелинейного отклика кремниевых олигомеров. Тример представляет собой систему из трех симметрично расположенных дисков диаметром 285 нм, расстояние между дисками 50 нм. Квадрумер представляет собой систему из четырех симметрично расположенных дисков диаметром 270 нм, и расстояние между дисками 70 нм. Высота дисков фиксированная и составляет 260 нм. На рисунке 3.16а показано сечение рассеяния нормально падающей плоской линейно поляризованной волны на отдельном тримере (синяя линия) или квадрумере (красная линия). Рисунок 3.16б показывает анизотропию нелинейного отклика олигомеров при вращении поляризации падающей волны в плоскости структуры. Результаты численного моделирования показали, что в соответствии с экспериментальными наблюдениями нелинейный отклик имеет три пика в диапазоне  $[0; \pi]$  для тримера и четыре пика в диапазоне  $[0; 2\pi]$  для квадрумера. Расчеты проводились для олигомеров, помещенных в среду с показателем преломления  $n_h=1.22$  (средний показатель преломления воздуха и стеклянной подложки).

Для лучшего понимания был проведен подробный мультипольный анализ собственных мод олигомеров. Плоская волна при нормальном падении на структуру возбуждает коллективные собственные моды с магнитными дипольными моментами, ориентированными в плоскости. Были рассчитаны значения и ориентация магнитных дипольных моментов индуцированных в дисках с использованием мультипольные коэффициентов, полученные при численном мо-



а) Линейное рассеяние

б) Сигнал на третьей гармонике

Рисунок 3.16 — Линейное рассеяние и анизотропия нелинейного отклика тримера и квадрумера. а) Спектр сечения рассеяния резонансных олигомеров кремниевых нанодисков: тример (синий) и квадрумер (красный) при нормальном падении плоской волны. Пунктирная вертикальная серая линия отмечает положение длины волны лазера. б) Мощность генерации третьей гармонике в зависимости от угла поворота поляризации накачки в плоскости при фиксированной длине волны лазерного излучения 1050 нм. Мощность рассчитана по полному телесному углу и нормирована на средние значения уровня мощности для каждого олигомера.

делировании. Значения электрического и магнитного дипольных моментов могут быть получены из мультипольных коэффициентов с помощью следующих выражений

$$\begin{aligned}
 p_x &= A[a_E(1,1) - a_E(1, - 1)]E_0, & m_x &= (-i)A[a_M(1,1) - a_M(1, - 1)]E_0/n_h, \\
 p_y &= iA[a_E(1,1) + a_E(1, - 1)]E_0, & m_y &= (-i)iA[a_M(1,1) + a_M(1, - 1)]E_0/n_h, \\
 p_z &= A(-\sqrt{2})a_E(1,0)E_0, & m_z &= (-i)A(-\sqrt{2})a_M(1,0)E_0/n_h,
 \end{aligned} \tag{3.99}$$

где  $A = \frac{3i}{4k_0^3 n_h}$ . Связь между декартовыми и сферическими мультиполями приведена в работе [80]. Здесь выражения (3.99) являются обобщением выражений, полученных в [80], на случай, когда рассеиватель помещен в однородную среду с показателем преломления  $n_h$ . Выражения для дипольных моментов (3.99) дают тот же результат, что и интегральные выражения с наведенным током

поляризации  $\mathbf{j}^{(\omega)}$  [79].

$$p_i = -\frac{1}{i\omega} \left( \int j_i^{(\omega)} j_0(kr) dV + \frac{k^2}{2} \int \left( 3\mathbf{r} \cdot \mathbf{j}^{(\omega)} r_i - r^2 j_i^{(\omega)} \right) \frac{j_2(kr)}{(kr)^2} dV \right), \quad (3.100)$$

$$m_i = \frac{3}{2} \int \left[ \mathbf{r} \times \mathbf{j}^{(\omega)} \right]_i \frac{j_1(kr)}{kr} dV,$$

здесь  $k$  – волновое число внутри материала рассеивателя, индекс  $i = x, y, z$ ,  $j_l(kr)$  – функция Бесселя первого рода порядка  $l = 0, 1, 2$ .

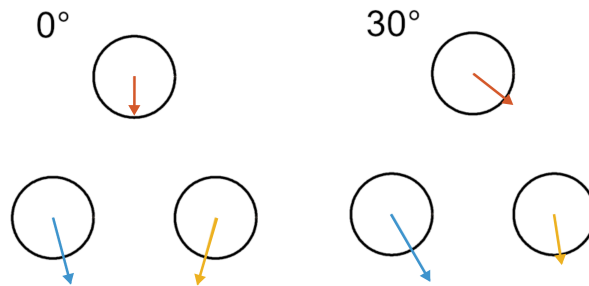


Рисунок 3.17 — Ориентация магнитных дипольных моментов на основной частоте при возбуждении тримера плоской линейно поляризованной волной, падающей вдоль оси дисков для двух углов поворота  $0^\circ$  и  $30^\circ$ , соответствующих возбуждению вырожденных собственных мод

Магнитные моменты вращаются при вращении поляризации, и минимумы и максимумы отклика на третьей гармонике соответствуют собственным модам с различным распределением электромагнитного поля внутри дисков.

