

**Министерство образования и науки Российской Федерации**  
**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ**  
**“САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ**  
**УНИВЕРСИТЕТ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ,**  
**МЕХАНИКИ И ОПТИКИ”**

**ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА**

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕНЕРАЦИИ ВТОРОЙ ГАРМОНИКИ В ДИМЕРЕ НА**  
**ОСНОВЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ**

Автор Тарасов Максим Геннадьевич \_\_\_\_\_  
(Фамилия, Имя, Отчество) (Подпись)

Направление подготовки (специальность) 12.04.03 Фотоника и  
(код, наименование)  
отпоинформатика

Квалификация \_\_\_\_\_  
магистр  
(бакалавр, магистр)

Руководитель Петров М.И., к.ф.-м.н. \_\_\_\_\_  
(Фамилия, И., О., ученое звание, степень) (Подпись)

**К защите допустить**

Зав. кафедрой Белов П.А., д.ф.-м.н. \_\_\_\_\_  
(Фамилия, И., О., ученое звание, степень) (Подпись)

“ \_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20 \_\_\_\_ г.

Студент Тарасов М.Г. Группа Z4240 Кафедра НиМ Факультет ФТФ  
(Фамилия, И.О.)

Направленность (профиль), специализация Метаматериалы

Консультант(ы):

а) \_\_\_\_\_  
(Фамилия, И., О., ученое звание, степень) (Подпись)

б) \_\_\_\_\_  
(Фамилия, И., О., ученое звание, степень) (Подпись)

ВКР принята “ \_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20 \_\_\_\_ г.

Оригинальность ВКР \_\_\_\_\_ %

ВКР выполнена с оценкой \_\_\_\_\_

Дата защиты “ \_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20 \_\_\_\_ г.

Секретарь ГЭК \_\_\_\_\_  
(ФИО) (подпись)

Листов хранения \_\_\_\_\_

Демонстрационных материалов/Чертежей хранения \_\_\_\_\_

## СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ .....	7
1 АНАЛИЗ ЛИТЕРАТУРЫ И ПОСТАНОВКА ЦЕЛИ .....	9
1.1 Описание процесса генерации второй гармоники.....	9
1.2 Генерация второй гармоники на субволновых масштабах и способы её увеличения .....	13
2 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ .....	28
3 РЕАЛИЗАЦИЯ НАНОАНТЕННОГО И БИ-РЕЗОНАНСНОГО ПОДХОДА.....	30
3.1 Анализ диполь-дипольной генерации второй гармоники в нанодимере .....	30
3.1.1 Анализ упругого рассеяния и подбор размеров частиц входящих в нанодимер .....	30
3.1.2 Моделирование спектральной зависимости генерации второй гармоники нанодимером в случае ТЕ/ТМ поляризации излучения накачки.....	34
3.1.3 Оценка усиления генерации второй гармоники в нанодимере .....	38
3.2 Анализ диполь-квадрупольной генерации второй гармоники в нанодимере	39
3.2.1 Анализ упругого рассеяния и подбор размеров частиц входящих в нанодимер .....	39
3.2.2 Моделирование спектральной зависимости генерации второй гармоники нанодимером в случае ТЕ/ТМ поляризации излучения накачки.....	41
3.2.3 Оценка усиления генерации второй гармоники в нанодимере .....	43
3.3 Анализ влияния би-резонансного подхода на усиления ГВГ в нанодимере .	45
ЗАКЛЮЧЕНИЕ .....	47
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	48

## ВВЕДЕНИЕ

Создание лазера привело к гигантскому прогрессу в различных областях науки и техники. В частности, началось стремительное развитие нелинейной оптики. Ряд нелинейных оптических эффектов нашли своё применение в оптических линиях связи, приборах литографии, источниках сверхкоротких импульсов, различных типах оптических модуляторах и многих других устройств. Но несмотря на гигантский научно-технический прогресс в нелинейной оптике, множество важных проблем до сих пор не теряют своей актуальности. Одной из таких проблем является проблема эффективной нелинейной генерации оптических сигналов в микро- и наносистемах, в частности генерация второй гармоники. Данная проблема является крайне важной и перспективной как с фундаментальной, так и с практической точки зрения, в следствии того, что основной механизм увеличения эффективности генерации нелинейных сигналов по средствам фазового синхронизма не применим на масштабах, меньших длины волны. По этой причине в микро- и наноразмерных системах для генерации нелинейных сигналов обычно используют иной подход, который заключается в использовании собственных резонансов системы, добротность которых является важнейшим фактором, который определяет усилие электромагнитного поля и, как следствие, эффективность нелинейной генерации. В частности, один из основных методов заключается в использовании резонансных металлических (плазменных) структур. В таких резонаторах можно добиться сильной пространственной локализации света, однако их добротность ограничивается значительными потерями на свободных носителях - электронах. К тому же, плазмонные структуры, благодаря наличию центра инверсии в их кристаллической структуре, не обладают собственной нелинейностью второго порядка, что существенно ограничивает круг их возможных приложений.

С прикладной же точки зрения, решение вышеуказанной проблемы, является весьма актуальной задачей, так как это приведёт к созданию эффективных компактных нелинейных источников оптического излучения, в частности источников генерации второй гармоники, которые имеют широкий

круг потенциальных приложений. Среди них, особое место занимают, оптические линии связи и системы обработки информации.

Создание таких источников позволит осуществить большой качественный прорыв в области современных информационных технологий. Помимо этого, создание новейших эффективных субволновых резонаторов для нелинейной генерации оптических сигналов позволит значительно снизить мощность электромагнитного излучения накачки, что в свою очередь приведёт к расширению круга возможных применений подобных устройств и поспособствует существенному снижению как цены, так и энергопотребления разработанных в конечном итоге устройств.

Таким образом, данная выпускная квалификационная работа, направлена на поиск новых способов по увеличению эффективности генерации второй гармоники в субволновых системах.

# 1 АНАЛИЗ ЛИТЕРАТУРЫ И ПОСТАНОВКА ЦЕЛИ

## 1.1 Описание процесса генерации второй гармоники

Генерация второй гармоники (ГВГ) - является нелинейным оптическим процессом, в ходе которого происходит образования вторичных электромагнитных волн удвоенной частоты в результате нелинейного взаимодействия падающей электромагнитной волны с веществом. ГВГ была впервые продемонстрирована Питером Франкеном и его коллегами в Университете Мичигана, в 1961 году [1]. Они сфокусировали излучение рубинового лазера с длиной волны 694 нм в кварцевый образец. После этого выходное излучение было проанализировано с помощью спектрометра, спектр был получен на фотографической бумаге, и зарегистрировано сгенерированное излучение на длине волны 347 нм.

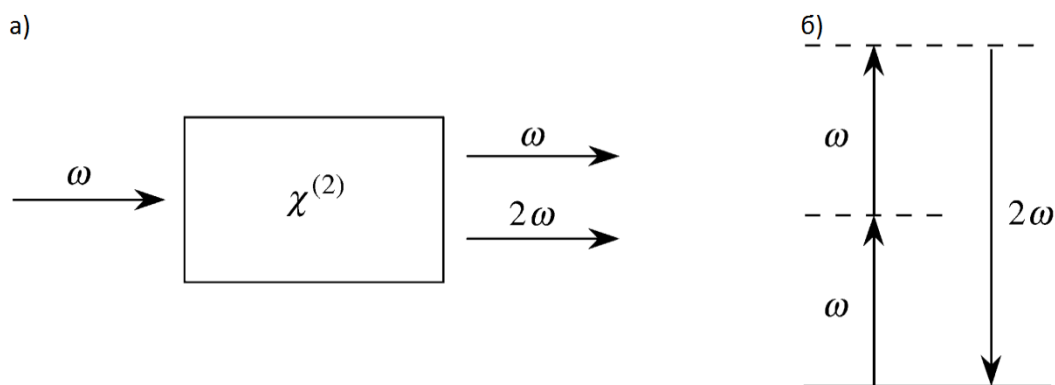


Рисунок 1 - а) Геометрия ГВГ, б) Диаграмма энергетических уровней, описывающая ГВГ

Рассмотрим процесс генерации второй гармоники. В случае линейной оптики, наведенная поляризация линейно зависит от напряженности электрического поля и описывается следующим выражением

$$\tilde{P}(t) = \varepsilon_0 \chi^{(1)} \tilde{E}(t), \quad (1)$$

где коэффициент пропорциональности  $\chi^{(1)}$  известен как линейная восприимчивость, а  $\varepsilon_0$  является диэлектрической проницаемостью свободного пространства. Уравнения (1) записано с учетом предположения о том, что поляризация в момент времени  $t$  зависит только от мгновенного значения

напряженности электрического поля. В нелинейной оптике, оптический отклик часто может быть описан путём обобщения уравнения (1) и выражен через поляризацию  $\tilde{P}(t)$  как степенной ряд по  $\tilde{E}(t)$  в следующем виде:

$$\begin{aligned}\tilde{P}(t) &= \varepsilon_0 [\chi^{(1)}\tilde{E}(t) + \chi^{(2)}\tilde{E}^2(t) + \chi^{(3)}\tilde{E}^3(t) + \dots] \\ &\equiv \tilde{P}^1(t) + \tilde{P}^2(t) + \tilde{P}^3(t) + \dots, (2)\end{aligned}$$

Величины  $\chi^{(2)}$  и  $\chi^{(3)}$  известны как нелинейные восприимчивости второго и третьего порядка, соответственно. Для простоты, поля  $\tilde{P}(t)$  и  $\tilde{E}(t)$  рассматриваются как скалярные величины, в таком случае нелинейные восприимчивости являются также скалярными величинами. Если же учитывать векторный характер полей  $\tilde{P}(t)$  и  $\tilde{E}(t)$ , то в таком случае нелинейная восприимчивость  $\chi^{(1)}$  является тензорами 2-го ранга,  $\chi^{(2)}$  является тензором 3-го ранга и так далее. Наиболее обычный путь для описания нелинейных оптических явлений заключается в выражении поляризации  $\tilde{P}(t)$  в терминах напряженности электрического поля  $\tilde{E}(t)$  как мы это сделали ранее. Причина, по которой поляризация играет ключевую роль в описании нелинейных оптических явлений заключается в том, что изменяющийся во времени вектор поляризации может выступать в качестве источника новых компонентов электромагнитного поля. Например, волновое уравнение в нелинейных оптических средах часто имеет следующий вид

$$\nabla^2 \tilde{E} - \frac{n^2}{c^2} \frac{\partial^2 \tilde{E}}{\partial t^2} = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \frac{\partial^2 \tilde{P}^{NL}}{\partial t^2}, (3)$$

где  $n$  это линейный показатель преломления,  $c$  - скорость света в вакууме. Мы можем интерпретировать это выражение как неоднородное волновое уравнение, в котором поляризация  $\tilde{P}^{NL}$ , связанная с нелинейным откликом, возбуждает электрическое поле  $\tilde{E}$ . Поскольку  $\partial^2 \tilde{P}^{NL} / \partial t^2$  является мерой ускорения зарядов, составляющих среду, это уравнение согласуется с теоремой Лармора о электромагнетизме, которая гласит, что заряды, движущиеся с ускорением, генерируют электромагнитное излучение.

Обратимся к Рисунку 1 а). Здесь лазерный луч, электрическое поле которого представляется как  $\tilde{E}(t) = E e^{-i\omega t} + \text{к. с.}$ , падает на кристалл с ненулевой восприимчивость второго порядка  $\chi^{(2)}$ . Нелинейная поляризация, создаваемая в таком кристалле, в соответствии с выражением (2) дается следующим выражением  $\tilde{P}^2(t) = \varepsilon_0 \chi^{(2)} \tilde{E}^2(t)$  или в более явной форме

$$\tilde{P}^2(t) = 2\varepsilon_0 \chi^{(2)} E E^* + (\varepsilon_0 \chi^{(2)} E^2 e^{-i2\omega t} + \text{к. с.}), \quad (4)$$

Мы видим, что поляризация второго порядка состоит из вклада с нулевой частотой (первое слагаемое) и вклада с удвоенной частотой  $2\omega$  (второе слагаемое). Согласно волновому уравнению (3) последний вклад может привести к генерации излучения на удвоенной частоте, то есть на частоте второй гармоники. Заметим, что первый вклад в (4) не приводит к какой-либо генерации электромагнитного излучения, так как его вторая производная по времени равна нулю.

Генерация второй гармоники может быть наглядно продемонстрирована путем рассмотрения взаимодействия в терминах обмена фотонами между различными частотными компонентами поля. Согласно этой картине, которая проиллюстрирована в части (б) на Рисунке 1, два фотона с частотой  $\omega$  поглощаются, при этом создаётся фотон с частотой  $2\omega$ . Сплошная линия на рисунке представляет собой основное атомное состояние, а пунктирные линии представляют собой так называемые виртуальные уровни. Этим уровням не соответствуют собственные энергетические состояния атомов, но являются уровнями промежуточных состояний фотонов.

Материалы, обладающие центральной симметрией и, как следствие, центром инверсии, не обладают квадратичной нелинейностью, так как в таком случае тензор нелинейной восприимчивости второго порядка у таких материалов равен нулю [2], поэтому для генерации второй гармоники, как правило, используют нецентросимметричные кристаллы, обладающие сильно выраженными нелинейно-оптическим свойствами.



Одним из таких кристаллов является кристалл титаната бария, структурная модель его элементарной ячейки изображена на Рисунке 2.

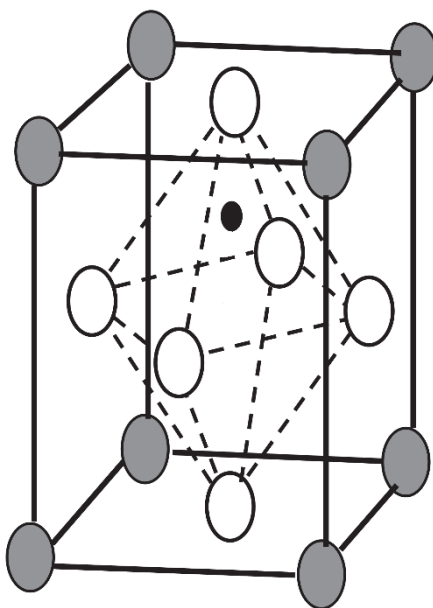


Рисунок 2 - Структурная модель тетрагональной элементарной ячейки кристалла титаната бария

С точки зрения классической электродинамики, возникновению сильной нелинейности второго порядка такие кристаллы обязаны своей нецентросимметричной структуре, благодаря ей, электроны находятся в ангармоническом потенциальном поле, в следствии чего и совершают ангармонические колебания. В таком случае, вектор поляризуемости будет иметь дополнительное слагаемое, которое отвечает именно за генерацию второй гармоники:  $\vec{P}(t) = \epsilon_0 [\chi^{(1)} \vec{E}(t) + \chi^{(2)} \vec{E}^2(t)] \equiv \vec{E}^1(t) + \vec{E}^2(t)$ .

