

KĨ THUẬT TÍNH SỐ CHO CÁC TENSOR GREEN CỦA HỆ CẤU TRÚC HÌNH TRỤ

TRẦN MINH HIỀN^{*}, NGUYỄN DŨNG CHINH^{**}, HỒ TRUNG DŨNG^{***}

TÓM TẮT

Chúng tôi sử dụng định lý Cauchy để thực hiện việc tính tích phân số cho hàm Green của hệ cấu trúc hình trụ và chỉ rõ các thông số tối ưu cho đường lấy tích phân. Kết quả số cho thấy đường lấy tích phân đi quá gần cũng như tiến quá xa khỏi trục thực cũng sẽ gây ra một số vấn đề làm cho kết quả không chính xác.

Từ khóa: tích phân theo contour, mặt phẳng phức, định lý Cauchy.

ABSTRACT

Numerical computation for tensor Green of the cylinder-system

Using the Cauchy's theorem to integrate the tensor Green of the cylinder system we specifies the optimal parameters for integrating contour. It is found that if the integration contour is too close to or too away far from the real axis the results become inaccurate.

Keywords: Integration Contour, complex plane, Cauchy's theorem.

1. Mở đầu

Trong bài toán tương tác ánh sáng–vật chất, cấu trúc hình học của hệ ảnh hưởng đáng kể lên quá trình tương tác. Tương tác cộng hưởng giữa trường–nguyên tử và –vật chất bao quanh làm cho hàm Green mô tả quá trình truyền tương tác của hệ có tính chất rất phức tạp; tại những tần số cộng hưởng hàm số biến thiên rất mạnh gây ra những khó khăn đáng kể cho việc tính toán số. Những bài toán dạng này thường chứa các hàm dao động mạnh và các hàm đặc biệt như các hàm Bessel, Hanken...

Bản chất vật lý của các điểm biến thiên nhanh (cực điểm) là các cộng hưởng của hệ. Phần thực của cực điểm là vị trí cộng hưởng, phần ảo là độ rộng vạch cộng hưởng. Để xử lý các cực điểm này, ta sử dụng định lý Cauchy và tính giải tích của hàm Green trong mặt phẳng phức. Nếu hàm có tính chất giải tích, ta có thể tự do thay đổi dạng của đường tích phân kín với điều kiện là đường tích phân không chứa thêm cực điểm mới. Tuy nhiên, từ góc độ tính số, việc thay đổi đường lấy tích phân có thể ảnh hưởng đến kết quả. Mục tiêu của bài báo này là tìm các thông số của đường tích phân sao cho kết quả chính xác khi cấu trúc hệ có đối xứng trụ.

Ngày nay, trong công nghệ quang điện tử, khi kích thước của hệ giảm xuống ở kích thước micro hay nano hiệu ứng về cấu trúc là rất đáng kể vì thế việc tính toán đây

^{*} ThS, Viện Vật lý TP Hồ Chí Minh; Email: mhientran@yahoo.com

^{**} ThS, Trường THCS-THPT Ngôi Sao, TPHCM

^{***} PGS TS, Viện Vật lý TP Hồ Chí Minh.

đủ về cấu trúc hình học của hệ thực sự cần thiết. Một trong những cấu trúc hình học rất được quan tâm đó là cấu trúc hình trụ như: ống nano carbon [1] sợi quang học [7]. Cấu trúc hình trụ cũng được ứng dụng vào việc dẫn sóng nguyên tử trong sợi quang học [4,10]. Ngoài ra, cấu trúc hình trụ cũng dẫn đến nhiều hiệu ứng vật lý thú vị khác như làm tăng tán xạ Raman [3], mode ghép cặp mạnh của những polariton trong khối bán dẫn trụ [5] hay làm tăng tương tác lưỡng cực-lưỡng cực giữa các nguyên tử Rydberg [2]. Ngoài ra, quá trình rã tự phát của nguồn hay quá trình truyền năng lượng cộng hưởng giữa các nguyên tử cũng bị ảnh hưởng đáng kể khi đặt gần hay bên trong khối trụ. Với các bài toán kiểu này, tất cả thông tin về vị trí của nguồn cũng như tính chất của môi trường vật chất bao quanh đều chứa trong tensor Green của hệ, vấn đề là làm thế nào để tính được tensor Green. Nếu tính được tensor Green của hệ xem như bài toán đã được giải quyết.