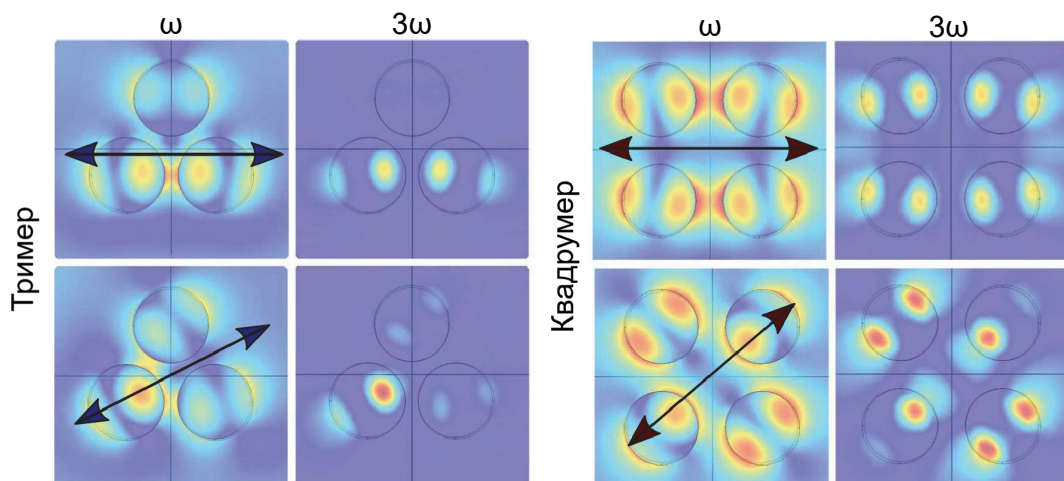


Рисунок 3.18 — Распределение ближнего электрического поля на основной частоте и на частоте третьей гармоники для тримера и квадрумера для двух углов поворота:  $0^\circ$  и  $30^\circ$  для тримера, и  $0^\circ$  и  $45^\circ$  для квадрумера

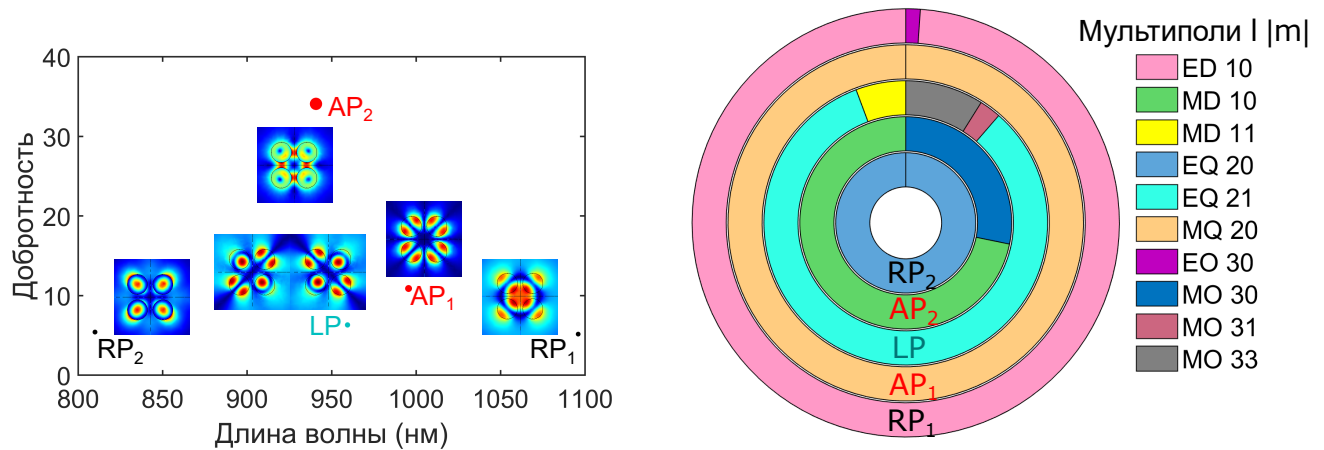
### 3.5.2 Влияние поляризации накачки на генерацию третьей гармоники кремниевыми олигомерами

Лазерные пучки с осесимметричным состоянием поляризации (пучки с азимутальной или радиальной поляризацией) можно также использовать и для возбуждения высокодобротных коллективных мод кремниевых олигомеров и генерации третьей гармоники. На основе проведенного мультипольного анализа собственных коллективных мод системы из четырех близко расположенных кремниевых дисков (квадрумера), удалось предсказать многократное увеличение интенсивности излучения на третьей гармонике при возбуждении квадрумера из Si азимутально поляризованным цилиндрическим векторным пучком по сравнению с линейно поляризованной накачкой, и определить оптимальные параметры системы с точки зрения максимальной эффективности преобразования инфракрасного излучения в излучение видимого диапазона [A11].

Эффективность нелинейного преобразования при генерации третьей гармоники пропорциональна добротности резонанса на основной частоте в третьей степени, поэтому для усиления нелинейного отклика важно возбуждать наиболее добротные моды:  $\rho_{\text{THG}} \sim Q_{\omega}^3 Q_{3\omega}$ , где  $Q_{\omega}$  и  $Q_{3\omega}$  – добротности резонансов на основной частоте и частоте третьей гармоники. Рисунок 3.19а показывает иерархию собственных мод квадрумера кремниевых дисков. Диаграмма на рисунке 3.19б иллюстрирует мультипольные составы мод. Мультипольный состав двух наиболее добротных мод  $AP_1$  и  $AP_2$  определяется магнитными мультиполями с нулевым азимутальным индексом. Эти моды нельзя возбудить линейно или радиально поляризованным излучением, однако для их возбуждения можно использовать азимутально поляризованный пучок, мультипольный состав которого также определяется магнитными мультиполями с нулевым азимутальным индексом. Наиболее добротная мода  $AP_2$  ( $Q_{\omega} \approx 34$ ) соответствует возбуждению магнитных диполей в дисках, ориентированных поперек плоскости, вдоль осей дисков (out-of-plane magnetic dipoles).

Результаты моделирования линейного и нелинейного отклика квадрумера для различных типов поляризации падающего лазерного излучения приведены на рисунке 3.20. На рисунке 3.20а построено сечение рассеяния азимутально поляризованного цилиндрического векторного пучка (3.90) на квадрумере.