Но не только нецентросимметричные структуры обладают нелинейностью второго порядка. В работе [3] авторы исследовали генерацию второй гармоники на металлических поверхностях. Несмотря на то, что металлы обладают центросимметричной структурой, возможность генерации второй гармоники остаётся возможной, в следствии нарушения центросимметричности на поверхности металла. Как будет показано ниже, данный механизм нелинейного

отклика второго порядка используется для генерации второй гармоники на наномасштабе.

## **1.2 Генерация второй гармоники на субволновых масштабах и способы её увеличения**

Как уже упоминалось выше, эффективная генерация второй гармоники в субволновых резонаторах является весьма важной и перспективной задачей как с фундаментальной, так и с прикладной точки зрения, поскольку основной механизм увеличения эффективности за счет фазового синхронизма [2] не применим на масштабах, меньших длины волны. В следствии этого, в микро- и наносистемах для увеличения эффективности генерации второй гармоники используются системы, обладающие собственными резонансами.

На сегодняшний день плазмонные системы, обладающие собственными резонансами электронного газа (металлы, полупроводники), на основе одиночных наноструктур и периодических массивов из наночастиц, являются основными источниками для генерации оптических гармоник на микро- и наномасштабе.

Например, в работе [4] теоретически и экспериментально исследовалась генерация второй гармоники золотой наносферой размера 150 нм. Авторам работы удалось произвести численные расчеты пространственных распределений нелинейных токов (Рисунок 3, а) -f)), получить расчетные и экспериментальные спектры интенсивности второй гармоники в зависимости от угла поляризации падающего излучения, а также осуществить численные расчеты и экспериментальное наблюдение диаграмм направленности для излучения второй гармоники (Рисунок 3, g) - j)). Все численные расчеты были выполнены методом конечных элементов.

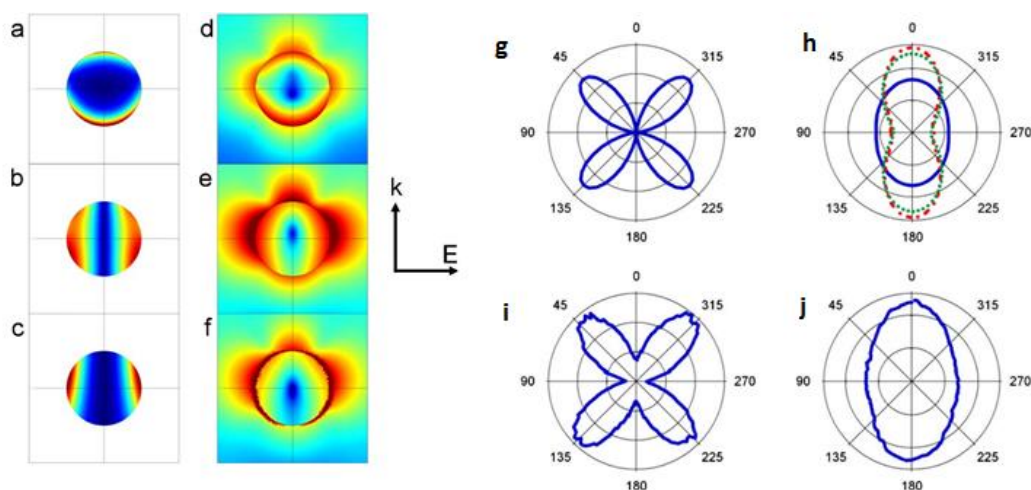


Рисунок 3 - Пространственное распределение рассчитанных нелинейных токов а) для объемного вклада б) тангенциальной и с) нормальной компонент поверхностных токов для золотой наночастицы размера 150 нм, возбужденной излучением с длиной волны равно 800 нм. Карта распределения ближнего поля показана на d) - f), g) – j) интенсивность второй гармоники в зависимости от угла поляризации падающего излучения

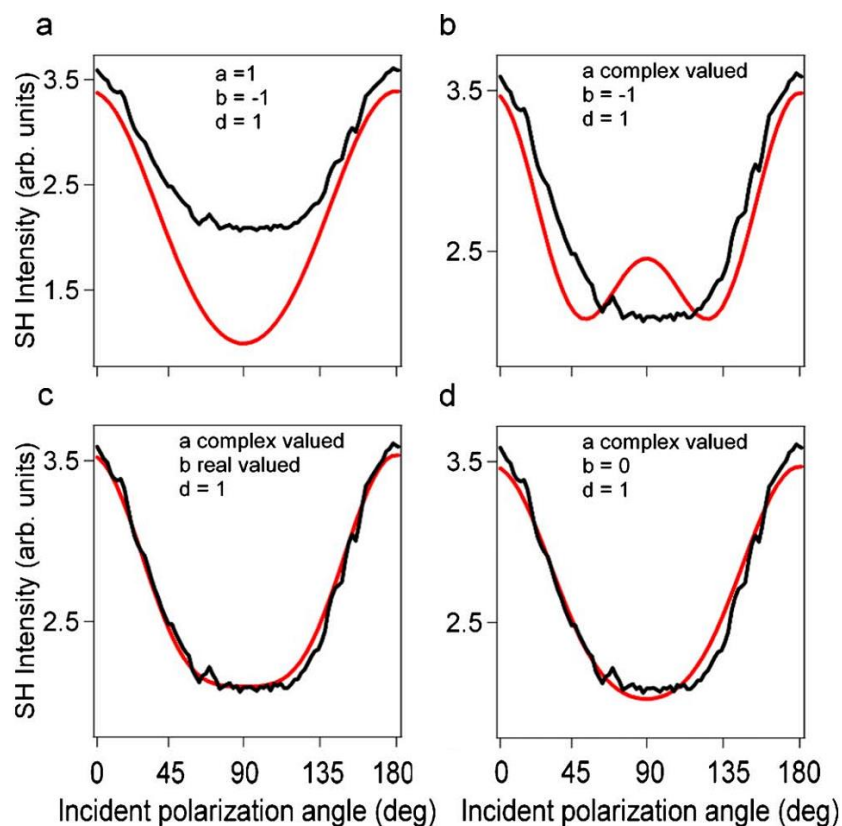


Рисунок 4 - Нормированная интенсивность второй гармоники в дальнем поле, рассчитанная методом конечных элементов [a) и b)] и [c) и d)] измеренная экспериментально как функции поляризации электрического поля на фундаментальной частоте. Поляризация поля второй гармоники перпендикулярна на a), c) и параллельна b), d) плоскости рассеяния

Другим подходом к усилению генерации второй гармоники является использование системы с существованием Фано-резонанса. В работе [5] авторам удалось экспериментально и теоретически продемонстрировать усиление второй гармоники за счет Фано-резонанса в системе из серебряных наночастиц, образующих структуру гептомера, изображенного на Рисунке 5.

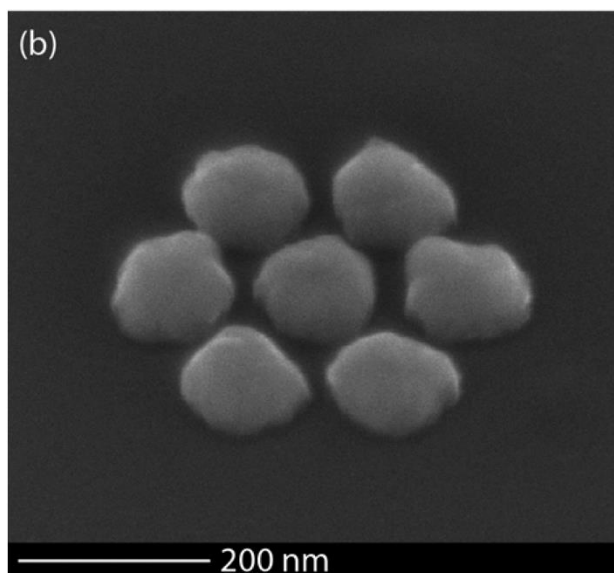


Рисунок 5 - Изображение структуры из наночастиц серебра, поддерживающих резонанс Фано, полученное с помощью сканирующего электронного микроскопа

Данная структура состоит из 7 наночастиц серебра диаметра 120 нм. и высотой 30 нм. Расстояние между наночастицами составляет 30 нм., спектр её упругого рассеяния изображен на Рисунке 6.

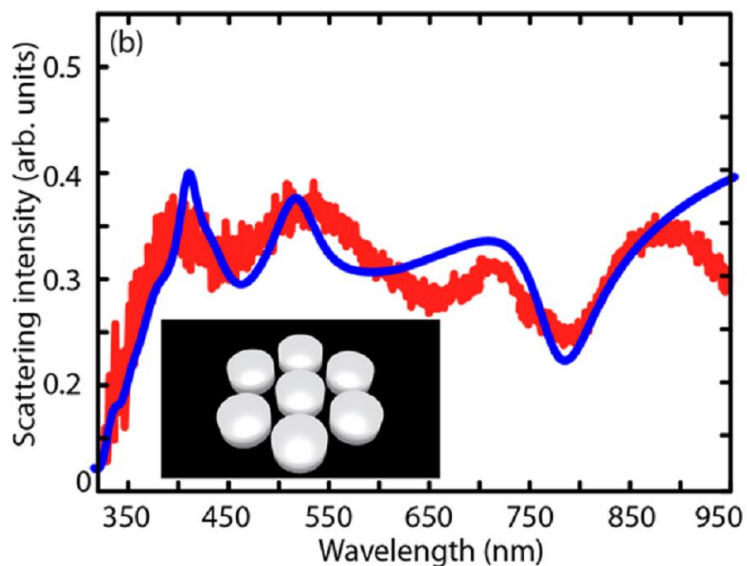


Рисунок 6 - Спектр упругого рассеяния. Красная кривая – экспериментальные данные. Синяя кривая – расчетные данные

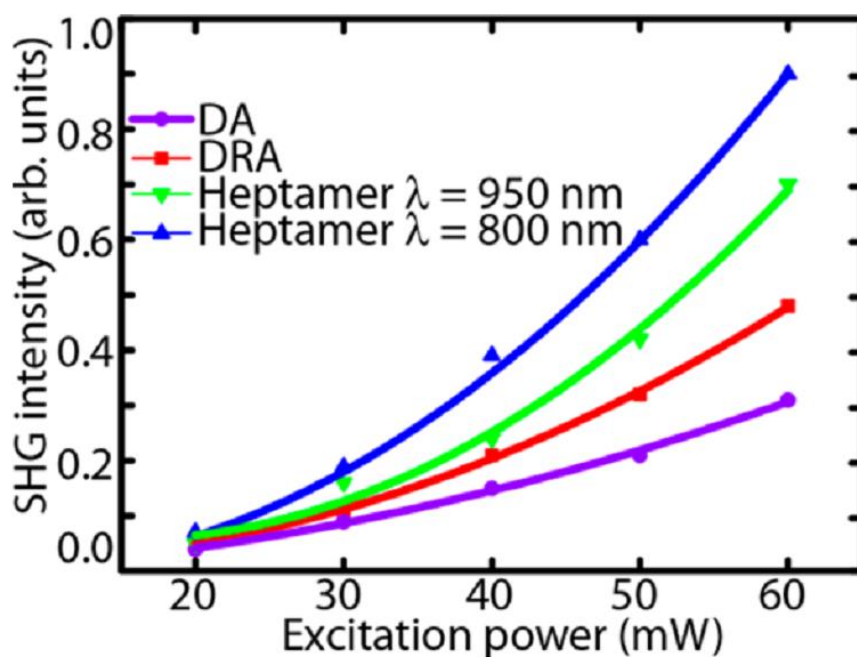


Рисунок 7 - Измеренная интенсивность генерации второй гармоники в зависимости от мощности излучения накачки для структуры из серебряных наночастиц в случае резонанса Фано (800 нм.), в отсутствии резонанса Фано (950 нм.), дипольной антенны (DA) и антенны с двойным резонансом (DRA)

В работе также проводится сравнение интенсивности генерации второй гармоники между вышеописанной структурой, а также между дипольной наноантенной и наноантенной обладающей двойным резонансом, которые подробно исследуются в работе [6]. Наноантенна – это устройство способное как эффективно преобразовывать падающий свет (излучение оптических частот) в сильно локализованное поле, так и преобразовывать сильно локализованное поле оптических частот, созданное некоторым источником, в световое излучение. [7]. Подробнее о них будет сказано ниже. Для данного сравнения Фано-резонансной структуры с более традиционными плазмонными наноструктурами были проведены измерения генерации второй гармоники для трех типов плазмонных наноструктур: гептомера (как в резонансном режиме – 800 нм., так и в нерезонансном режиме – 950 нм.), дипольной антенны (DA) и антенны с двойным резонансом (DRA). DA и DRA сделаны из алюминия. DA, DRA, а также гептомер в резонансном режиме возбуждались излучением с длиной волны равной 800 нм., нерезонансный гептомер возбуждался излучением с длиной волны 950 нм. Полученные измерения представлены на Рисунке 7.

DA - одна из наиболее основных плазмонных структур, изученных для ГВГ. Она может резонировать только на одной длине волны, либо на фундаментальной, либо на длине волны второй гармоники. DRA имеет резонанс как на основной частоте, так и на частоте второй гармониках, что создает приводит к большему усилению генерации второй гармоники, чем в DA. Данное улучшение связано с дополнительным резонансом на длине волны второй гармоники. Серебряный гептомер имеет больше зазоров, где поле усиливается и, следовательно, даже нерезонансный гептомер в 2,7 раза сильнее генерирует вторую гармонику по сравнению с DA. При резонансном возбуждении гептомера, вторая гармоника увеличивается в 3 раза по сравнению со стандартным DA.

Как было сказано выше, для генерации второй гармоники на наномасштабе используются и массивы, состоящие из металлических наночастиц. Одна из таких систем рассмотрена в работе [6], где показана генерация второй гармоники массивом, который состоит из золотых наночастиц L-образной формы. Рассматриваемая структура на Рисунке 8. Длина и ширина плеча наночастиц составляет 250 и 100 нм соответственно. Толщина наночастиц равна 20 нм. Период - 500 нм вдоль направлений  $u$  и  $v$ .