2. Tensor Green của hệ trụ vô hạn

Tensor Green tán xạ $G_{sc}^{fs}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ cho hệ trụ vô hạn nhiều lớp cho bởi [6]

$$G_{sc}^{fs}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{i}{8\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{(2 - d_n^0)}{h_s^2} \times \left[\begin{aligned} & \mathbf{a}_{e,o} \cdot \mathbf{a}_{e,o} (1 - d_f^N) \mathbf{M}_{e,nh_f}^{(1)}(k_z) \left[(1 - d_s^l) C_{e,1H}^{fs} \mathbf{M}'_{e,nh_s}(-k_z) + (1 - d_s^N) C_{e,1H}^{fs'} \mathbf{M}'_{e,nh_s}{}^{(1)}(-k_z) \right] \\ & + (1 - d_f^N) \mathbf{N}_{e,nh_f}^{(1)}(k_z) \left[(1 - d_s^l) C_{e,1V}^{fs} \mathbf{N}'_{e,nh_s}(-k_z) + (1 - d_s^N) C_{e,1V}^{fs'} \mathbf{N}'_{e,nh_s}{}^{(1)}(-k_z) \right] \\ & + (1 - d_f^N) \mathbf{N}_{e,nh_f}^{(1)}(k_z) \left[(1 - d_s^l) C_{e,2H}^{fs} \mathbf{M}'_{e,nh_s}(-k_z) + (1 - d_s^N) C_{e,2H}^{fs'} \mathbf{N}'_{e,nh_s}{}^{(1)}(-k_z) \right] \\ & + (1 - d_f^N) \mathbf{M}_{e,nh_f}^{(1)}(k_z) \left[(1 - d_s^l) C_{e,2V}^{fs} \mathbf{N}'_{e,nh_s}(-k_z) + (1 - d_s^N) C_{e,2V}^{fs'} \mathbf{N}'_{e,nh_s}{}^{(1)}(-k_z) \right] \\ & + (1 - d_f^l) \mathbf{M}_{e,nh_f}(k_z) \left[(1 - d_s^l) C_{e,3H}^{fs} \mathbf{M}'_{e,nh_s}(-k_z) + (1 - d_s^N) C_{e,3H}^{fs'} \mathbf{M}'_{e,nh_s}{}^{(1)}(-k_z) \right] \\ & + (1 - d_f^l) \mathbf{N}_{e,nh_f}(k_z) \left[(1 - d_s^l) C_{e,3V}^{fs} \mathbf{N}'_{e,nh_s}(-k_z) + (1 - d_s^N) C_{e,3V}^{fs'} \mathbf{N}'_{e,nh_s}{}^{(1)}(-k_z) \right] \\ & + (1 - d_f^l) \mathbf{N}_{e,nh_f}(k_z) \left[(1 - d_s^l) C_{e,4H}^{fs} \mathbf{M}'_{e,nh_s}(-k_z) + (1 - d_s^N) C_{e,4H}^{fs'} \mathbf{M}'_{e,nh_s}{}^{(1)}(-k_z) \right] \\ & + (1 - d_f^l) \mathbf{M}_{e,nh_f}(k_z) \left[(1 - d_s^l) C_{e,4V}^{fs} \mathbf{N}'_{e,nh_s}(-k_z) + (1 - d_s^N) C_{e,4V}^{fs'} \mathbf{N}'_{e,nh_s}{}^{(1)}(-k_z) \right] \end{aligned} \right] \quad (1)$$