а) Коллективные моды квадрумера

б) Мультипольный состав мод

Рисунок 3.19 — (а) Добротности и длины волн собственных мод квадрумера нанодисков из  $\alpha$ -Si. Вставки показывают распределение ближнего поля (показана норма электрического поля на середине высоты дисков в поперечном сечении плоскостью  $xz$ , параллельной плоскости образца). (б) Мультипольный состав коллективных собственных мод квадрумера (обозначенных как LP,  $RP_{1,2}$ ,  $AP_{1,2}$ ) в квадрумере

Спектр рассеяния описывается магнитными мультиполями с нулевым азимутальным индексом, что соответствует возбуждению мод  $AP_{1,2}$ , собственные длины волн которых отмечены вертикальными пунктирными линиями. Моделирование нелинейного отклика, приведенное на рисунке 3.20б показывает, что в случае азимутально поляризованного пучка эффективность преобразования на два порядка больше, чем в случаях линейной или радиальной поляризации. По левой вертикальной оси отложены значения мощности генерации третьей гармоники, нормированные на мощность сигнала от неструктурированной кремниевой пленки. Правая вертикальная ось показывает значения сечения рассеяния линейно поляризованного излучения (плоской волны) на квадрумере. Все теоретические выводы согласуются с результатами эксперимента [A11]. В спектре излучения на третьей гармонике при возбуждении азимутально поляризованным пучком наблюдалось два максимума, соответствующие возбуждению собственных мод квадрумера. Было продемонстрировано усиление мощности сигнала на третьей гармонике от квадрумера на два порядка в случае азимутально поляризованной накачки по сравнению с линейно или радиально поляризованной накачкой. Интенсивность сигнала при возбуждении моды с магнитными дипольными моментами, ориентированными вдоль осей дисков, в 120 раз превышает

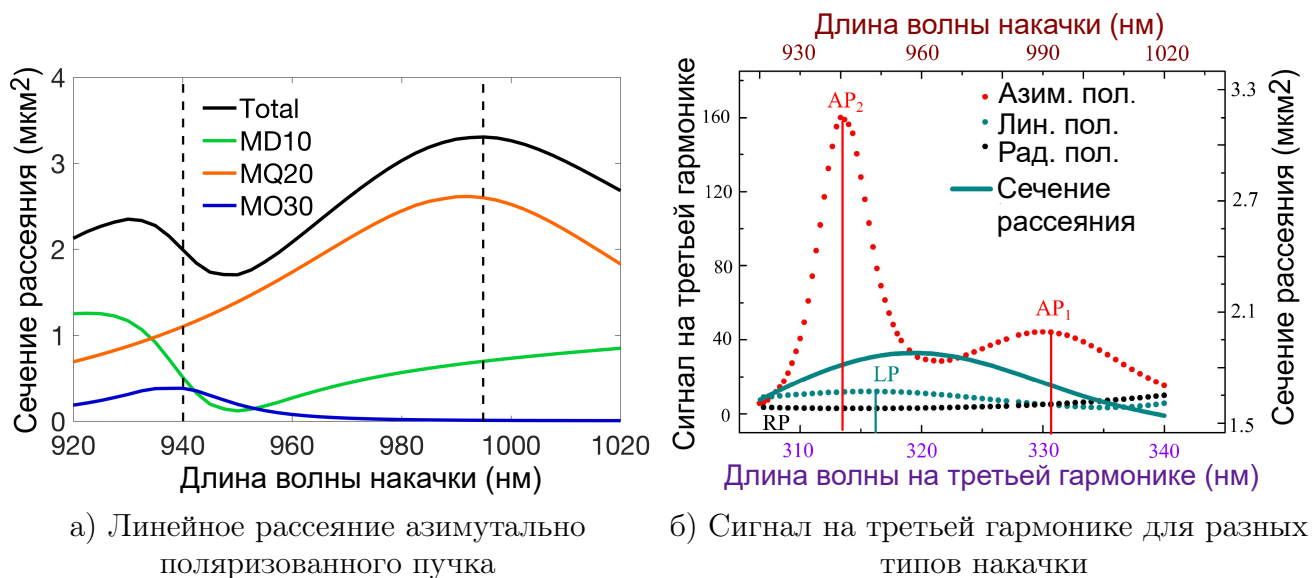


Рисунок 3.20 — (а) Спектр линейного рассеяния азимутально поляризованного цилиндрического векторного пучка (AP), сечение рассеяния показано черной линией, цветные линии соответствуют различным мультипольным вкладам в рассеяние. Вертикальные красные пунктирные линии соответствуют длинам волн собственных мод  $AP_1$  и  $AP_2$  (б) Мощность излучения на третьей гармонике, нормированная на мощность сигнала от неструктурированной кремниевой пленки той же толщины, что и высота дисков, для различных случаев поляризации падающего излучения: азимутально поляризованный цилиндрический векторный пучок (красные точки), радиально поляризованный цилиндрический векторный пучок (черные точки) и линейно поляризованное излучение (плоская волна, зеленые точки). Зеленая сплошная линия соответствует сечению рассеяния линейного поляризованного излучения интенсивность генерации неструктурированной кремниевой пленки. Интенсивность сигнала второго максимума (при большей длине волны) вдвое меньше, что позволяет различать эти две моды в дальнем поле.

### 3.6 Заключение по Главе 3

Используемые в работе аналитические и численные методы, основанные на мультипольном разложении полей в базисе из векторных сферических гармоник, позволяют развивать теорию генерации оптических гармоник в суб-

волновых диэлектрических и полупроводниковых резонансных наноструктурах (AlGaAs, GaAs, BaTiO<sub>3</sub>, Si) и описывать особенности излучения.

Изложена теория генерации второй гармоники лазерного излучения диэлектрическими частицами с анизотропным тензором объемной квадратичной нелинейной восприимчивости при возбуждении волной накачки низших (электро- и магнитодипольных) резонансов типа Ми. С использованием леммы Лоренца получены аналитические выражения для мультипольных коэффициентов генерируемого поля на удвоенной частоте для сферических частиц из AlGaAs и BaTiO<sub>3</sub> при возбуждении магнитодипольного резонанса на основной частоте. Проведен мультипольный анализ излучения на второй гармонике для аксиально-симметричных наноантенн из GaAs, выращенных вдоль различных кристаллографических направлений (100), (110) и (111) при падении плоской линейно поляризованной волны вдоль оси наноантенны.