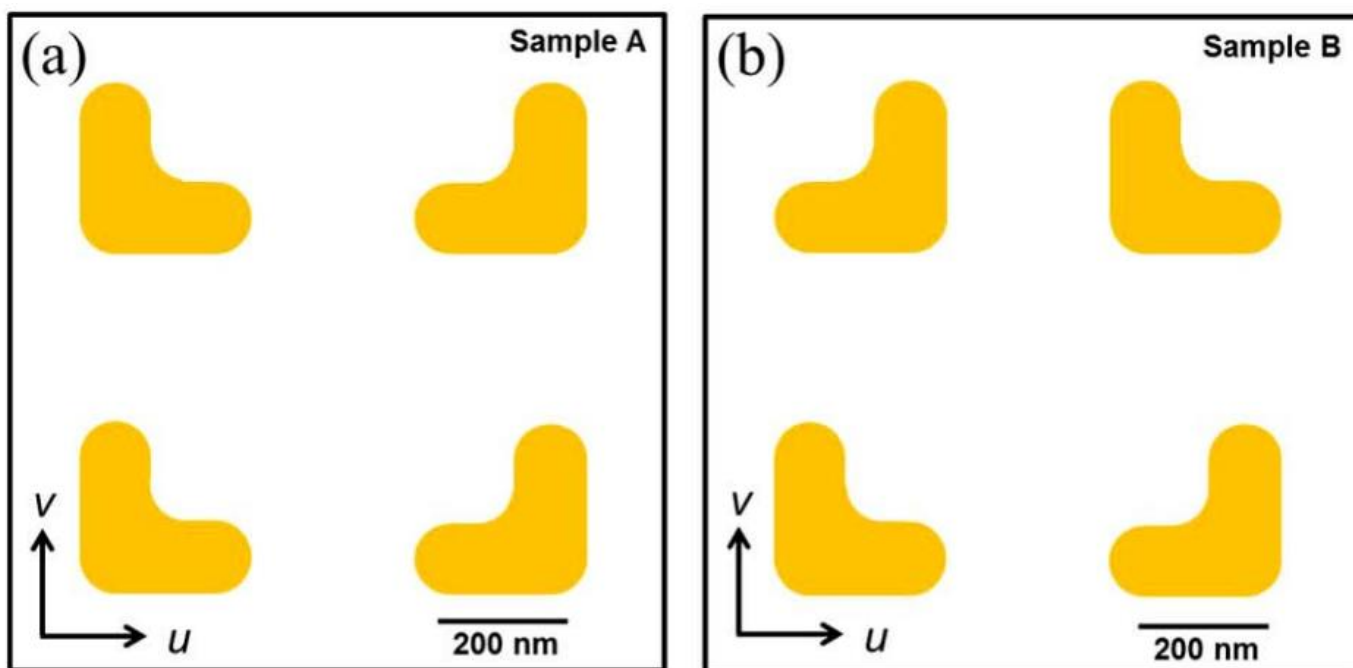


Рисунок 8 – Геометрия структуры для генерации второй гармоники. (a) – образец А, (b) – образец В

Нелинейный отклик данного массива золотых наночастиц сильно зависит от упорядочивания, составляющих его элементов. Эта зависимость объясняется поляризационно-зависимыми плазмонными резонансами, которые изменяются дальнедействующей связью. Авторы работы сравнили нелинейный оптический отклик второго порядка двух образцов с незначительными изменениями в организациях наночастиц. На Рисунке 9 показана расчетная интенсивность второй гармоники для образцов А и В.

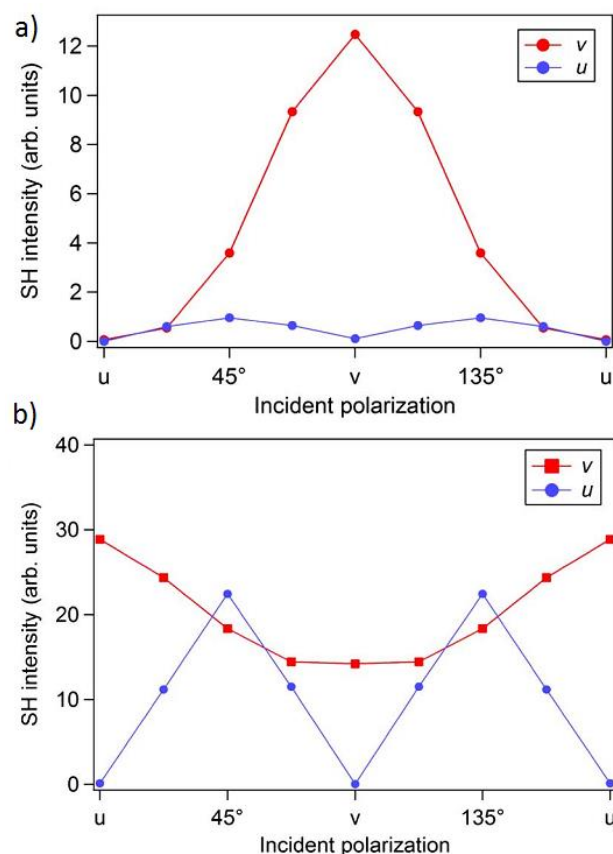


Рисунок 9 - Расчетная интенсивность второй гармоники как функции падающей поляризации а) для образца А и б) для образца В. Красные кривые - сигнал второй гармоники поляризован вдоль вектора  $v$ , синие кривые - сигнал второй гармоники поляризован вдоль вектора  $u$

Ранее была рассмотрена работа, в которой усиление генерации второй гармоники достигалось за счет Фано резонанса. Выше уже было введено понятие наноантенны. Использование данных устройств является эффективным подходом для усиления нелинейность второго порядка. Как уже было сказано выше, наноантенна – это устройство способное как эффективно преобразовывать падающий свет (излучение оптических частот) в сильно локализованное поле, так и преобразовывать сильно локализованное поле оптических частот, созданное некоторым источником, в световое излучение [7]. Под сильно локализованным полем подразумевается электромагнитное поле, сконцентрированное в области малого по сравнению с длиной волны размера. Такие поля имеют пространственный спектр, который не содержит однородно плоских волн, а



состоит из суперпозиции эванесцентных волн. Область, в которой сконцентрировано сильно локализованное поле, может быть субволновым во всех трех измерениях. В этом случае говорят о сильно локализованном ближнем поле, причём энергия такого поля является запасённой и не распространяется. Однако важным частным случаем наноантенн является устройство, которое преобразует световое излучение в волноводные моды так называемых плазмонных нановолноводов (или наоборот). При этом субволновой размер имеет поперечное сечение области сильно локализованного поля. Продольный размер этой области — вдоль оси волновода — может быть оптически большим. В этом случае электромагнитная энергия сильно локализованного поля является распространяющейся.

Для передающей наноантенны источниками излучения, являются объекты, размер которых крайне мал по сравнению с длиной излучаемой ими волны. Эти источники называются эмиттерами. Ввиду крайне малого оптического размера такие эмиттеры излучают весьма неэффективно и не могут быть отнесены к наноантеннам. Наноантенна располагается вблизи эмиттера, возбуждается его сильно локализованным полем и излучает электромагнитное поле. В итоге применение наноантенны позволяет существенно (иногда на несколько порядков) увеличить мощность излучения эмиттера [8-10]. С этой точки зрения передающая наноантенна — это устройство, которое призвано отбирать энергию у эмиттера и переводить её в излучение достаточной мощности. С другой стороны, передающая наноантенна, как и её классический аналог, должна перераспределять электромагнитную энергию в пространстве.

Те же замечания относятся к приёмной наноантенне, предназначенной для эффективного возбуждения каких-либо детекторов излучения и иных систем, которые, будучи малыми по сравнению с длиной волны, потребляют из падающего на них излучения очень малую мощность. Создавая в области детектора сильно локализованное поле, наноантенна способствует существенному росту детектируемой мощности.

Согласно теореме взаимности [11-16], любая наноантенна может работать как в режиме приёма, так и в режиме передачи. На Рисунке 10а схематически изображён вариант взаимодействия наноантенны и ближнего поля некоторого эмиттера. В этом случае она преобразует ближнее поле эмиттера в свободно распространяющееся оптическое излучение. Другими словами, это передающая наноантенна. На Рисунке 10в изображён случай, когда наноантенна работает на приём. Здесь на неё падает излучение, которое преобразуется в сильно локализованное ближнее поле.

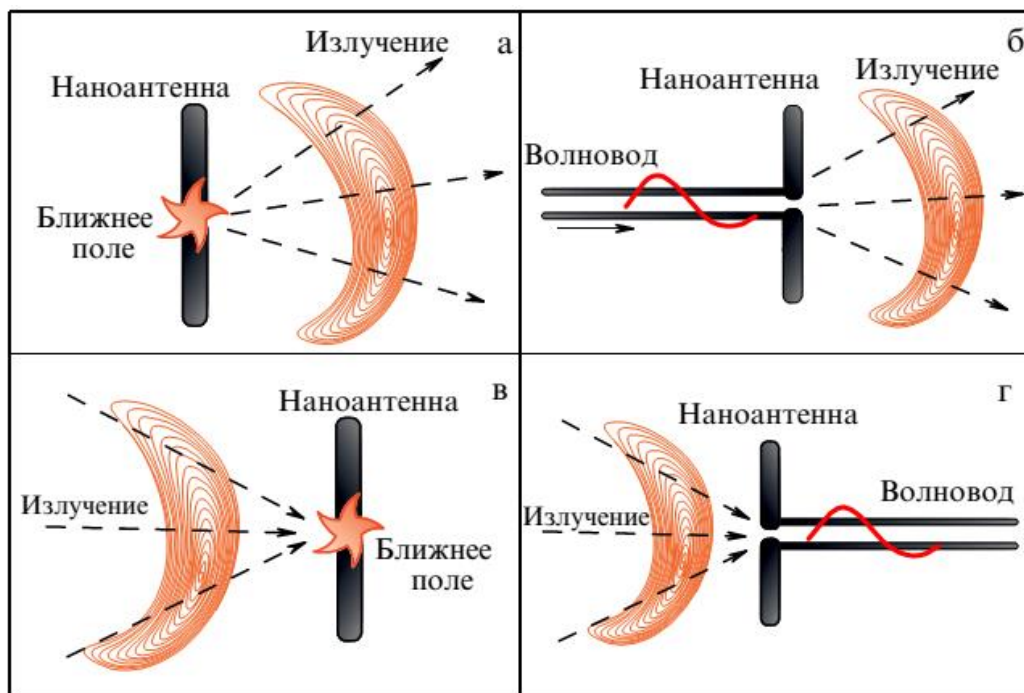


Рисунок 10 - Основные виды использования наноантенны (на примере дипольной). Преобразование ближнего поля (а) или волноводной моды (б) в свободно распространяющееся оптическое излучение; (в, г) режим приёма

Данный подход также примечателен ещё и тем, что позволяет осуществить, так называемый, би-резонансный подход. Суть данного подхода заключается в том, что система генерирующая вторую гармонику имеет резонанс как фундаментальной частоте, так и на частоте излучения второй гармоники. Одновременная использование наноантенн и би-резонансного подхода в одной структуре для генерации второй гармоники было исследовано, например, в работе

[17]. Авторы представили новую геометрию плазмонной антенны - двойную резонансную антенну (DRA), которая оптимизирована для генерации второй гармоники. Данная структура основана на двух зазорах, связанных друг с другом, так что получается резонанс на фундаментальной и удвоенной частоте. Кроме того, близость локализованных горячих точек позволяет сочетать и пространственное перекрытие между двумя полями на обеих частотах. Используя такую структуру, генерация второй гармоники, значительно увеличивается по сравнению со стандартной плазмонной дипольной антенной (DA). Данная структура с двойным резонансом была изготовлена из алюминия с использованием электронно-лучевой литографии. Алюминиевые структуры были расположены на стеклянной подложке. Спектры усиления поля в зазорах наноантенн а также геометрия обеих структур изображена Рисунке 11.

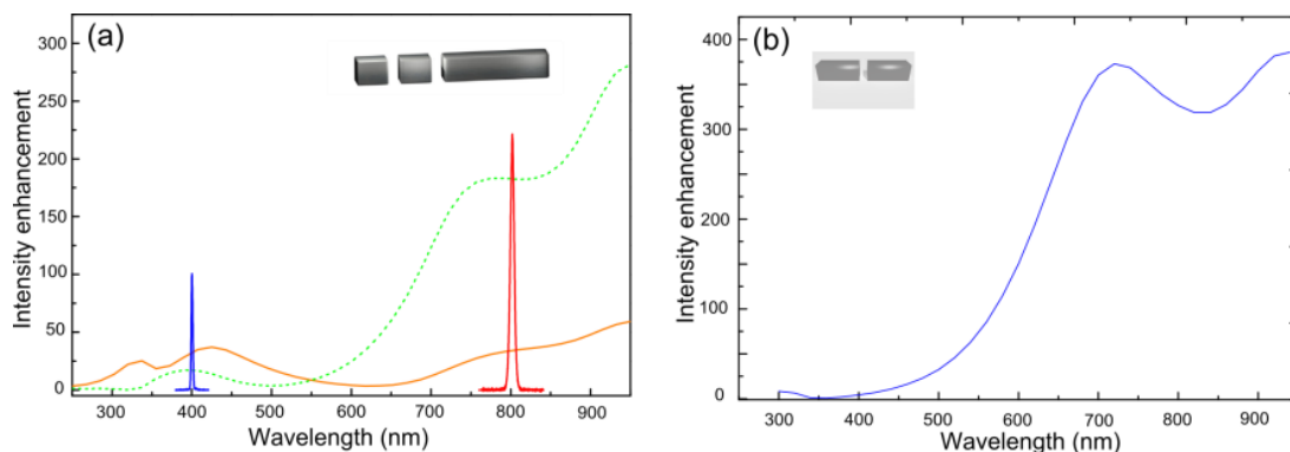


Рисунок 11 - Спектры усиления поля в зазорах наноантенн. а) Усиление интенсивности полей рассчитывается в центре обоих зазоров (левый зазор: сплошная оранжевая линия, правый зазор: пунктирная зеленая линия) для оптимизированной DRA ( $50 \times 50 \times 170 \text{ nm}^3$ ). Синий и красный пики показывают спектры для фундаментальной частоты и частоты второй гармоники; б) усиление интенсивности поля в зазоре в дипольной антенне. На вставках показаны используемые геометрии

Измеренные спектры упругого рассеяния (Рисунок 12а)) показывают наличие одного ( в области 800 нм., что соответствует длине волны накачки) и

двух резонансов ( в области 400 нм. и 800 нм., что соответствует длине волны второй гармоники и накачки, соответственно ) для дипольной антенны и антенны с двойным резонансом, соответственно. Экспериментально полученная зависимость интенсивности генерации второй гармоники от мощности излучения накачки (Рисунок 12b)) явно демонстрирует усиление ГВГ в структуре с двойным резонансом.

Таким образом, авторам работы удалось экспериментально и теоретически исследовать предложенную новую плазмонную наноантенну с резонансом как на частоте излучения накачки, так и частоте второй гармоники так, что дипольная мода, возбуждаемая на частоте второй гармоники, очень эффективно излучает. Благодаря связи между дипольными резонансами в обеих плечах на двух длинах волн наблюдается заметное усиление ГВГ по сравнению с дипольной антенной, которая имеет лишь резонанс на фундаментальной частоте. Интенсивность второй гармоники, полученная из новой предложенной структуры с двойным резонансом в два раза сильнее, чем для дипольной антенны. Это скромное улучшение может быть связано с трудностями изготовления структур из алюминия.