trong đó: kí hiệu H, V tương ứng là sự biểu thị sóng phân cực TE (Transverse Electric) và TM (Transverse Magnetic). f và s biểu thị cho lớp thứ f (trường) và thứ s (nơi đặt nguồn). Chỉ số N của delta Kronecker δ_s^N biểu diễn số lớp của cấu trúc hình trụ. Ở đây chúng tôi sẽ xem xét cấu trúc khối trụ điện môi hai lớp dài vô hạn, trong đó lớp thứ nhất (lớp bên ngoài bao quanh khối trụ) là chân không. Chúng tôi xem xét nguồn điểm và điểm trường cùng nằm ở lớp thứ nhất, tức bên ngoài khối trụ. Hàm Green tán xạ $G_{sc}^{fs}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ biểu diễn bởi phương trình (1) ứng với trường hợp $f = 1$ và $s = 1$ có dạng

$$\begin{aligned}
 G_{sc}^{11}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) &= \frac{i}{8p} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \int_{n=0}^{\infty} \frac{(2-d_n^0)}{h_1^2} \\
 &\times \int_{e,o} \mathbf{a} \cdot \int_{e} \mathbf{e}^{11'} M_{e_{nh_1}}^{(1)}(k_z) M_{e_{nh_1}}^{(1)}(-k_z) + C_{IV}^{11'} N_{e_{nh_1}}^{(1)}(k_z) \\
 &\times N_{e_{nh_1}}^{(1)}(-k_z) + C_{2H}^{11'} N_{e_{nh_1}}^{(1)}(k_z) M_{e_{nh_1}}^{(1)}(-k_z) \\
 &+ C_{2V}^{11'} M_{e_{nh_1}}^{(1)}(k_z) N_{e_{nh_1}}^{(1)}(-k_z) \hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{u}}
 \end{aligned} \tag{2}$$

trong đó

$$M_{e_{nh_f}}^{(1)}(k_z) = \int_{e} \mathbf{e} \cdot \int_{e} \mathbf{e} \frac{nH_n^{(1)}(h_f r)}{r} \frac{\sin(nf)}{\cos(nf)} \hat{\mathbf{r}} - \frac{\int_{e} H_n^{(1)}(h_f r)}{\int_{e} r} \frac{\cos(nf)}{\sin(nf)} \hat{\mathbf{f}} \hat{\mathbf{u}}^{ik_z z}, \tag{3}$$

$$\begin{aligned}
 N_{e_{nh_f}}^{(1)}(k_z) &= \frac{1}{\sqrt{k_z^2 + h_f^2}} \int_{e} \mathbf{e} \cdot \int_{e} \mathbf{e} k_z \frac{\int_{e} H_n^{(1)}(h_f r)}{\int_{e} r} \frac{\cos(nf)}{\sin(nf)} \hat{\mathbf{r}} + \frac{ihn}{r} H_n^{(1)}(h_f r) \frac{\sin(nf)}{\cos(nf)} \hat{\mathbf{f}} \\
 &+ h_f^2 H_n^{(1)}(h_f r) \frac{\cos(nf)}{\sin(nf)} \hat{\mathbf{z}} \hat{\mathbf{u}}^{ik_z z}.
 \end{aligned} \tag{4}$$

Với $H_n^{(1)}$ là hàm hankel trụ loại một cấp n , n và η_f là các trị riêng.

Thế các phương trình (3) và (4) vào (2) chúng ta thu được biểu thức cho tensor Green cho trường hợp dipole moment nguyên tử định hướng theo phương $\hat{\mathbf{f}}$