Изучены возможности использования лазерных пучков с осесимметричным состоянием поляризации для возбуждения высокодобротных мод наноструктур для повышения эффективности преобразования частоты. С использованием теории связанных мод и мультипольной модели определены оптимальные условия эффективного возбуждения высокодобротных резонансов в диэлектрическом цилиндрическом субволновом резонаторе из AlGaAs. Получено объяснение природы многократного увеличения эффективности генерации второй гармоники в случае возбуждения диска азимутально поляризованным цилиндрическим векторным пучком по сравнению со случаем возбуждения плоской линейно поляризованной волной. Учтены нелинейные эффекты самовоздействия и конечность длительности лазерных импульсов. Получено объяснение многократного увеличения интенсивности излучения на третьей гармонике при возбуждении квадрумеров кремниевых дисков азимутально поляризованным цилиндрическим векторным пучком по сравнению с линейно поляризованной накачкой, и определены оптимальные параметры системы для обеспечения максимальной эффективности преобразования инфракрасного излучения в излучение видимого диапазона. Получено теоретическое объяснение наблюдаемой в эксперименте анизотропии генерации третьей гармоники олигомерами кремниевых дисков (тримеры и квадрумеры).

## Заключение

В заключение приведем основные результаты диссертационной работы:

1. Получены уточненные неравенства, описывающие применимость квазистатического дипольного приближения для сферической частицы как в вакууме, так и в однородной среде, и проверена применимость этого приближения в различных случаях. Получены приближенные выражения для параметров лоренцевой кривой коэффициента рассеяния вблизи магнитодипольного резонанса диэлектрической частицы с высоким показателем преломления и малыми потерями, в случае, когда частица мала по сравнению с длиной волны в окружающем пространстве. Полученные в работе условия на диэлектрические и магнитные проницаемости частицы и окружающего вещества определяют применимость квазистатического приближения в задачах рассеяния и поглощения высокочастотного электромагнитного излучения, а также в задачах расчета поглощения в ансамбле частиц при определении полей снаружи отдельной частицы, окруженной эффективной средой.
2. Разработана модель эффективной среды для определения эффективной комплексной магнитной проницаемости компактированных металлических порошковых сред. В основе модели лежит равенство магнитного момента заданного объема эффективной среды суммарному магнитному моменту металлических частиц во внешнем высокочастотном магнитном поле, возникающему благодаря возбуждению в частицах вихревых электрических токов. Расчеты в рамках предложенной модели позволяют уточнить значения действительной и мнимой части магнитной проницаемости металлических порошковых компактов в микроволновом диапазоне. Сформулированы условия применимости предложенной модели и проверено их выполнение для металлических порошковых компактов на частотах микроволнового и миллиметрового диапазонов. Разработанная модель была использована при расчетах микроволнового нагрева компактированных металлических порошковых материалов.

3. Реализован метод измерений диэлектрических свойств керамических и композитных материалов в миллиметровом диапазоне, основанный на сравнении интенсивностей электромагнитного излучения в рабочей камере гиротронного комплекса при наличии и при отсутствии образца внутри камеры. Экспериментально получены температурные зависимости тангенса угла диэлектрических потерь на частоте 24 ГГц для материалов на основе  $\text{Al}_2\text{O}_3$  в широком диапазоне температур: для чистого  $\text{Al}_2\text{O}_3$  – при 200 – 1100 °С и для композита 88%  $\text{Al}_2\text{O}_3$  + 11 %  $\text{ZrO}_2$  + 1%  $\text{Y}_2\text{O}_3$  – при 200 – 600 °С.
4. С использованием леммы Лоренца получены аналитические выражения для мультипольных коэффициентов генерируемого поля на удвоенной частоте для сферических частиц из  $\text{AlGaAs}$  и  $\text{BaTiO}_3$  при возбуждении на основной частоте первого магнитодипольного резонанса, когда магнитный дипольный момент частицы ориентирован вдоль кристаллической оси [010]. Получены аналитические зависимости относительных вкладов отдельных мультиполей в излучение на частоте второй гармоники на фиксированной длине волны в зависимости от радиуса частицы.
5. Продемонстрирована возможность создания удвоителя частоты лазерного излучения с использованием резонансных наноструктур из арсенида галлия ( $\text{GaAs}$ ,  $\text{AlGaAs}$ ). В основе предложенного частотного удвоителя лежит идея одновременной реализации в нанодисках из  $\text{AlGaAs}$  высокочастотных резонансов на частотах лазерной накачки и ее второй гармоники. Эффективность генерации второй гармоники многократно возрастает при освещении нанодиска лазерным пучком с азимутальной поляризацией по сравнению с линейно поляризованным излучением благодаря лучшему соответствию мультипольного состава накачки и высокочастотной моды диска.
6. С использованием аналитических и численных методов определен мультипольный состав коллективных мод квадруплов кремниевых дисков с различной ориентацией электрических и магнитных дипольных моментов в отдельных дисках. В результате численного моделирования получено, что при возбуждении квадрупла нормально падающим лазерным излучением эффективность генерации третьей гармоники на

два порядка больше в случае азимутально поляризованного пучка, чем в случаях линейной или радиальной поляризации, благодаря возбуждению коллективных мод с наибольшей добротностью, мультипольный состав которых определяется магнитными мультиполями с азимутальным индексом  $m = 0$ .

## Публикации автора по теме диссертации

- A1. Волковская И. И., Семёнов В. Е. О рассеянии и поглощении электромагнитных волн при возбуждении дипольных мод сферической частицы // Известия вузов. Радиофизика. — 2021. — т. 64, № 1. — с. 41—57.
- A2. Волковская И. И., Семенов В. Е., Рыбаков К. И. Эффективная высокочастотная магнитная проницаемость компактированных металлических порошковых материалов // Известия вузов. Радиофизика. — 2017. — т. 60, № 10. — с. 892—903.
- A3. Рыбаков К. И., Семёнов В. Е., Волковская И. И. Микроволновый нагрев металлических порошковых кластеров // Журнал технической физики. — 2018. — т. 88, № 1. — с. 46—51.
- A4. Rybakov K., Volkovskaya I. Electromagnetic field effects in the microwave sintering of electrically conductive powders // Ceramics International. — 2019. — May. — Vol. 45, no. 7. — P. 9567–9572.
- A5. Волковская И., Еремеев А., Быков Ю. Измерение коэффициента поглощения микроволнового излучения в керамических и композиционных материалах при высоких температурах // Известия вузов. Радиофизика. — 2018. — т. 61, № 4. — с. 321—331.
- A6. Second-harmonic generation in Mie-resonant dielectric nanoparticles made of noncentrosymmetric materials / K. Frizyuk [et al.] // Physical Review B. — 2019. — Feb. — Vol. 99, no. 7.
- A7. Tailoring Second-Harmonic Emission from (111)-GaAs Nanoantennas / J. D. Sautter [et al.] // Nano Letters. — 2019. — May. — Vol. 19, no. 6. — P. 3905–3911.
- A8. Forward and Backward Switching of Nonlinear Unidirectional Emission from GaAs Nanoantennas / L. Xu [et al.] // ACS Nano. — 2019. — Dec. — Vol. 14, no. 2. — P. 1379–1389.
- A9. Multipolar second-harmonic generation from high-Q quasi-BIC states in subwavelength resonators / I. Volkovskaya [et al.] // Nanophotonics. — 2020. — Aug. — Vol. 9, no. 12. — P. 3953–3963.