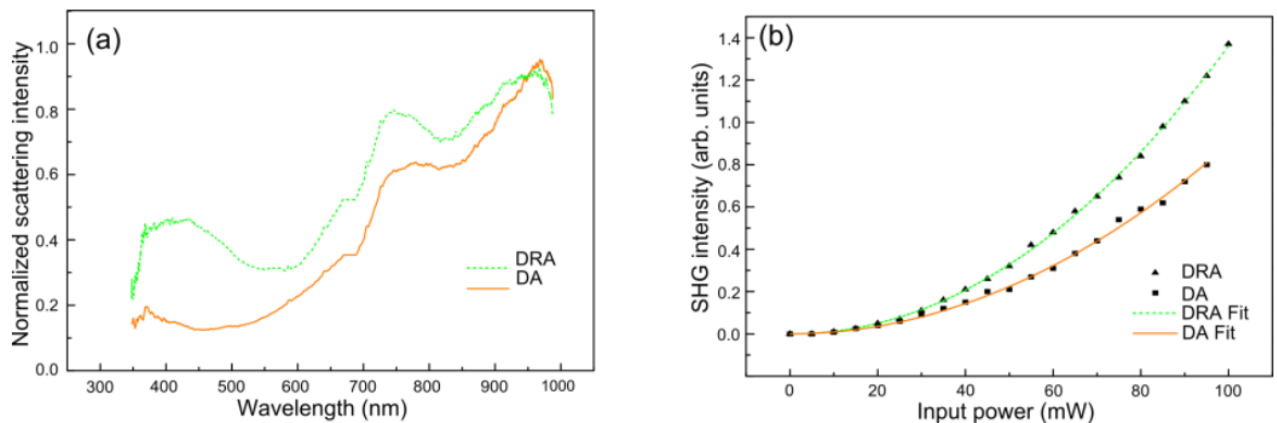


Рисунок 12 - а) Спектры рассеяния стандартной дипольной антенны (DA) и двойной резонансной антенны (DRA). Двойная структура показывает явное усиление рассеяния в области  $\lambda = 400$  нм, обе структуры выполнены из алюминия; (б) сравнение экспериментального сигнала второй гармоники

Данный подход показал свою эффективность и в другой работе [18]. В ней авторы теоретически и экспериментально исследовали гибридную структуру, которая состоит из двух нанополосных антенн с зазором, которые расположены перпендикулярно друг относительно друга, при этом в зазор помещена нелинейная диэлектрическая наночастица (Рисунок - 13). В данной системе одна нанополосная антенна обладает резонансом на частоте излучения накачки, другая нанополосная антенна обладает резонансом на частоте второй гармоники. На Рисунке – 14 приведено изображение данной структуры, полученной сканирующим электронным микроскопом.

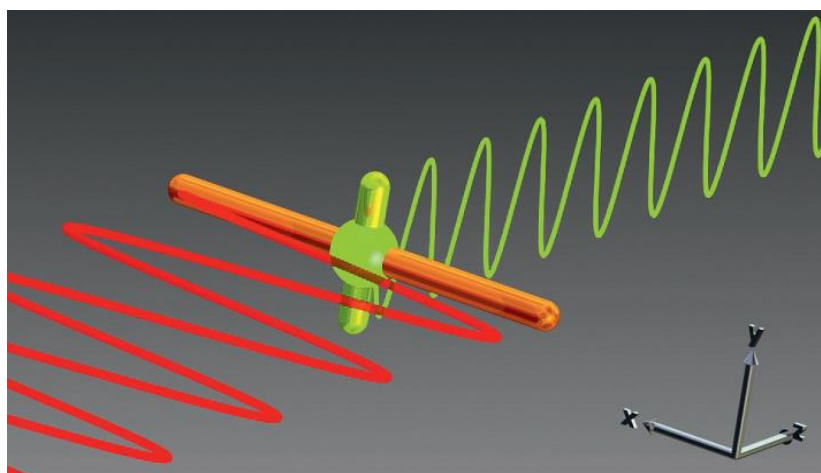


Рисунок 13 - Схематичное представление исследуемой гибридной структуры с двойным резонансом

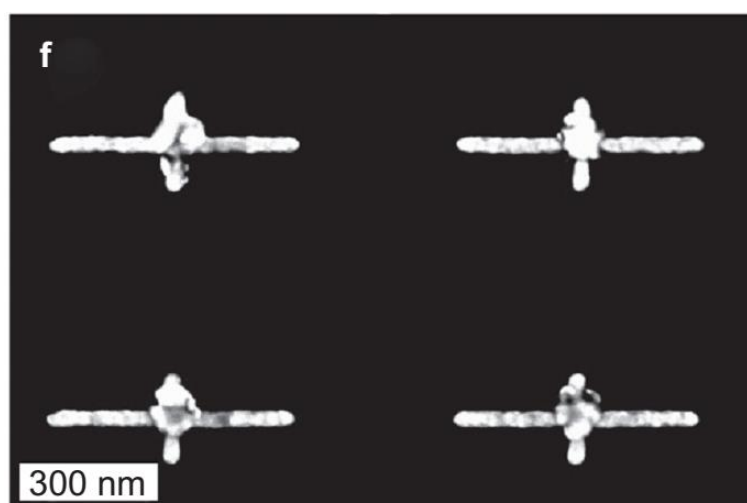


Рисунок 14 - Изображение исследуемой структуры, полученной сканирующим электронным микроскопом

Использование двух наноантен с резонансом как на фундаментальной частоте, так и на частоте второй гармоники в вышеописанной гибридной структуре позволяет добиться трехкратного усиления генерации второй гармоники по сравнению с гибридной системой, обладающей резонансом только на фундаментальной частоте. Данное усиление можно увидеть на экспериментально полученных спектрах интенсивности второй гармоники (Рисунок 15). На данном рисунке приведены спектры ГВГ для системы с резонансом только на фундаментальной частоте (красные точки) и для системы с двойным резонансом (зеленые точки).

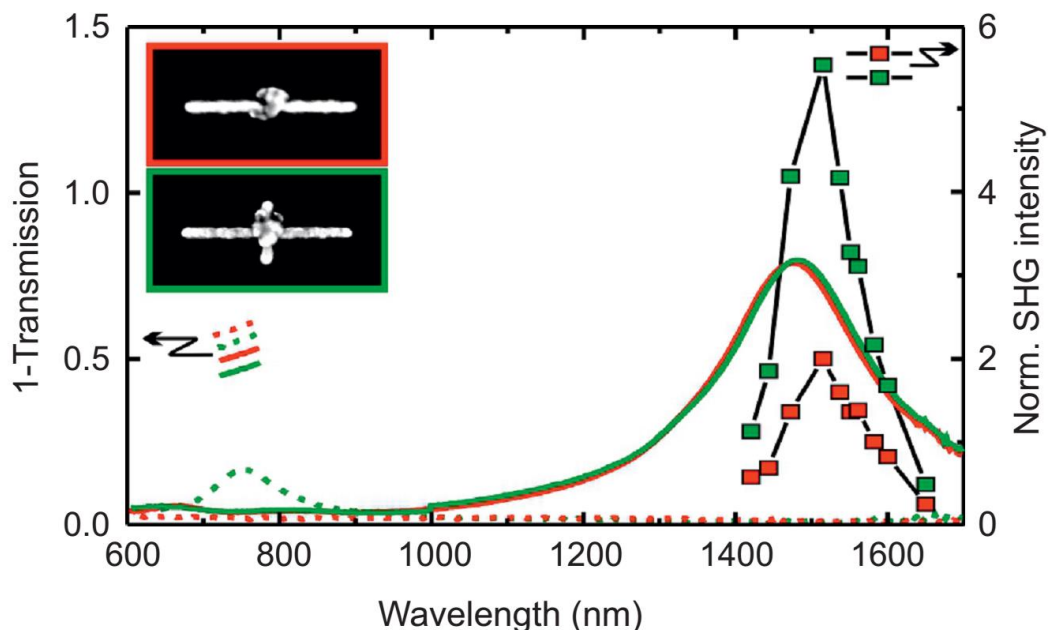


Рисунок 15 - Спектры оптической экстинкции в случае нормального падения излучения накачки для х-поляризации (левая ось, сплошные линии) и у-поляризации (левая ось, пунктирные линии) и интенсивности ГВГ (правая ось, связанные точки данных) для массива наноантен с одним (красные точки) и массива наноантен с двойным резонансом (зеленые точки)

Из приведенных выше работы видно, что использование наноантен и би-резонансного подхода весьма эффективно для усиления генерации второй гармоники в наноразмерных плазмонных структурах. Однако, плазмонные структуры обладают двумя большими недостатками. Первый из них заключается в высоком уровне диссипативных потерь. Второй недостаток состоит в

отсутствии собственной нелинейности второго порядка из-за centrosymmetricной структуры металлов, вследствие чего генерация второй гармоники происходит лишь на поверхности структур, а это в свою очередь не позволяет достичь высокого уровня интенсивности нелинейного отклика второго порядка. Для того, чтобы обойти данные недостатки возможно использование диэлектрических систем, обладающих нецентросимметричной структурой. Они обладают низким уровнем диссипативных потерь, имеют сильную собственную нелинейность второго порядка, в них возможно существование резонансов Ми, которые способны усилить генерацию второй гармоники, а также реализация магнитного отклика. Помимо этого, в диэлектрических системах также возможно применение наноантенного принципа для усиления генерации второй гармоники.

В работе [19] авторы исследовали усиление генерации второй гармоники, используя только собственные резонансные свойства диэлектрической наночастицы титаната бария. Продемонстрированы Ми резонансы отдельных наночастиц титаната бария с диаметрами от 200 нм до 250 нм. Были исследованы их линейные и нелинейные свойства в широком диапазоне длин волн. Используя аналитическую теорию Ми сферической наночастицы титаната бария соответствующих размеров, авторам работы удалось однозначно идентифицировать два пика в спектре как магнитный квадруполь и магнитный диполь. Частицы титаната бария были получены гидротермальным процессом способом. Измерения с помощью рентгеновской дифракции показывают, что наночастицы титаната бария имели 90% тетрагональную кристаллографическую структуру. Линейные и нелинейные спектры рассеяния приведены на Рисунке 16. На Рисунке 16е произведено сравнение генерации второй гармоники излучаемой третьей наночастицей, и объемным кристаллом титаната бария на резонансной длине волны 385 нм. Видно, что уровень сигнала второй гармоники от резонансной наночастицы на 4 порядка превосходит уровень сигнала второй гармоники от объемного кристалла. Таким образом, использование Ми резонансов является эффективным способом усиления генерации второй гармоники в диэлектрической резонансной наночастице.

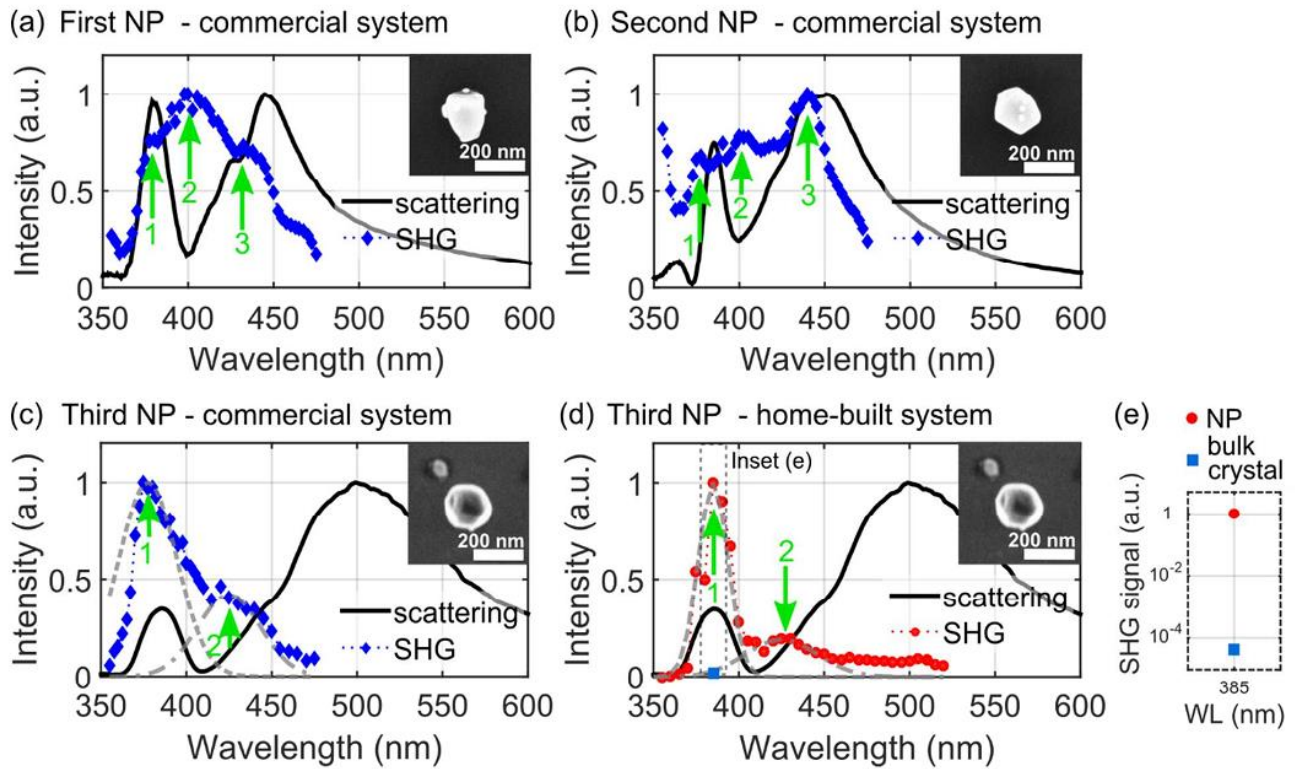


Рисунок 16 - Спектры ГВГ отдельных наночастиц титаната бария. Черная непрерывная линия представляет собой нормированный линейный спектр обратного рассеяния наночастиц. Синие точки (а-с) / красные точки (d) представляют собой нормированные значения сигнала ГВГ для одной и той же наночастицы. На вставках показаны изображения наночастиц, полученные сканирующим электронным микроскопом. Пронумерованные зеленые стрелки выделяют положения пиков в спектре ГВГ. (e) Сравнение ГВГ, излучаемого третьей наночастицей, и объемным кристаллом титаната бария на резонансной длине волны 385 нм



## 2 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрение вышеприведенных работ показывает, что использование наноантенного принципа и би-резонансного подхода в плазмонных структурах является довольно эффективным способом для усиления генерации второй гармоники в наноразмерных системах. Однако, данные структуры обладают двумя серьезными недостатками, такими как большие диссипативные потери и отсутствие собственной объемной нелинейности металлов.