$$\begin{aligned}
 \mathcal{G}_{sc}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_A, \mathbf{w}_A) \hat{\mathbf{u}}_{\hat{\mathbf{f}}} &= \frac{i}{8p} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \int_{n=0}^{\infty} \frac{(2-d_n^0)}{h_1^2} C_{IH}^{e,o} \int_{e,o} \mathbf{a} \cdot \int_{e} \mathbf{e} \frac{\int_{e} H_n^{(1)}(h_1 r_A)}{\int_{e} r_A} \frac{\cos(nf_A)}{\sin(nf_A)} \hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{u}} \\
 &+ \frac{1}{k_z^2 + h_1^2} C_{IV}^{e,o} \int_{e,o} \mathbf{a} \cdot \int_{e} \mathbf{e} \frac{nH_n^{(1)}(h_1 r_A)}{r_A} \frac{\sin(nf_A)}{\cos(nf_A)} \hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{u}} \\
 &\times \int_{e} \mathbf{e} \cdot \int_{e} \mathbf{e} (-k_z) \frac{nH_n^{(1)}(h_1 r_A)}{r_A} \frac{\sin(nf_A)}{\cos(nf_A)} \hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{u}} \\
 &+ C_{2H}^{e,o} \frac{1}{\sqrt{k_z^2 + h_1^2}} \int_{e,o} \mathbf{a} \cdot \int_{e} \mathbf{e} \frac{nH_n^{(1)}(h_1 r_A)}{r_A} \frac{\cos(nf_A)}{\sin(nf_A)} \hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{u}} \frac{\int_{e} H_n^{(1)}(h_1 r_A)}{\int_{e} r_A} \frac{\cos(nf_A)}{\sin(nf_A)} \hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{u}} \\
 &+ C_{2V}^{e,o} \frac{1}{\sqrt{(-k_z)^2 + h_1^2}} \int_{e,o} \mathbf{a} \cdot \int_{e} \mathbf{e} \frac{\int_{e} H_n^{(1)}(h_1 r_A)}{\int_{e} r_A} \frac{\sin(nf_A)}{\cos(nf_A)} \hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{u}} \int_{e} \mathbf{e} \cdot \int_{e} \mathbf{e} (-k_z) \frac{nH_n^{(1)}(h_1 r_A)}{r_A} \frac{\sin(nf_A)}{\cos(nf_A)} \hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{u}}.
 \end{aligned} \tag{5}$$

Lưu ý rằng hàm dưới dấu tích phân là hàm chẵn theo k_z và do các hệ số $C_{1H}^e, C_{2H}^e, C_{IV}^e, C_{2V}^e$ chỉ phụ thuộc vào các thông số của môi trường nên trong mọi trường hợp định hướng của moment lưỡng cực nguyên tử, các hệ số là như nhau. Ta có thể viết lại (5) như sau:

$$\begin{aligned} \vec{G}_{sc}(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_A, w_A)_{if} &= \frac{i}{4p} \int_0^\infty dk_z \frac{2-d_n^0}{h_1^2} \\ &\times \left[C_{1H} \frac{H_n^{(1)}(h_1 r_A)}{r_A} + \frac{1}{k_z^2 + h_1^2} C_{IV} \frac{n H_n^{(1)}(h_1 r_A)}{r_A} \right. \\ &\left. - 2C_{2V} \frac{1}{\sqrt{k_z^2 + h_1^2}} \frac{k_z n}{r_A} H_n^{(1)}(h_1 r_A) \right] \end{aligned} \quad (6)$$

trong đó r_A là vị trí của nguyên tử,

$$C_{1H} = -\frac{A_{1H}}{D}, \quad C_{IV} = -\frac{A_{IV}}{D}, \quad C_{2V} = \frac{A_{2V}}{D},$$