- A10. Tailored Nonlinear Anisotropy in Mie-Resonant Dielectric Oligomers / M. K. Kroychuk [et al.] // *Advanced Optical Materials*. — 2019. — July. — Vol. 7, no. 20. — P. 1900447.
- A11. Enhanced Nonlinear Light Generation in Oligomers of Silicon Nanoparticles under Vector Beam Illumination / M. K. Kroychuk [et al.] // *Nano Letters*. — 2020. — Apr. — Vol. 20, no. 5. — P. 3471–3477.
- A12. *Volkovskaya I., Semenov V., Rybakov K.* Effective magnetic permeability of compacted metal powders at microwave frequencies // *EPJ Web of Conferences* / ed. by A. Litvak. — 2017. — Vol. 149. — P. 02008.
- A13. *Volkovskaya I. I., Ereemeev A., Bykov Y.* Measuring absorptivity of ceramic materials at high temperatures in Gyrotron Ceramics Sintering System // *EPJ Web of Conferences* / ed. by V. Zapevalov. — 2018. — Vol. 187. — P. 01022.
- A14. *Smirnova D. A., Volkovskaya I. I., Smirnov A. I.* Second-Harmonic Generation by Mie-resonant Nanoparticles with Bulk Quadratic Nonlinearity // 2018 20th International Conference on Transparent Optical Networks (ICTON). — IEEE, 07/2018.
- A15. *Volkovskaya I., Smirnova D., Smirnov A.* Nonlinear generation of multipolar radiation in Mie-resonant nanoparticles // 2019 21st International Conference on Transparent Optical Networks (ICTON). — IEEE, 07/2019.
- A16. Multipolar analysis of second-harmonic generation in (111) Gallium Arsenide nanoparticles / I. Volkovskaya [et al.] // *Journal of Physics: Conference Series*. — 2020. — Mar. — Vol. 1461. — P. 012185.
- A17. Multipolar analysis of second-harmonic generation in GaAs nanoparticles grown along different crystallographic directions / I. Volkovskaya [et al.] // *AIP Conference Proceedings*. — 2020. — Vol. 2300. — P. 020131.
- A18. *Волковская И. И., Семёнов В. Е., Рыбаков К. И.* Расчет эффективной магнитной проницаемости металлических порошковых материалов в микроволновом диапазоне // *Перспективные технологии консолидации материалов с применением электромагнитных полей. 6-й Научный семинар. Тезисы докладов*. — М.: НИЯУ МИФИ, 2017. — с. 23–24.



- A19. *Волковская И. И., Смирнова Д. А.* Генерация второй гармоники Ми-резонансными наночастицами с объемной квадратичной нелинейностью // XVIII научная школа Нелинейные волны – 2018. Сборник тезисов. — 2018. — с. 26–27.
- A20. *Volkovskaya I., Smirnova D.* Second-Harmonic Generation by Mie-resonant Nanoparticles Made of Noncentrosymmetric Dielectrics // Bremen Workshop on Light Scattering 2018. — 2018. — P. 75–77.
- A21. *Волковская И. И., Рыбаков К. И.* Поглощение электромагнитных волн в металлических порошковых материалах // XXIII Нижегородская сессия молодых ученых (технические, естественные, математические науки), материалы докладов. Том II. — 2018. — с. 8–9.
- A22. *Volkovskaya I. I., Smirnova D. A.* Second harmonic generation in Mie-resonant dielectric nanoparticles made of noncentrosymmetric materials // International Conference “Days on Diffraction 2018”. — 2018. — P. 222.
- A23. *Волковская И. И., Смирнова Д. А.* Нелинейная генерация гармоник Ми-резонансными наночастицами // XXIV Нижегородская сессия молодых ученых (технические, естественные, математические науки), материалы докладов. — Нижний Новгород: НРЛ, 2019. — с. 86–87.
- A24. *Volkovskaya I. I., Smirnova D. A., Smirnov A. I.* Nonlinear harmonic generation by Mie-resonant nanoparticles // VII International conference “Frontiers of nonlinear physics”. Proceedings. — 2019. — P. 160–161.
- A25. *Волковская И. И., Смирнова Д. А., Смирнов А. И.* Эффективная генерация второй гармоники в высокочастотном диэлектрическом нанорезонаторе // XIX научная школа "Нелинейные волны – 2020". Сборник тезисов. — 2020. — с. 74–75.
- A26. *Волковская И. И., Смирнова Д. А.* Генерация оптических гармоник в субволновых диэлектрических резонаторах // XXVI Нижегородская сессия молодых ученых (технические, естественные науки), сборник статей и тезисов докладов. — М.: Издательство «Перо», 2021. — с. 251–253.