Использование резонансных диэлектрических систем с нецентросимметричной структурой позволяет обойти данные трудности. Анализ научной литературы также показывает, что наноантенный принцип и би-резонансный подход, на сегодняшний день, не был реализован в диэлектрических наносистемах для усиления генерации второй гармоники. В следствии этого, целью данной работы является усиление генерации второй гармоники в би-резонансном диэлектрической системе. В рамках работы рассматривается димерная наноантенна, состоящая из двух сферических наночастиц. Данная геометрия наноантенны с одной стороны позволяет независимо управлять положением резонансов системы, а с другой является хорошо изученной в литературе с точки зрения свойств линейного рассеяния

В качестве материалов выбраны кремний и титанат бария, как типичные диэлектрические материалы с высоким показателем преломления, а также большой собственной нелинейностью титаната бария. Кремний имеет низкие потери в оптической области спектра. Помимо этого, сферические наночастицы кремния обладают высоким показателем преломления и при размерах в 100-200 нм., их младшие Ми резонансы находятся в оптической области частот. Наночастица кремния показала свою применимость в качестве наноантенны [7] и поэтому используется для усиления поля в наночастице титаната бария.

Титанат бария выбран в качестве одного из материалов, так как он имеет нецентросимметричную структуру и как следствие обладает сильной собственной нелинейностью второго порядка. Сферические наночастицы титаната бария так

же удобны тем, что при размерах порядка 100 нм., их младшие Ми резонансы находятся в области оптических частот.

**Целью этой работы** является теоретическое исследование димерной наноплазмонной антенны на основе кремния и титаната бария, а также определение параметров нанодимера, при которых будет достигаться максимальная эффективность генерации второй гармоники. Для достижения этой цели, поставлены следующие задачи:

1) Анализ упругого рассеяния и подбор размеров частиц входящих в нанодимер.

2) Моделирование спектральной зависимости генерации второй гармоники нанодимером в случае ТЕ/ТМ поляризации излучения накачки.

3) Оценка усиления генерации второй гармоники в нанодимере.

В рамках наших исследований, мы предполагаем, что нанодимер располагается на стеклянной подложке. Он облучается электромагнитной волной (излучение накачки) падающей под нулевым градусом относительно нормали к плоскости подложки. Рассматривается как ТЕ, так и ТМ поляризация падающего излучения. Описанная геометрия показана на Рисунке 17.

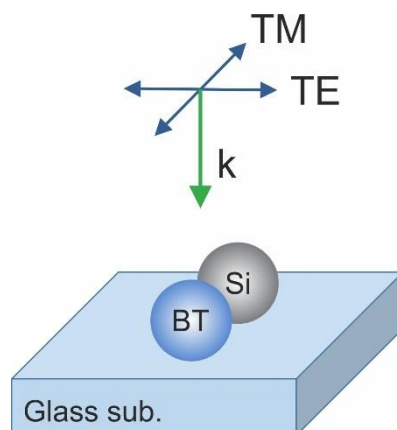


Рисунок 17 - Выбранная геометрия для исследуемого нанодимера

### **3 РЕАЛИЗАЦИЯ НАНОАНТЕННОГО И БИ-РЕЗОНАНСНОГО ПОДХОДА**

#### **3.1 Анализ диполь-дипольной генерации второй гармоники в нанодимере**

##### **3.1.1 Анализ упругого рассеяния и подбор размеров частиц входящих в нанодимер**

В данной работе усиление генерации второй гармоники выбрано в области 600 нм. Поскольку для реализации би-резонансного подхода система должна иметь резонанс как на фундаментальной частоте, так и на частоте второй гармоники, то резонанс наночастицы титаната бария предполагается настроить на частоту второй гармоники, так как обладает собственной нелинейностью второго порядка, а наночастица кремния будет настроена на частоту накачки, поскольку она используется в качестве принимающей наноантенны.

Сферическая наночастица титаната бария имеет магнитный дипольный и магнитный квадрупольный резонанс, поэтому представляет интерес проанализировать два случая: 1) когда магнитный дипольный резонанс попадает в область 600 нм., 2) когда магнитный квадрупольный резонанс попадает в область 600 нм. Исходя из этого размеры наночастицы титаната бария будут выбраны так, чтобы её магнитный дипольный и квадрупольный резонанс попадали в область 600 нм. Как было уже сказано выше, наночастица кремния работает как наноантенна и служит для усиления электромагнитных полей внутри наночастицы титаната бария. Поскольку генерация второй гармоники будет происходить на магнитных резонансах, то в качестве резонанса на длине волны накачки важно выбрать именно магнитный дипольный резонанс, поскольку в таком случае взаимодействие наночастиц будет наиболее эффективным. Исходя из сказанного, следует, что размер наночастицы кремния следует выбрать так, чтобы её магнитный дипольный резонанс попадал в область 1200 нм. Таким образом, в данной работе в первом случае анализируется диполь-дипольная генерация второй гармоники, а во втором случае диполь-квадрупольная генерация второй гармоники в нанодимере.

На основе численных расчетов, с учетом всего вышесказанного, в первом случае размер титаната бария оказался равен 240 нм, в то время как размер кремния составляет 330 нм. Соответствующие спектры упругого рассеяния изображены на Рисунке 18.

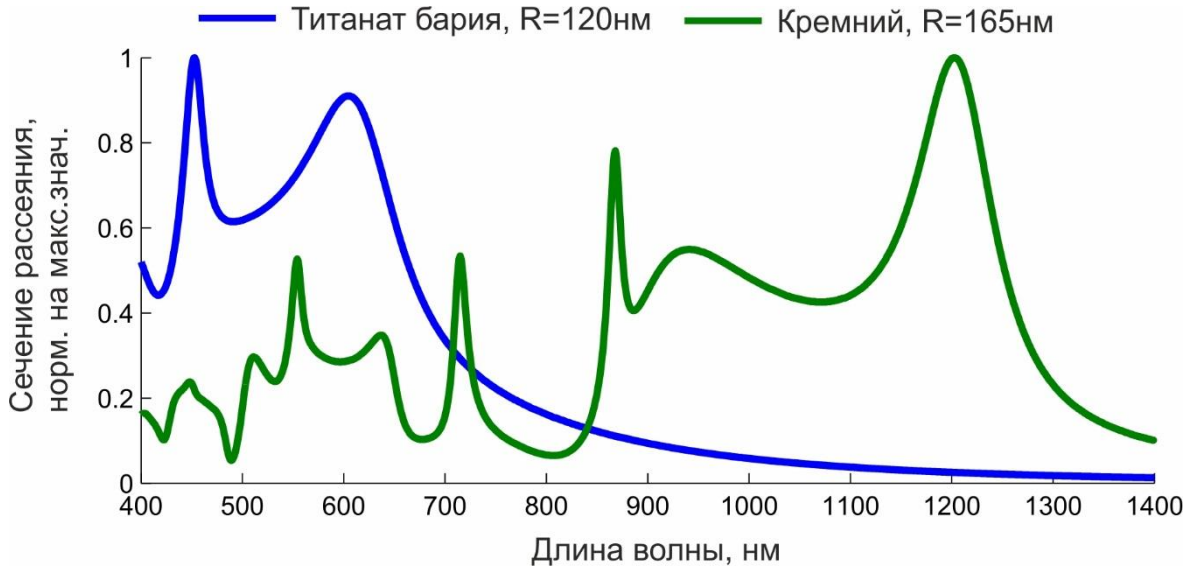


Рисунок 18 - Спектр сечения упругого рассеяния от одиночных наночастиц титаната бария (синяя кривая) и кремния (зеленая кривая)

Зная размеры частиц, составляющих нанодимер, не представляется сложным произвести численное моделирование упругого рассеяния данного нанодимера. Одним из ключевых моментов в усилении генерации второй гармоники является изменение электромагнитной энергии внутри наночастицы титаната бария, находящегося в составе нанодимера. Результаты моделирования позволяют увидеть изменение электромагнитной энергии внутри наночастицы титаната бария в случае присутствия и отсутствия рядом с ней наночастицы кремния, которая используется в качестве nanoantennы (Рисунок 19), моделирование производилось для ТЕ и ТМ поляризации падающего излучения.

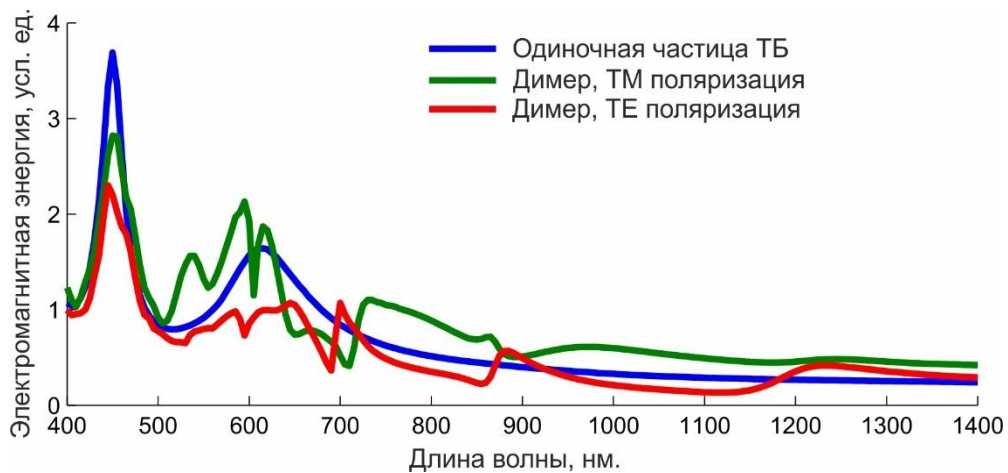


Рисунок 19 - Спектр электромагнитной энергии внутри частицы титаната бария

На приведенном выше рисунке, красная кривая соответствует одиночной частице титаната бария (в отсутствии наномантенны), зеленая и красная кривая соответствует энергии внутри частицы титаната бария, находящегося в составе нанодимера в случае ТМ и ТЕ поляризации падающего излучения, соответственно.

Анализ спектров энергии показывает, что в случае ТМ поляризации падающего излучения удастся достичь усиления энергии электромагнитного поля внутри частицы титаната бария в 1.5 и 2 раза для области длин волн 600 нм. и 1200 нм., соответственно. Таким образом, в данном случае ожидается увидеть усиление генерации второй гармоники. Однако, в случае ТЕ поляризации излучения накачки, в данных областях коэффициент усиления равен меньше единицы. На Рисунке 20 изображено распределение амплитуды магнитного поля для димера (Рисунок 20а) и для одиночной частицы титаната бария (Рисунок 20б) на длине волны магнитного дипольного резонанса. На Рисунке 21 представлено распределение амплитуды электрического поля для димера в случае ТМ (Рисунок 21а) и ТЕ (Рисунок 21б) поляризации падающего излучения на длине волны равной 600 нм. Видно, что в случае ТМ поляризации падающего излучения, происходит более интенсивное усиление поля в зазоре между частицами по сравнению с ТЕ поляризацией, что вызвано более сильным взаимодействием

частиц. Данное поведение характерно для всех подобных случаев с ТМ поляризацией падающего излучения.

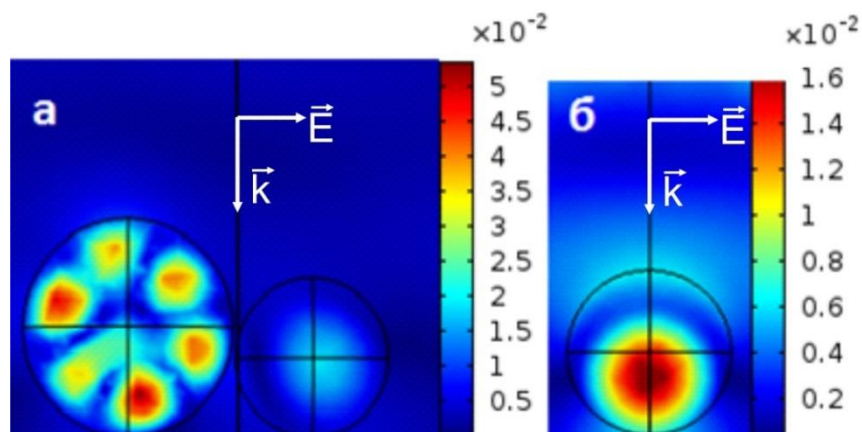


Рисунок 20 - Распределение амплитуды магнитного поля на частоте магнитного дипольного резонанса. а – для нанодимера, б – для одиночной частицы титаната бария

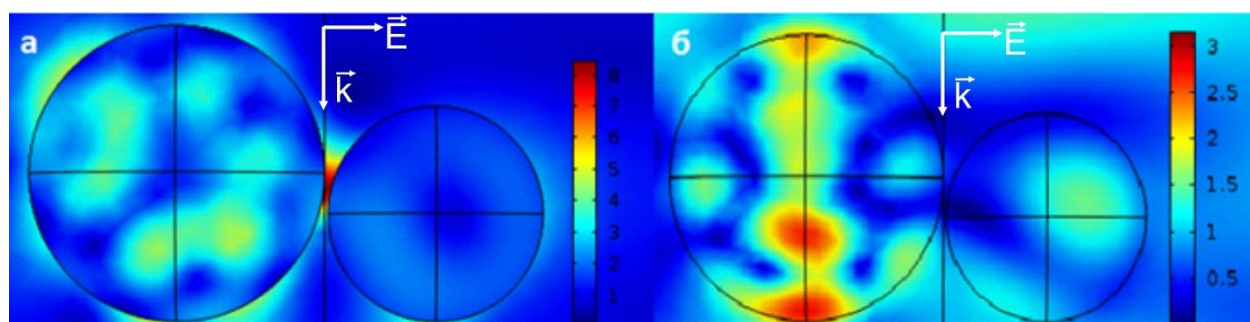


Рисунок 21 - Распределение амплитуды электрического поля на частоте магнитного дипольного резонанса для нанодимера. а – для ТМ поляризации падающего излучения, б – для ТЕ поляризации падающего излучения

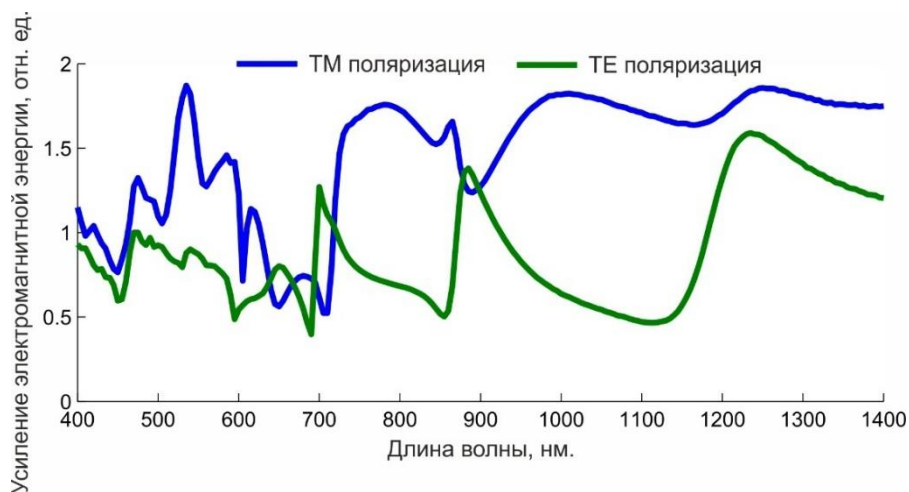


Рисунок 22 - Спектр усиления электромагнитной энергии внутри частицы титаната бария, находящегося в составе нанодимера

### 3.1.2 Моделирование спектральной зависимости генерации второй гармоники нанодимером в случае ТЕ/ТМ поляризации излучения накачки

Как уже было сказано выше, в данной работе рассматривается титанат бария с тетрагональной элементарной ячейкой. В следствии этого, интенсивность генерации второй гармоники будет зависеть не только от поляризации падающего излучения, но и от взаимной ориентации кристалла и вектора поляризации накачки. По этой причине представляет интерес рассмотреть генерацию второй гармоники в двух случаях ориентации элементарной ячейки титаната бария. Данные ориентации схематично приведены на Рисунке 23 и условно называются: вертикальная ориентация и горизонтальная ориентация относительно нормали к поверхности подложки.