với

$$\begin{aligned} A_{1H} &= H_n^{(1)}(h_1 R) J_n(h_1 R) J_n^2(h_2 R) \sqrt{\frac{e_1}{m_1}} \sqrt{\frac{e_2}{m_2}} \left[\frac{k_z n}{k_2} \frac{h_1^2}{k_1} - \frac{ik_z n}{k_1} \frac{h_2^2}{k_2} \right] \\ &+ R^2 \frac{J_n(h_2 R)}{R} H_n^{(1)}(h_1 R) \sqrt{\frac{e_2}{m_2}} \frac{h_1^2}{k_1} - \frac{H_n^{(1)}(h_1 R)}{R} J_n(h_2 R) \sqrt{\frac{e_1}{m_1}} \frac{h_2^2}{k_2} \\ &\times \frac{J_n(h_2 R)}{R} J_n(h_1 R) \sqrt{\frac{e_1}{m_1}} \frac{h_1^2}{k_1} - \frac{J_n(h_1 R)}{R} J_n(h_2 R) \sqrt{\frac{e_2}{m_2}} \frac{h_2^2}{k_2} \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} A_{IV} &= H_n^{(1)}(h_1 R) J_n(h_1 R) J_n^2(h_2 R) \sqrt{\frac{e_1}{m_1}} \sqrt{\frac{e_2}{m_2}} \left[\frac{k_z n}{k_2} \frac{h_1^2}{k_1} - \frac{ik_z n}{k_1} \frac{h_2^2}{k_2} \right] \\ &+ R^2 \frac{J_n(h_2 R)}{R} J_n(h_1 R) \sqrt{\frac{e_2}{m_2}} \frac{h_1^2}{k_1} - \frac{J_n(h_1 R)}{R} J_n(h_2 R) \sqrt{\frac{e_1}{m_1}} \frac{h_2^2}{k_2} \\ &\times \frac{J_n(h_2 R)}{R} H_n^{(1)}(h_1 R) \sqrt{\frac{e_1}{m_1}} \frac{h_1^2}{k_1} - \frac{H_n^{(1)}(h_1 R)}{R} J_n(h_2 R) \sqrt{\frac{e_2}{m_2}} \frac{h_2^2}{k_2} \end{aligned} \quad (8)$$

$$A_{2V} = R \frac{J_n(h_1 R)}{H_n^{(1)}(h_1 R)} - \frac{H_n^{(1)}(h_1 R)}{J_n(h_1 R)} \frac{J_n^2(h_2 R)}{H_n^{(1)}(h_2 R)} \times \sqrt{\frac{e_1}{m_1} \sqrt{\frac{e_2}{m_2} \frac{h_2^2}{k_2} \frac{ik_z n}{k_1} \frac{h_2^2}{k_2} - \frac{ik_z n}{k_2} \frac{h_1^2}{k_1} \frac{\epsilon}{\delta}}}$$
(9)

$$D = \frac{H_n^{(1)}(h_1 R)}{J_n^2(h_2 R)} \sqrt{\frac{e_1}{m_1} \sqrt{\frac{e_2}{m_2} \frac{h_2^2}{k_2} \frac{ik_z n}{k_1} \frac{h_2^2}{k_2} - \frac{ik_z n}{k_1} \frac{h_2^2}{k_2} \frac{\epsilon}{\delta}}} + R^2 \frac{J_n(h_2 R)}{H_n^{(1)}(h_1 R)} \sqrt{\frac{e_1}{m_1} \sqrt{\frac{e_2}{m_2} \frac{h_1^2}{k_1} \frac{\epsilon}{\delta}}} - \frac{H_n^{(1)}(h_1 R)}{J_n(h_2 R)} H_n^{(1)}(h_1 R) J_n(h_2 R) \left(\frac{e_1}{m_1} + \frac{e_2}{m_2} \frac{h_1^2}{k_1} \frac{h_2^2}{k_2} \right) + \frac{H_n^{(1)}(h_1 R)}{J_n^2(h_2 R)} \sqrt{\frac{e_1}{m_1} \sqrt{\frac{e_2}{m_2} \frac{h_2^2}{k_2} \frac{\epsilon}{\delta}}},$$
(10)

trong đó: R là bán kính của khối trụ, J_n là hàm Bessel loại một, $e_1 = m_1 = m_2 = 1$, $\epsilon_2 = \epsilon$ là hệ số điện môi của khối trụ, $k_z^2 = k_f^2 - h_f^2$, $k_f = k_A \sqrt{e_f m_f}$ (với $f = 1, 2$).

Ở đây, chúng tôi sẽ thực hiện tính số cho phương trình (6).