## Список литературы

1. *Bykov Y. V., Rybakov K. I., Semenov V. E.* High-temperature microwave processing of materials // Journal of Physics D: Applied Physics. — 2001. — June. — Vol. 34, no. 13. — R55–R75.
2. Microwave Processing of Materials and Applications in Manufacturing Industries: A Review / S. Singh [et al.] // Materials and Manufacturing Processes. — 2014. — Nov. — Vol. 30, no. 1. — P. 1–29.
3. *Mie G.* Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen // Annalen der Physik. — 1908. — Vol. 330, no. 3. — P. 377–445.
4. *Smirnova D., Kivshar Y. S.* Multipolar nonlinear nanophotonics // Optica. — 2016. — Oct. — Vol. 3, no. 11. — P. 1241.
5. Enhanced Third-Harmonic Generation in Silicon Nanoparticles Driven by Magnetic Response / M. R. Shcherbakov [et al.] // Nano Letters. — 2014. — Oct. — Vol. 14, no. 11. — P. 6488–6492.
6. Ultrafast All-Optical Switching with Magnetic Resonances in Nonlinear Dielectric Nanostructures / M. R. Shcherbakov [et al.] // Nano Letters. — 2015. — Sept. — Vol. 15, no. 10. — P. 6985–6990.
7. Nonlinear Optical Magnetism Revealed by Second-Harmonic Generation in Nanoantennas / S. S. Kruk [et al.] // Nano Letters. — 2017. — May. — Vol. 17, no. 6. — P. 3914–3918.
8. Nonlinear Generation of Vector Beams From AlGaAs Nanoantennas / R. Camacho-Morales [et al.] // Nano Letters. — 2016. — Oct. — Vol. 16, no. 11. — P. 7191–7197.
9. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Электродинамика сплошных сред. — 4-е изд, стереот. — М.: Физмалит, 2005. — 656 с.
10. Effective medium at finite frequency: Theory and experiment / D. Roussele [et al.] // Journal of Applied Physics. — 1993. — July. — Vol. 74, no. 1. — P. 475–479.

11. *Rybakov K. I., Semenov V. E.* Effective Microwave Dielectric Properties of Ensembles of Spherical Metal Particles // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. — 2017. — May. — Vol. 65, no. 5. — P. 1479–1487.
12. *Ruan Z., Fan S.* Temporal Coupled-Mode Theory for Fano Resonance in Light Scattering by a Single Obstacle // The Journal of Physical Chemistry C. — 2009. — Dec. — Vol. 114, no. 16. — P. 7324–7329.
13. *Джексон Д.* Классическая электродинамика. — М.: Мир, 1965. — 702 с.
14. *Быстров А. М., Гильденбург В. Б.* Дипольные резонансы ионизированного кластера // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. — 2005. — т. 127, № 2. — с. 478–490.
15. Coupled-mode theory for general free-space resonant scattering of waves / R. E. Hamam [et al.] // Physical Review A. — 2007. — May. — Vol. 75, no. 5.
16. *Ram A. K., Hizanidis K., Kominis Y.* Scattering of radio frequency waves by blobs in tokamak plasmas // Physics of Plasmas. — 2013. — May. — Vol. 20, no. 5. — P. 056110.
17. *Fan X., Zheng W., Singh D. J.* Light scattering and surface plasmons on small spherical particles // Light: Science & Applications. — 2014. — June. — Vol. 3, no. 6. — e179–e179.
18. *Meier M., Wokaun A.* Enhanced fields on large metal particles: dynamic depolarization // Optics Letters. — 1983. — Nov. — Vol. 8, no. 11. — P. 581.
19. *Tribelsky M. I., Luk'yanchuk B. S.* Anomalous Light Scattering by Small Particles // Physical Review Letters. — 2006. — Dec. — Vol. 97, no. 26.
20. *Гильденбург В. Б., Миллер М. А.* Об ускорении плазменного сгустка при прохождении через неоднородное электромагнитное поле // Известия высших учебных заведений. Радиофизика. — 1960. — т. 3, № 1. — с. 97–101.
21. Некоторые вопросы дифракции электромагнитных волн на плазменных образованиях / В. Гильденбург [и др.] // Известия высших учебных заведений. Радиофизика. — 1967. — т. 10, № 9/10. — с. 1358–1375.

22. *Gildenburg V. B., Kostin V. A., Pavlichenko I. A.* Resonances of surface and volume plasmons in atomic clusters // *Physics of Plasmas*. — 2011. — Sept. — Vol. 18, no. 9. — P. 092101.
23. *Ruan Z., Fan S.* Design of subwavelength superscattering nanospheres // *Applied Physics Letters*. — 2011. — Jan. — Vol. 98, no. 4. — P. 043101.
24. *Tribelsky M. I., Miroshnichenko A. E.* Giant in-particle field concentration and Fano resonances at light scattering by high-refractive-index particles // *Physical Review A*. — 2016. — May. — Vol. 93, no. 5.
25. *Трибелский М. И.* Особенности рассеяния света частицами с большим коэффициентом преломления // *Оптический журнал*. — 2017. — т. 84, № 7. — с. 4–12.
26. *Tzarouchis D., Sihvola A.* Light Scattering by a Dielectric Sphere: Perspectives on the Mie Resonances // *Applied Sciences*. — 2018. — Jan. — Vol. 8, no. 2. — P. 184.
27. Optically resonant dielectric nanostructures / A. I. Kuznetsov [et al.] // *Science*. — 2016. — Nov. — Vol. 354, no. 6314.
28. Optimum Forward Light Scattering by Spherical and Spheroidal Dielectric Nanoparticles with High Refractive Index / B. S. Luk'yanchuk [et al.] // *ACS Photonics*. — 2015. — June. — Vol. 2, no. 7. — P. 993–999.
29. All-dielectric nanophotonics: the quest for better materials and fabrication techniques / D. G. Baranov [et al.] // *Optica*. — 2017. — July. — Vol. 4, no. 7. — P. 814.
30. Magnetic light / A. I. Kuznetsov [et al.] // *Scientific Reports*. — 2012. — July. — Vol. 2, no. 1.
31. Demonstration of Magnetic Dipole Resonances of Dielectric Nanospheres in the Visible Region / A. B. Evlyukhin [et al.] // *Nano Letters*. — 2012. — June. — Vol. 12, no. 7. — P. 3749–3755.
32. Colossal magnetic fields in high refractive index materials at microwave frequencies / B. Luk'yanchuk [et al.] // *Scientific Reports*. — 2021. — Dec. — Vol. 11, no. 1.