Вертикальная ориент.      Горизонтальная ориент.

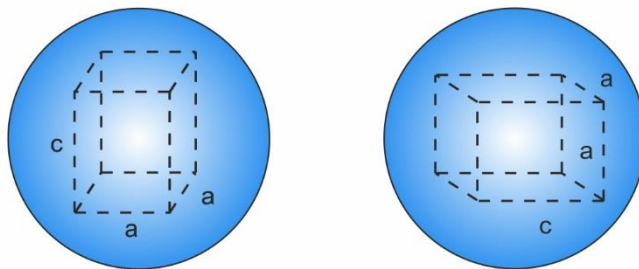


Рисунок 23 - Тетрагональная ячейка наночастицы титаната бария

Проведенное численное моделирование генерации второй гармоники одиночной наночастицей титаната бария, при ТМ поляризации излучения накачки показывает, что в случае горизонтальной ориентации становятся четко выраженными магнитный дипольный (область 600 нм.) и магнитный квадрупольный (область 450 нм.) резонансы (Рисунок 24). На Рисунке 25 изображено распределение амплитуды магнитного поля на частоте магнитного дипольного резонанса при ГВГ для вертикальной (Рисунок 25а) и горизонтальной (Рисунок 25б) ориентации кристалла одиночной частицы титаната бария; поля в частице представлены в двух взаимно перпендикулярных плоскостях. На вышеуказанном рисунке четко виден дипольный характер возбуждаемой моды, а также более интенсивные поля в случае горизонтальной ориентации.

В ходе численного моделирования были получены спектры генерации второй гармоники наночастицей титаната бария, находящейся в составе нанодимера при вертикальной и горизонтальной ориентацией элементарной ячейки для ТМ (Рисунок 26) и ТЕ (Рисунок 28) поляризации излучения накачки для первого случая, когда магнитный дипольный резонанс приходится на область 600 нм.

На Рисунке 26 видно четко выраженный магнитный дипольный резонанс на 600 нм. и магнитный квадрупольный резонанс на 450 нм, как для вертикальной ориентации кристалла (синяя кривая), так и для горизонтальной ориентации (зеленая кривая). Для данного случая на Рисунке 27 изображены распределение амплитуды магнитного поля, для а) – длины волны второй гармоники 450 нм., слева вертикальная ориентация, справа горизонтальная ориентация кристалла, б) – длины волны второй гармоники 600 нм., слева вертикальная ориентация, справа горизонтальная ориентация.

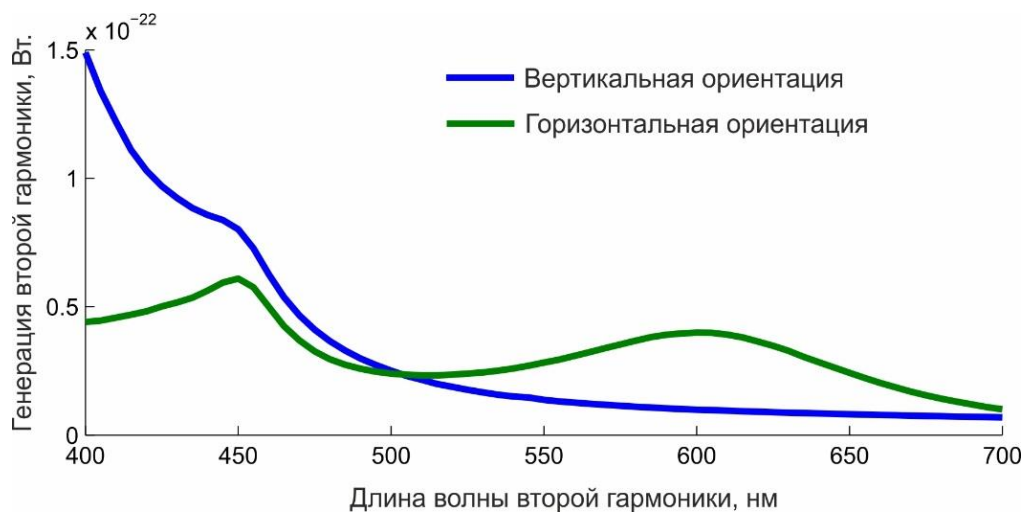


Рисунок 24 - Спектр генерации второй гармоники для одиночной наночастицы титаната бария в случае вертикальной ориентации элементарной ячейки (синяя кривая) и горизонтальной ячейки (зеленая кривая)



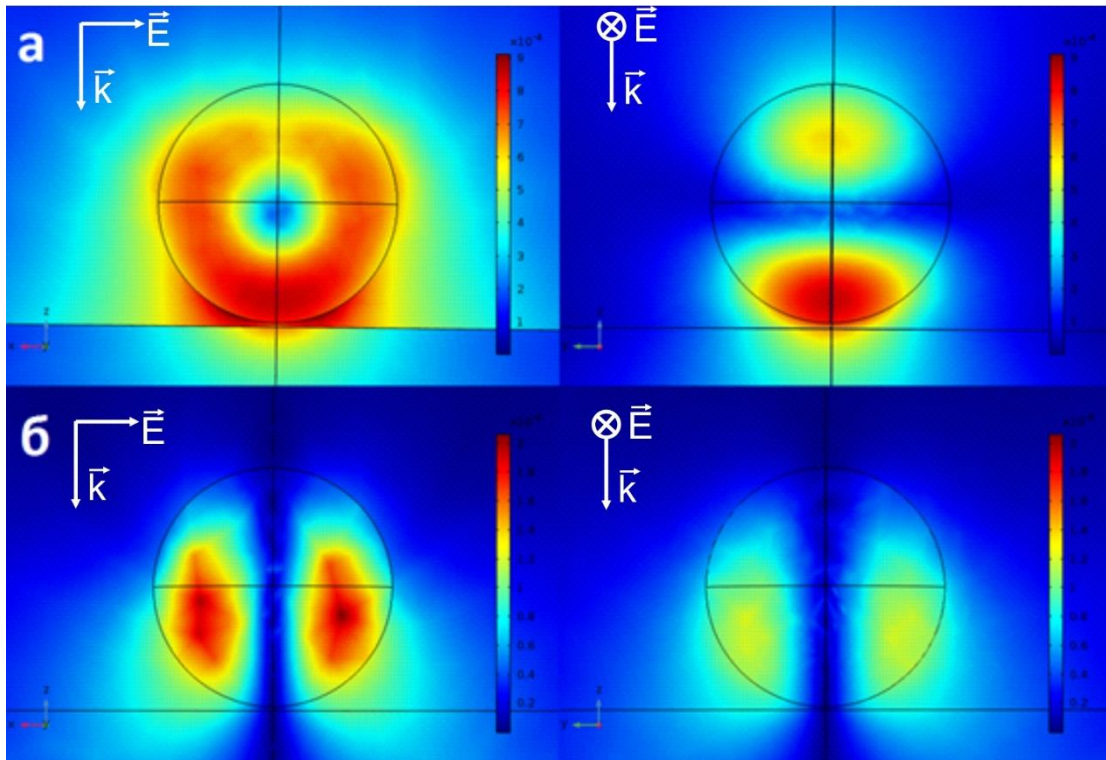


Рисунок 25 - Распределение амплитуды магнитного поля на частоте магнитного дипольного резонанса при ГВГ. а – горизонтальная ориентация (поля показаны в двух взаимно перпендикулярных плоскостях), б – вертикальная ориентация (поля показаны в двух взаимно перпендикулярных плоскостях)

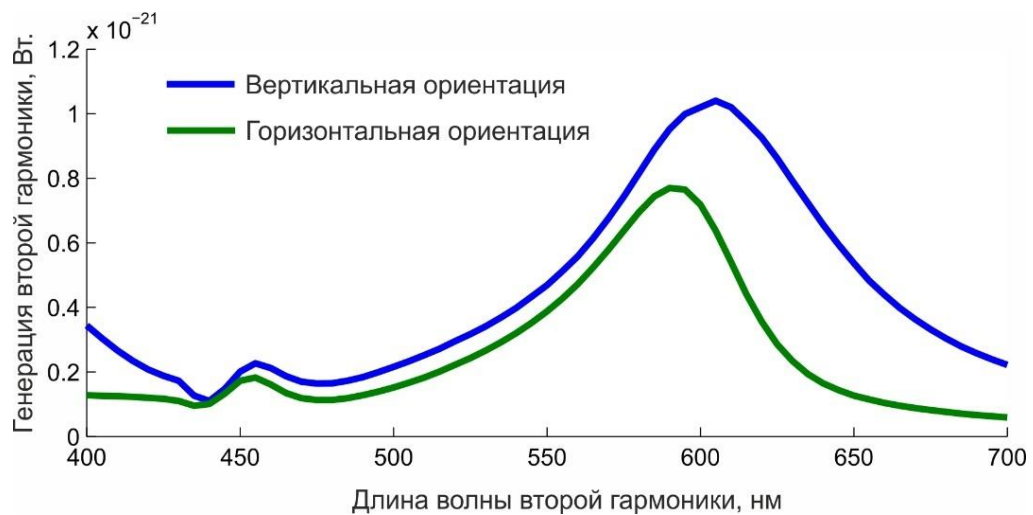


Рисунок 26 - Спектр генерации второй гармоники для наночастицы титаната бария, находящейся в составе нанодимера в случае ТМ поляризации накачки.

Синяя и зеленая кривая соответствует вертикальной и горизонтальной ориентации кристалла, соответственно

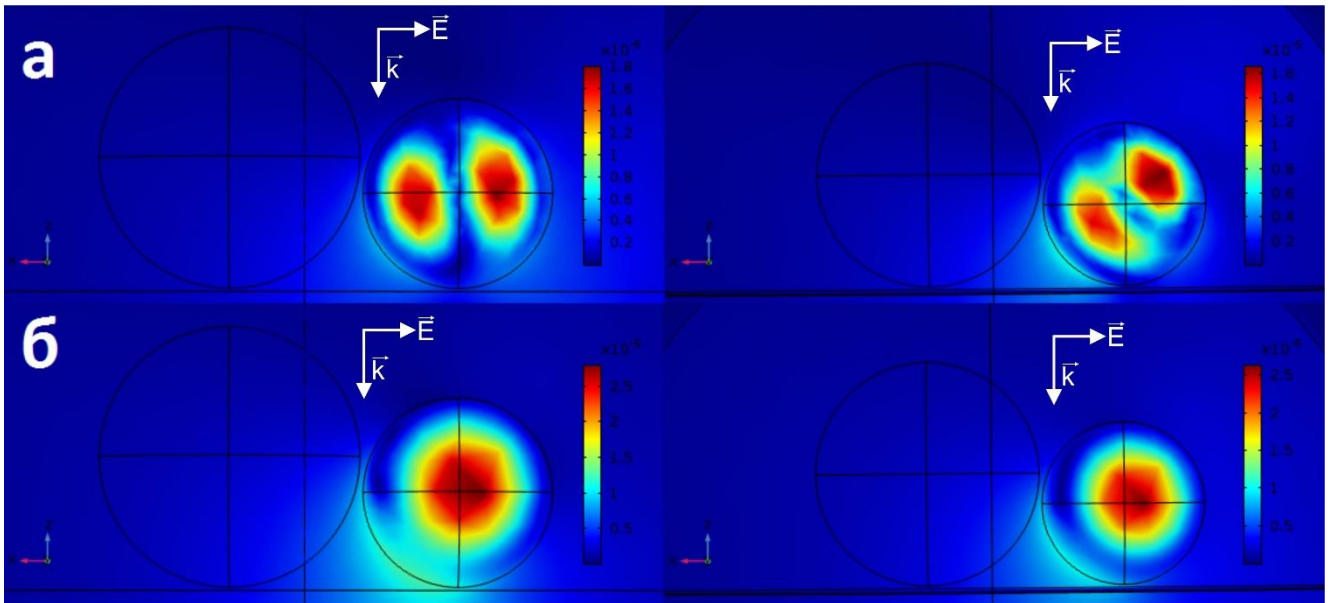


Рисунок 27 - распределение нормы магнитного поля, для а) – длины волны второй гармоники 450 нм., слева вертикальная ориентация, справа горизонтальная ориентация, б) – длины волны второй гармоники 600 нм., слева вертикальная ориентация, справа горизонтальная ориентация

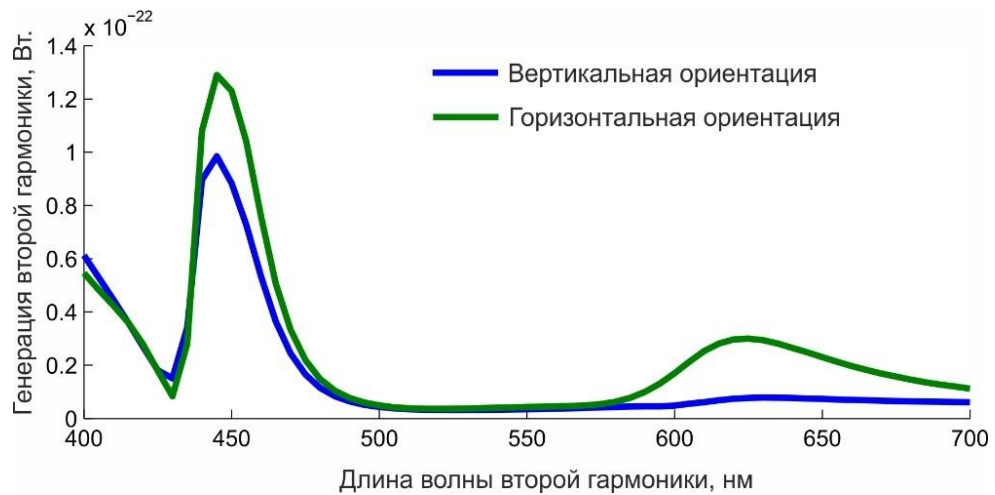


Рисунок 28 - Спектр генерации второй гармоники для наночастицы титаната бария, находящейся в составе нанодимера в случае TE поляризации накачки.

Синяя и зеленая кривая соответствует вертикальной и горизонтальной ориентации кристалла, соответственно

### 3.1.3 Оценка усиления генерации второй гармоники в нанодимере

Полученные в предыдущем разделе спектры генерации второй гармоники имеют ряд характерных особенностей, что является следствием различных условий для генерации второй гармоники при ТМ и ТЕ поляризации излучения накачки, а также различных ориентаций элементарной ячейки титаната бария. Чтобы оценить эффективность использования nanoантенного и би-резонансного подходов для усиления генерации второй гармоники в наночастице титаната бария, необходимо построить спектр усиления генерации второй гармоники для различных условий ее генерации. Спектр усиления второй гармоники для диполь-дипольного взаимодействия наночастиц для ТМ и ТЕ поляризации излучения накачки, а также для вертикальной и горизонтальной ориентации кристалла приведен на Рисунке 29. В случае ТМ поляризации излучения накачки (синие кривые), усиление в области 600 нм. достигается пикового значения равного 109 для вертикальной ориентации кристалла титаната бария (Рисунок 29, сплошная синяя кривая ) и 20 для горизонтальной ориентации (Рисунок 29, пунктирная синяя кривая. В случае ТЕ поляризации излучения накачки, усиление меньше единицы, что свидетельствует об уменьшении нелинейной генерации. С другой стороны, в области квадрупольного магнитного резонанса (область 450 нм.) достигается двукратное усиление генерации второй гармоники при горизонтальной ориентации кристалла (Рисунок 29, пунктирная зеленая кривая.

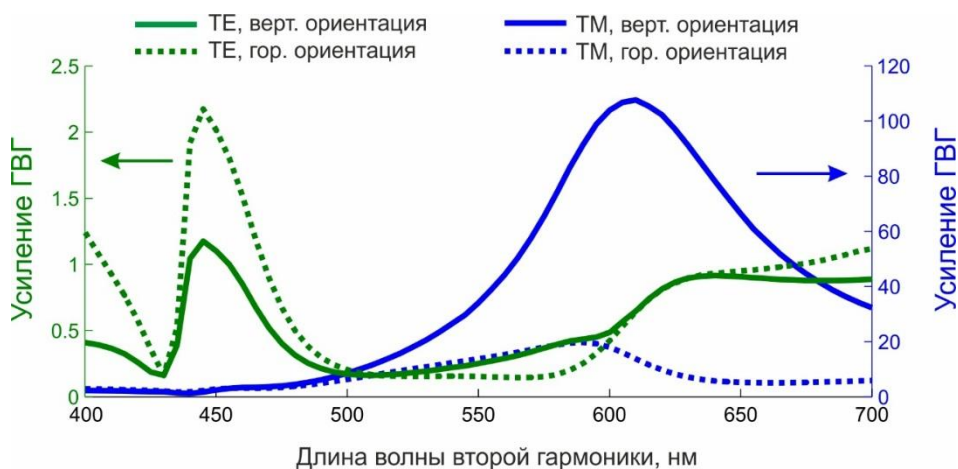


Рисунок 29 - Спектр усиления генерации второй гармоники в нанодимере.

Синие и зеленые кривые относятся к ТМ и ТЕ поляризация излучения накачки,

соответственно, сплошные и пунктирные кривые относятся к вертикальной и горизонтальной ориентации кристалла титаната бария, соответственно

### 3.2 Анализ диполь-квадрупольной генерации второй гармоники в нанодимере

#### 3.2.1 Анализ упругого рассеяния и подбор размеров частиц входящих в нанодимер

Перейдем к второму случаю, а именно когда магнитный квадрупольный резонанс титаната бария попадает в область 600 нм. В таком случае, размер наночастицы титаната бария составляет 330 нм. и равен размеру наночастицы кремния. Соответствующие спектры упругого рассеяния можно видеть на Рисунке 30.

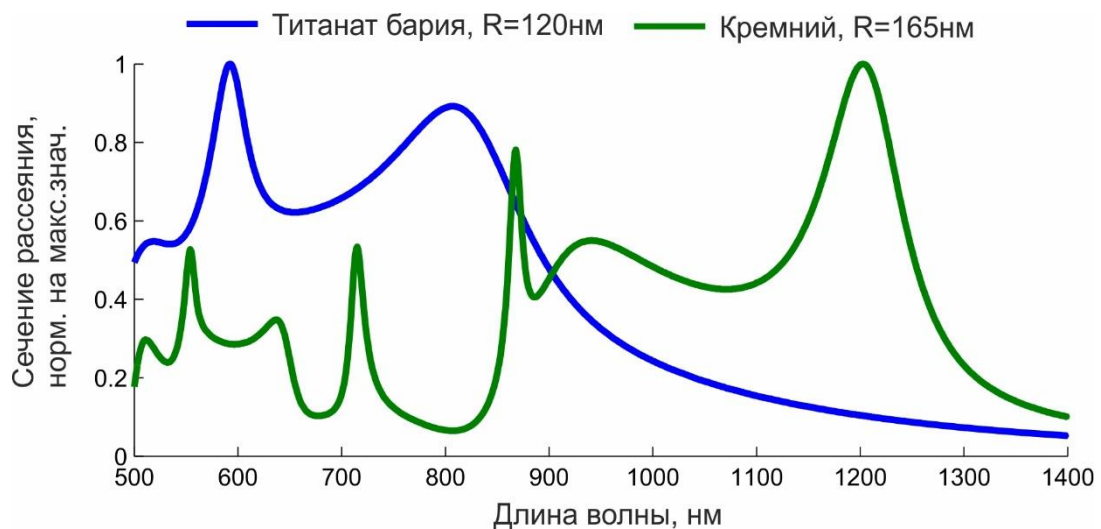


Рисунок 30 - Спектр сечения упругого рассеяния от одиночных наночастиц титаната бария (синяя кривая) и кремния (зеленая кривая)

Зная теперь размеры частиц, составляющих нанодимер, не представляется сложным произвести численное моделирование упругого рассеяния данного нанодимера. Как уже было сказано выше, одним из ключевых моментов для усиления генерации второй гармоники является увеличение электромагнитной энергии внутри наночастицы титаната бария, находящегося в составе нанодимера. Результаты моделирования позволяют увидеть изменение электромагнитной энергии внутри наночастицы титаната бария. На Рисунке 31 изображен спектр

электромагнитной энергии для одиночной наночастицы титаната при ТМ поляризации излучения накачки (Рисунке 31, синяя кривая), наночастицы титаната бария, находящейся в составе нанодимера при ТМ поляризации излучения накачки (Рисунке 31, красная кривая). Результаты численного моделирования показывают, что происходит незначительное усиление электромагнитной энергии титаната бария, а также расщепление в спектре энергии в области 600 нм. при ТЕ поляризации излучения накачки (Рисунок 31, красная кривая).

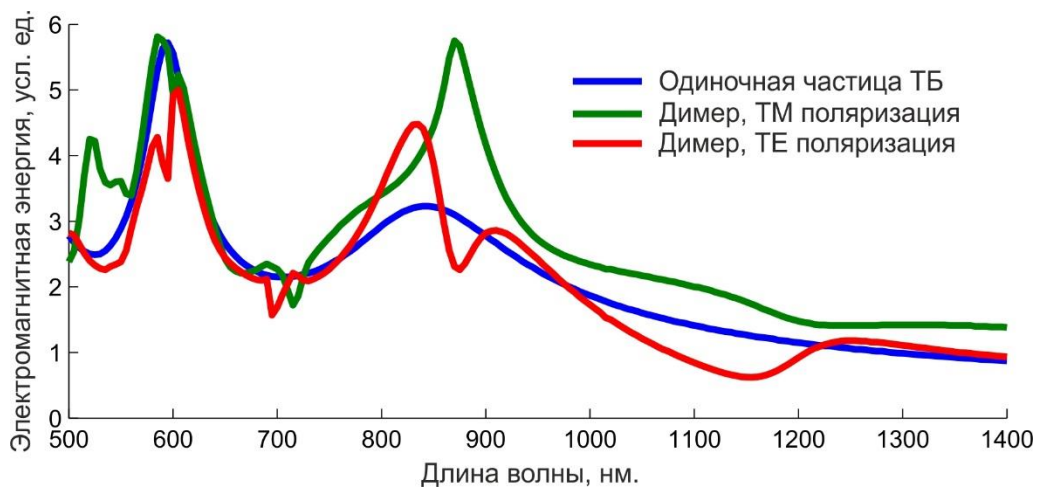


Рисунок 31 - Спектр электромагнитной энергии внутри частицы титаната бария

Соответствующий спектр усиления энергии электромагнитного поля наночастицы титаната бария приведен на Рисунке 32. Видно, что в области 600 нм., происходит незначительное усиление энергии в случае ТМ поляризации накачки; в случае же ТЕ поляризации, в области 600 нм., происходит незначительное ослабление энергии.

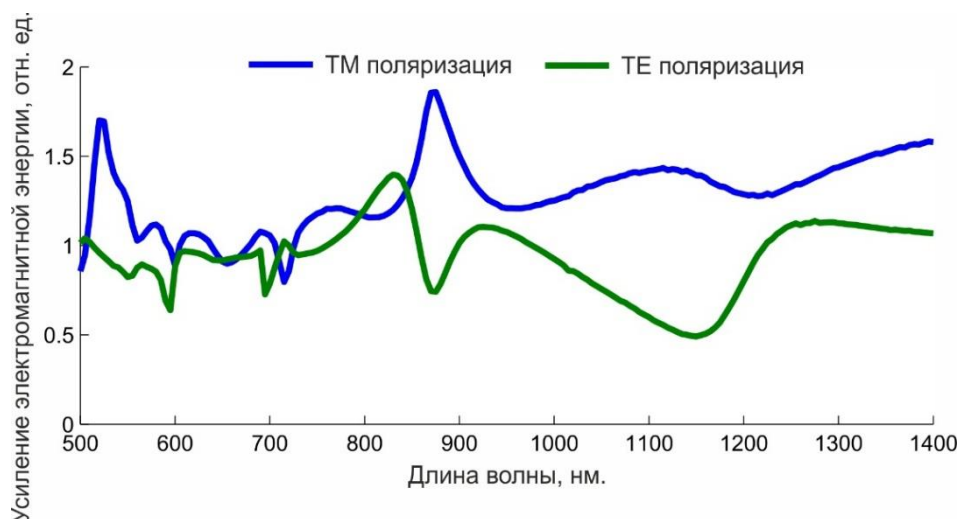


Рисунок 32 - Спектр усиления электромагнитной энергии внутри частицы титаната бария, находящегося в составе нанодимера; синяя и зеленая кривая соответствуют ТМ и ТЕ поляризации излучения накачки, соответственно

Проведенные расчеты показывают сильное изменение как модового состава, так и спектра электромагнитной энергии наночастицы титаната бария, находящегося в нанодимере. Наибольшее усиление энергии происходит в случае ТМ поляризации падающего излучения, а также в случае, когда магнитный дипольный резонанс наночастицы титана бария приходится на 600 нм.

### 3.2.2 Моделирование спектральной зависимости генерации второй гармоники нанодимером в случае ТЕ/ТМ поляризации излучения накачки

Результаты численного моделирования генерации второй гармоники для одиночной частицы титаната бария в случае вертикальной и горизонтальной ориентации кристалла представлены на Рисунке 33. Видно, что дипольный и квадрупольный магнитные резонансы явно выражены в случае горизонтальной ориентации кристалла.

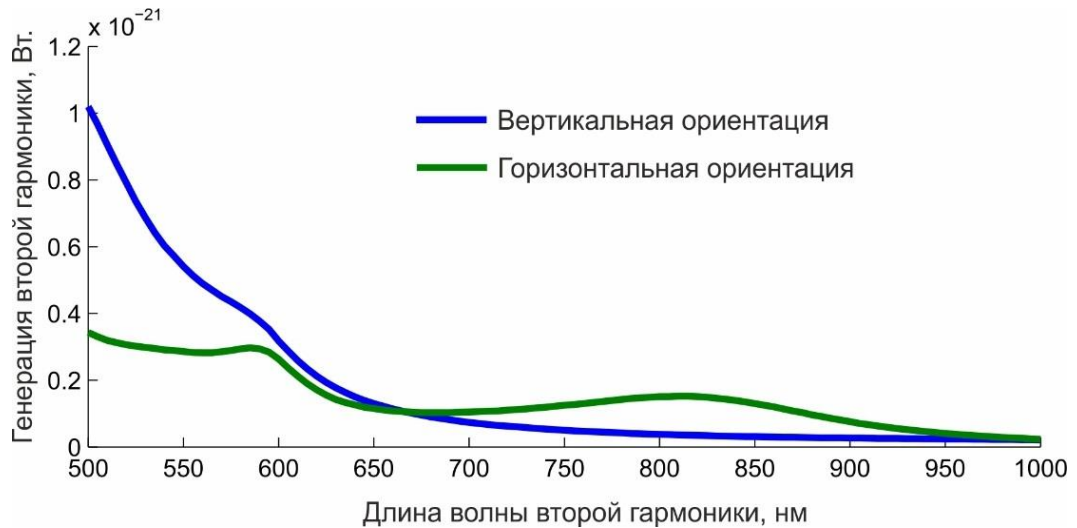


Рисунок 33 - Спектр генерации второй гармоники для одиночной наночастицы титаната бария в случае вертикальной ориентации элементарной ячейки (синяя кривая) и горизонтальной ориентации элементарной ячейки (зеленая кривая)

Что касается генерации второй гармоники в нанодимере, то она явно выражена на квадрупольном магнитном резонансе в случае ТМ поляризации излучения накачки (Рисунок 34, область 600 нм.). Квадрупольный резонанс выражен более явно нежели дипольный. То же самое можно сказать и про случай ТЕ поляризации излучения накачки (Рисунок 35, область 600 нм.), хоть и квадрупольный резонанс выражен менее явно чем дипольный. Данная особенность вполне закономерна, если учесть тот факт, что магнитный квадрупольный резонанс титаната бария был настроен на область 600 нм.