33. High order Fano resonances and giant magnetic fields in dielectric microspheres / Z. Wang [et al.] // Scientific Reports. — 2019. — Dec. — Vol. 9, no. 1.
34. Kerker M., Wang D.-S., Giles C. L. Electromagnetic scattering by magnetic spheres // Journal of the Optical Society of America. — 1983. — June. — Vol. 73, no. 6. — P. 765.
35. Demonstration of Zero Optical Backscattering from Single Nanoparticles / S. Person [et al.] // Nano Letters. — 2013. — Mar. — Vol. 13, no. 4. — P. 1806–1809.
36. Shibanuma T., Albella P., Maier S. A. Unidirectional light scattering with high efficiency at optical frequencies based on low-loss dielectric nanoantennas // Nanoscale. — 2016. — Vol. 8, no. 29. — P. 14184–14192.
37. Babicheva V. E., Moloney J. V. Lattice effect influence on the electric and magnetic dipole resonance overlap in a disk array // Nanophotonics. — 2018. — Sept. — Vol. 7, no. 10. — P. 1663–1668.
38. Tretyakov S. Maximizing Absorption and Scattering by Dipole Particles // Plasmonics. — 2014. — May. — Vol. 9, no. 4. — P. 935–944.
39. Multipole and multimode engineering in Mie resonance-based metastructures / T. Liu [et al.] // Nanophotonics. — 2020. — Mar. — Vol. 9, no. 5. — P. 1115–1137.
40. Directional lasing in resonant semiconductor nanoantenna arrays / S. T. Ha [et al.] // Nature Nanotechnology. — 2018. — Aug. — Vol. 13, no. 11. — P. 1042–1047.
41. Вайнштейн Л. Электромагнитные волны. — 2-е изд. — М: Радио и связь, 1998. — 440 с.
42. Шалашов А., Господчиков Е. К вопросу об определении электромагнитного поля при рассеянии на малом неоднородном сферическом объекте // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. — 2016. — окт. — т. 150, № 4. — с. 683–697.

43. *Shalashov A., Gospodchikov E.* Simple Approach to Electromagnetic Scattering by Small Radially Inhomogeneous Spheres // IEEE Transactions on Antennas and Propagation. — 2016. — Sept. — Vol. 64, no. 9. — P. 3960–3971.
44. *Борен К., Хафмен Д.* Поглощение и рассеяние света малыми частицами. — М.: Мир, 1986. — 664 с.
45. *Морс Ф., Феибах Г.* Методы теоретической физики, Т.2. — М.: ВК, 1960. — 886 с.
46. *Clark D. E., Sutton W. H.* Microwave Processing of Materials // Annual Review of Materials Science. — 1996. — Aug. — Vol. 26, no. 1. — P. 299–331.
47. Full sintering of powdered-metal bodies in a microwave field / R. Roy [et al.] // Nature. — 1999. — June. — Vol. 399, no. 6737. — P. 668–670.
48. *Gupta M., Wong W. L. E.* Microwaves and Metals. — John Wiley & Sons (Asia) Pte Ltd, 09/2007.
49. *Cheng J., Roy R., Agrawal D.* // Journal of Materials Science Letters. — 2001. — Vol. 20, no. 17. — P. 1561–1563.
50. *Mahmoud M. M., Link G., Thumm M.* The role of the native oxide shell on the microwave sintering of copper metal powder compacts // Journal of Alloys and Compounds. — 2015. — Apr. — Vol. 627. — P. 231–237.
51. *Bruggeman D. A. G.* Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen. I. Dielektrizitätskonstanten und Leitfähigkeiten der Mischkörper aus isotropen Substanzen // Annalen der Physik. — 1935. — Vol. 416, no. 7. — P. 636–664.
52. *Bergman D. J., Stroud D.* Physical Properties of Macroscopically Inhomogeneous Media // Solid State Physics. — Elsevier, 1992. — P. 147–269.
53. *Рыбаков К. И., Семёнов В. Е.* Микроволновый нагрев электропроводящих материалов // Известия высших учебных заведений. Радиофизика. — 2005. — т. 48, № 10/11. — с. 997–1004.

54. Microwave heating of conductive powder materials / K. I. Rybakov [et al.] // Journal of Applied Physics. — 2006. — Jan. — Vol. 99, no. 2. — P. 023506.
55. Поглощение микроволнового излучения в металлокерамических порошковых материалах / С. В. Егоров [и др.] // Известия высших учебных заведений. Радиофизика. — 2010. — т. 53, № 5/6. — с. 393—402.
56. Extraction of effective permittivity and permeability of metallic powders in the microwave range / T. Galek [et al.] // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. — 2010. — Mar. — Vol. 18, no. 2. — P. 025015.
57. *Аркадьев В.* Ферромагнитные свойства металлов, как функция длины волны // Журнал Русского физико-химического общества. — 1913. — т. 45, № 3. — с. 104—108.
58. Исследовательский гиротронный комплекс миллиметрового диапазона длин волн. I. Описание комплекса / Ю. Быков [и др.] // Известия высших учебных заведений. Радиофизика. — 2018. — т. 61, № 10. — с. 843—855.
59. *Lamb W. E.* Theory of a Microwave Spectroscope // Physical Review. — 1946. — Sept. — Vol. 70, no. 5/6. — P. 308—317.
60. *Kremer F., Izatt J. R.* Millimeter-wave absorption measurements in low-loss dielectrics using an untuned cavity resonator // International Journal of Infrared and Millimeter Waves. — 1981. — July. — Vol. 2, no. 4. — P. 675—694.
61. 24–84-GHz Gyrotron Systems for Technological Microwave Applications / Y. Bykov [et al.] // IEEE Transactions on Plasma Science. — 2004. — Feb. — Vol. 32, no. 1. — P. 67–72.
62. *Izatt J. R., Kremer F.* Millimeter wave measurement of both parts of the complex index of refraction using an untuned cavity resonator // Applied Optics. — 1981. — July. — Vol. 20, no. 14. — P. 2555.
63. *Ho W. W.* High-Temperature Dielectric Properties of Polycrystalline Ceramics // MRS Proceedings. — 1988. — Vol. 124.