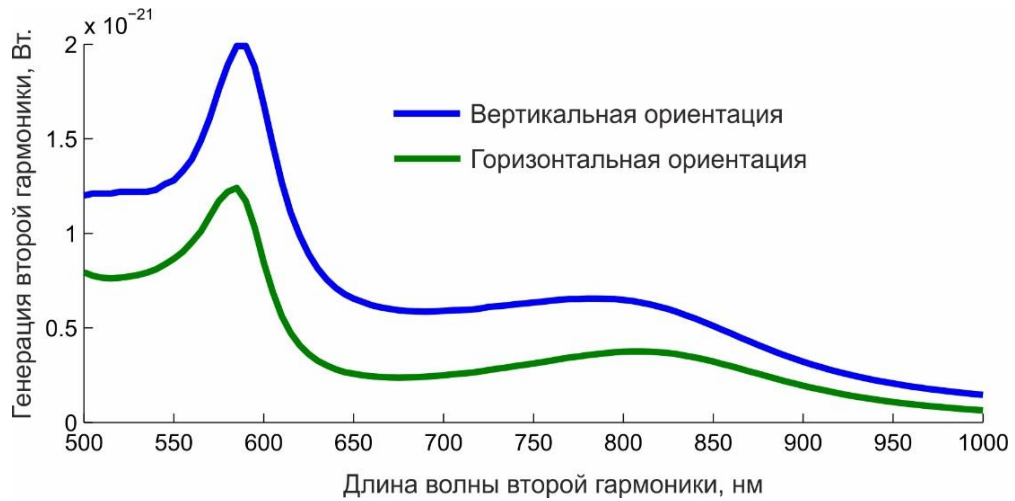


Рисунок 34 - Спектр генерации второй гармоники для наночастицы титаната бария, находящейся в составе нанодимера в случае ТМ поляризации излучения накачки; синяя кривая - вертикальная ориентация элементарной ячейки, зеленая кривая - горизонтальная ориентация элементарной ячейки

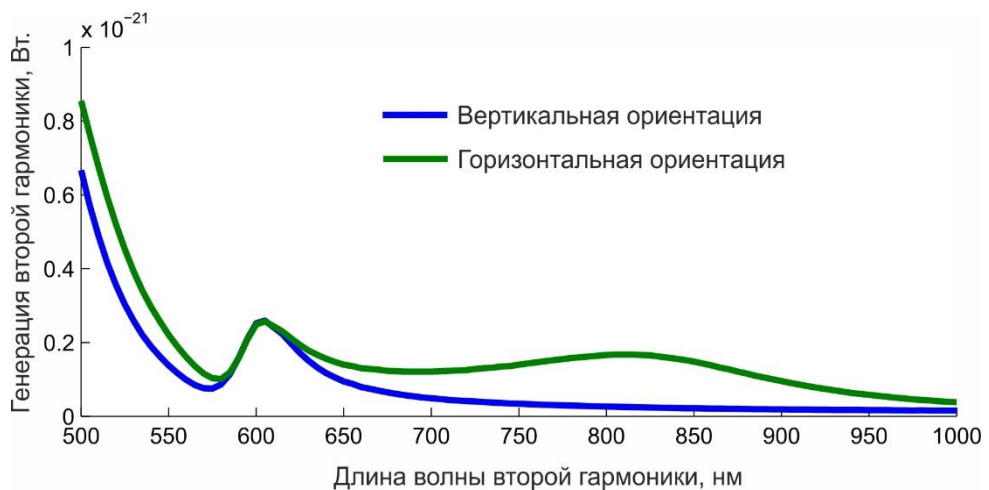


Рисунок 35 - Спектр генерации второй гармоники для наночастицы титаната бария, находящейся в составе нанодимера в случае ТЕ поляризации излучения накачки; синяя кривая - вертикальная ориентация элементарной ячейки, зеленая кривая - горизонтальная ориентация элементарной ячейки

### 3.2.3 Оценка усиления генерации второй гармоники в нанодимере

Чтобы оценить эффективность использования наноантенного и би-резонансного подходов для усиления генерации второй гармоники в наночастице титаната бария, как и в предыдущем разделе ниже представлен спектр усиления генерации второй гармоники для различных условий ее генерации. Спектр



усиления второй гармоники для диполь-квадрупольного взаимодействия наночастиц в димере при ТМ поляризации излучения накачки, а также для вертикальной и горизонтальной ориентации кристалла приведен на Рисунке 36. В данном случае, пиковое значение усиления генерации второй гармоники в области 600 нм. достигает 5 и 4 при вертикальной (Рисунок 36, синяя кривая) и горизонтальной (Рисунок 36, зеленая кривая) ориентации кристалла титаната бария, соответственно.

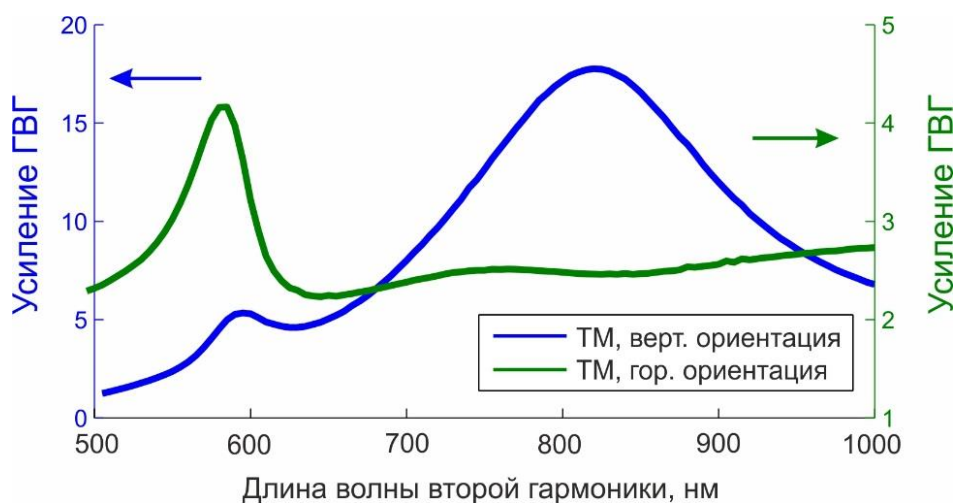


Рисунок 36 - Спектр усиления генерации второй гармоники в нанодимере при ТМ поляризации излучения накачки для вертикальной ориентации кристалла (синяя кривая) и горизонтальной ориентации кристалла (зеленая кривая)

Спектр усиления второй гармоники при ТЕ поляризации излучения накачки для вертикальной и горизонтальной ориентации кристалла приведен на Рисунке 37. В данном случае, пиковые значения усиления генерации второй гармоники на 600 нм. достигают 0.8 и 0.9 при вертикальной (Рисунок 37, синяя кривая) и горизонтальной (Рисунок 37, зеленая кривая) ориентации кристалла, соответственно.

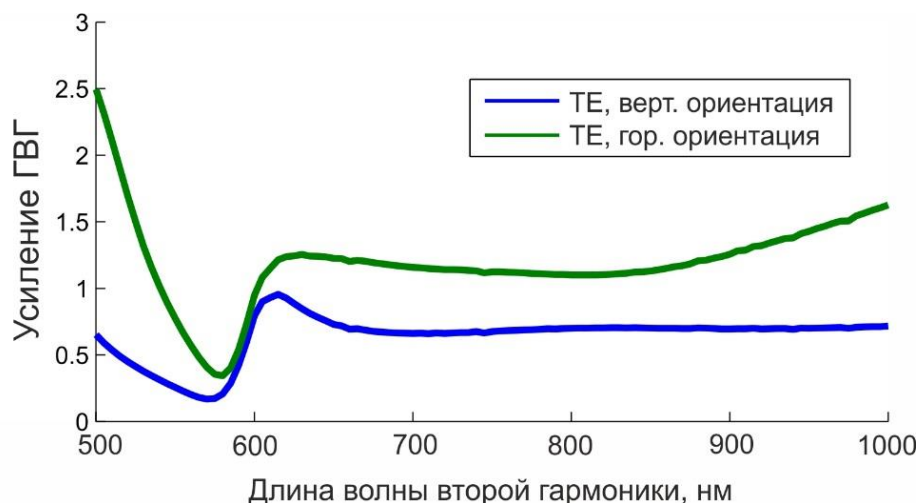


Рисунок 37 - Спектр усиления генерации второй гармоники в нанодимере при ТЕ поляризации излучения накачки для вертикальной ориентации кристалла (синяя кривая) и горизонтальной ориентации кристалла (зеленая кривая)

### 3.3 Анализ влияния би-резонансного подхода на усиления ГВГ в нанодимере

Как видно из спектров усиления второй гармоники в нанодимере, наибольшее усиление удаётся достичь в случае ТМ поляризации падающей волны при вертикальной ориентации элементарной ячейки титаната бария. Максимальное значение усиления генерации второй гармоники равно 109 для случая ТМ поляризации излучения накачки и вертикальной ориентации кристалла титаната бария. Такие высокие значения усиления обязаны наноантенному и би-резонансному подходу. В качестве подтверждения этого, проанализируем генерацию второй гармоники исследуемым нанодимером на длине волны 600 нм. при размерах наночастицы кремния лежащих в диапазоне от 160 нм. до 480 нм. В случае, если усиление генерации второй гармоники действительно вызвано би-резонансным подходом, то на зависимости генерации второй гармоники титанатом бария от радиуса наночастицы кремния должен быть максимум в точке равной 165 нм. Соответствующие численные расчеты были проведены для ТМ поляризации излучения накачки при вертикальной и горизонтальной ориентации кристалла титаната бария и приведены на Рисунке 38.

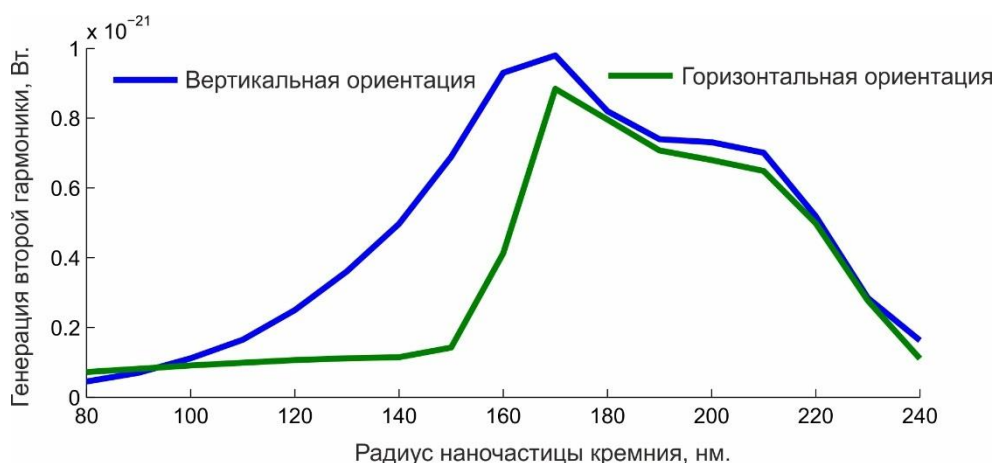


Рисунок 38 - Зависимость генерации второй гармоники титанатом бария в нанодимере от размера наночастицы кремния в случае вертикальной ориентации кристалла (синяя кривая) и горизонтальной ориентации кристалла (зеленая кривая)

Как видно из Рисунка 38, максимум генерации второй гармоники наблюдается именно при размере наночастицы кремния равным 170 нм., во всех других случаях уровень сигнала падает. Данный факт доказывает, что усиление генерации второй гармоники происходит, в частности, в следствии наличия второго резонанса на фундаментальной частоте.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе впервые был проанализирован способ усиления генерации второй гармоники на основе наноантенного и би-резонансного подхода в диэлектрическом нанодимере. Показана возможность значительного усиления генерации второй гармоники. Максимально достигнутое значение усиления генерации второй гармоники равно 109, в случае ТМ поляризации излучения накачки, вертикальной ориентации элементарной ячейки титаната бария и настройке магнитного дипольного резонанса наночастицы титаната бария на частоту второй гармоники - данные условия являются наиболее подходящими для наиболее эффективного усиления генерации второй гармоники. Также было выяснено, что данный подход имеет эффективность меньше единицы для ТЕ поляризации излучения накачки.

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Franken, P. A.; Hill, A. E.; Peters, C. W.; Weinreich, G. Generation of Optical Harmonics // *Phys. Rev. Lett.* – 1961 - 7, 118–119.
2. Boyd R. W. C. A. Antenna Theory. Analysis and Design (New York: Rochester, 2007)
3. Sipe, J. E. et. al., Analysis of second-harmonic generation at metal surfaces // *Phys. Rev. B*, - 1980 - 21, 4389–4402.
4. G. Bachelier et. al. Origin of optical second-harmonic generation in spherical gold nanoparticles: Local surface and nonlocal bulk contributions // *Physical Review B* – 2010 – 82 – 235403.
5. K. Thyagarajan et. al. Augmenting Second Harmonic Generation Using Fano Resonances in Plasmonic Systems // *Nano Lett.* - 2013 - 13, 1847 –1851.  
in Plasmonic Systems
6. Jérémy Butet et. al. Second-harmonic generation from periodic arrays of arbitrary shape plasmonic nanostructures: a surface integral approach // *J. Opt. Soc. Am. B* – 2013 – vol. 30 – 11.
7. Krasnok A. E. et al. Optical nanoantennas // *Physics-Uspekhi.* – 2013. – T. 56. – №. 6.– С. 539.
8. Niek F. van Hulst. Photonics: Light in chains // *Nature* – 2007 – 448, - 141.
9. Akimov A. V. et al. Generation of single optical plasmons in metallic nanowires coupled to quantum dots // *Nature* – 2007 – 450, - 402.
10. Klimov V. V. Plasma phenomena in nanostructures and neutron stars // *Phys. Usp.* – 2008 – 51,- 839.
11. Silver S Microwave Antenna Theory and Design (New York: McGraw-Hill Book Co., 1949)
12. Schelkunoff S. A., Friis H T Antennas: Theory and Practice (New York: Wiley, 1952)
13. Айзенберг Г. 3. Антенны ультракоротких волн (М.: Связьиздат, 1957)
14. Надененко С. И. Антенны (М.: Связьиздат, 1959)
15. Марков Г. Т., Сазонов Д. М. Антенны (М.: Энергия, 1975)

16. Balanis C. A. Antenna Theory. Analysis and Design (New York: Harper & Row, 1982)
17. K. Thyagarajan et. al. Enhanced second-harmonic generation from double resonant plasmonic antennae // Optics Express – 2012 – vol. 20, - 20.
18. H. Linnenbank et. al. Second harmonic generation spectroscopy on hybrid plasmonic/dielectric nanoantennas // Light: Science & Applications – 2016 - 5, - e16013
19. F. Timpu et. al. Second-Harmonic Enhancement with Mie Resonances in Perovskite Nanoparticles // ACS Photonics – 2017 - 4,- 76.