64. Dielectric properties of alumina/zirconia composites at millimeter wavelengths / J. Mollá [et al.] // Journal of Applied Physics. — 1993. — June. — Vol. 73, no. 11. — P. 7667–7671.
65. *Hippel A. R. von, Morgan S. O.* Dielectric Materials and Applications // Journal of The Electrochemical Society. — 1955. — Vol. 102, no. 3. — P. 68C.
66. Dielectric spectroscopy of alumina ceramics over a wide frequency range / R. Vila [et al.] // Journal of Nuclear Materials. — 1998. — Mar. — Vol. 253, no. 1–3. — P. 141–148.
67. *Стрэттон Д. А.* Теория электромагнетизма. — М.: ГИТТЛ, 1948. — 540 с.
68. *Janaswamy R.* A Note on the TE/TM Decomposition of Electromagnetic Fields in Three Dimensional Homogeneous Space // IEEE Transactions on Antennas and Propagation. — 2004. — Sept. — Vol. 52, no. 9. — P. 2474–2476.
69. *Sarkar D., Halas N. J.* General vector basis function solution of Maxwell's equations // Physical Review E. — 1997. — July. — Vol. 56, no. 1. — P. 1102–1112.
70. *Ruppin R.* Optical properties of small metal spheres // Physical Review B. — 1975. — Apr. — Vol. 11, no. 8. — P. 2871–2876.
71. *David C., Abajo F. J. G. de.* Spatial Nonlocality in the Optical Response of Metal Nanoparticles // The Journal of Physical Chemistry C. — 2011. — Sept. — Vol. 115, no. 40. — P. 19470–19475.
72. *Dong T., Ma X.* Electromagnetic scattering by gyrotropic semiconductor spheres when considering spatial dispersion // Journal of Physics D: Applied Physics. — 2018. — June. — Vol. 51, no. 28. — P. 285302.
73. Investigation on plasmonic responses in multilayered nanospheres including asymmetry and spatial nonlocal effects / T. Dong [et al.] // Journal of Physics D: Applied Physics. — 2017. — Nov. — Vol. 50, no. 49. — P. 495302.
74. *Varshalovich D. A., Moskalev A. N., Khersonskii V. K.* Quantum Theory of Angular Momentum. — World Scientific Publishing Company, 10/1988.



75. *Barrera R. G., Estevez G. A., Giraldo J.* Vector spherical harmonics and their application to magnetostatics // *European Journal of Physics*. — 1985. — Oct. — Vol. 6, no. 4. — P. 287–294.
76. *Stout B., Nevière M., Popov E.* Light diffraction by a three-dimensional object: differential theory // *Journal of the Optical Society of America A*. — 2005. — Nov. — Vol. 22, no. 11. — P. 2385.
77. *Gratings: theory and numeric applications* / ed. by E. Popov. — Second Revisited Edition. — Presses Universitaires de Provence, 2014.
78. *Gonella G., Dai H.-L.* Determination of adsorption geometry on spherical particles from nonlinear Mie theory analysis of surface second harmonic generation // *Physical Review B*. — 2011. — Sept. — Vol. 84, no. 12.
79. *Alaee R., Rockstuhl C., Fernandez-Corbaton I.* An electromagnetic multipole expansion beyond the long-wavelength approximation // *Optics Communications*. — 2018. — Jan. — Vol. 407. — P. 17–21.
80. *Grahn P., Shevchenko A., Kaivola M.* Electromagnetic multipole theory for optical nanomaterials // *New Journal of Physics*. — 2012. — Sept. — Vol. 14, no. 9. — P. 093033.
81. *Sutherland R. L.* *Handbook of Nonlinear Optics*. — CRC Press, 04.2003.
82. *Smirnova D., Smirnov A. I., Kivshar Y. S.* Multipolar second-harmonic generation by Mie-resonant dielectric nanoparticles // *Physical Review A*. — 2018. — Jan. — Vol. 97, no. 1.
83. *Shaping the Radiation Pattern of Second-Harmonic Generation from AlGaAs Dielectric Nanoantennas* / L. Carletti [и др.] // *ACS Photonics*. — 2016. — май. — т. 3, № 8. — с. 1500–1507.
84. *Vertical Second Harmonic Generation in Asymmetric Dielectric Nanoantennas* / D. Rocco [и др.] // *IEEE Photonics Journal*. — 2020. — июнь. — т. 12, № 3. — с. 1–7.
85. *Monolithic AlGaAs second-harmonic nanoantennas: erratum* / V. F. Gili [и др.] // *Optics Express*. — 2021. — март. — т. 29, № 7. — с. 11132.
86. *Liu T., Fang X., Xiao S.* Tuning nonlinear second-harmonic generation in AlGaAs nanoantennas via chalcogenide phase-change material // *Physical Review B*. — 2021. — нояб. — т. 104, № 19.

87. Three-Dimensional Nanostructures as Highly Efficient Generators of Second Harmonic Light / Y. Zhang [et al.] // Nano Letters. — 2011. — Dec. — Vol. 11, no. 12. — P. 5519–5523.
88. Bound states in the continuum / C. W. Hsu [et al.] // Nature Reviews Materials. — 2016. — July. — Vol. 1, no. 9.
89. Lasing action from photonic bound states in continuum / A. Kodigala [et al.] // Nature. — 2017. — Jan. — Vol. 541, no. 7636. — P. 196–199.
90. High-Q Supercavity Modes in Subwavelength Dielectric Resonators / M. V. Rybin [et al.] // Physical Review Letters. — 2017. — Dec. — Vol. 119, no. 24.
91. *Hasan M. R., Hellesø O. G.* Dielectric optical nanoantennas // Nanotechnology. — 2021. — февр. — т. 32, № 20. — с. 202001.
92. From Fano to Quasi-BIC Resonances in Individual Dielectric Nanoantennas / E. Melik-Gaykazyan [и др.] // Nano Letters. — 2021. — февр. — т. 21, № 4. — с. 1765–1771.
93. *Youngworth K. S., Brown T. G.* Focusing of high numerical aperture cylindrical-vector beams // Optics Express. — 2000. — July. — Vol. 7, no. 2. — P. 77.
94. *Doicu A., Wriedt T., Eremin Y. A.* Light Scattering by Systems of Particles. — Springer Berlin Heidelberg, 2006.
95. Optical properties of  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  / D. E. Aspnes [и др.] // Journal of Applied Physics. — 1986. — июль. — т. 60, № 2. — с. 754–767.