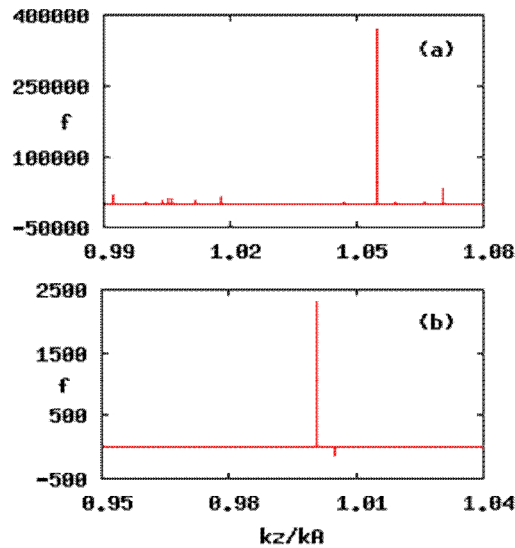
3. Các mode cộng hưởng

Khi thực hiện tích phân theo k_z , chúng ta cần chọn đường lấy tích phân sao cho điều kiện bức xạ Sommerfeld được thỏa, tức là hàm lấy tích phân phải triệt tiêu ở vô cùng. Do đó đường lấy tích phân phải chạy bên dưới trục thực. Hàm Green biểu diễn bởi phương trình (6) chứa các điểm kỳ dị là nghiệm phức của phương trình $D = 0$. D được biểu diễn bởi phương trình (10) và là mẫu số của các hệ số phản xạ $C_{1(H,V)}$, C_{2V} . Các điểm kỳ dị này liên quan đến các mode cộng hưởng của khối trụ. Dọc theo trục thực của k_z , các vạch cộng hưởng xuất hiện trong vùng $1 < k_z / k_A < \text{Re}[\sqrt{\epsilon}]$. Trong khoảng này giá trị của hàm dưới dấu tích phân f thay đổi rất mạnh, với các giá trị $k_z / k_A \geq \text{Re}[\sqrt{\epsilon}]$ hàm f trở nên trơn hơn, giá trị của hàm ổn định hơn. Khi tăng giá trị của hằng số điện môi, số lượng các vạch cộng hưởng cũng tăng và mức độ biến thiên của hàm f càng dữ dội hơn (hình 1a); các vạch cộng hưởng tập trung nhiều ở vùng $1 < k_z / k_A < \text{Re}[\sqrt{\epsilon}]$ chính là đóng góp của các guided mode. Ngoài ra, ta còn thấy xuất hiện thêm các vạch ở vùng $k_z / k_A < 1$; các vạch cộng hưởng này là do đóng góp của các whispering gallery mode [8]. Ở đây, k_z đơn giản là hằng số truyền theo

phương z , nên khi phần thực của nó $\text{Re}[k_z] \leq k_A = \omega_A / c$, sẽ xuất hiện mode truyền đi vòng trong khối trụ trên mặt phẳng vuông góc với phương Oz . Các mode truyền này được gọi là whispering gallery mode.

3.1. Các cực điểm của hàm Green

Để thấy rõ tính chất biến thiên của hàm cần lấy tích phân, trên hình 1 chúng tôi vẽ hàm f như một hàm của k_z theo đơn vị của k_A trong vùng cộng hưởng để thấy rõ mức độ biến thiên của hàm.



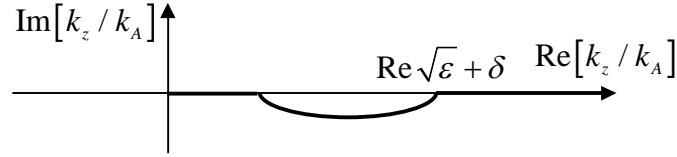
Hình 1. Hàm dưới dấu tích phân trong phương trình (6) được vẽ như một hàm của k_z theo đơn vị của k_A , với bán kính của khối trụ $R = 2\lambda_A$, $\varepsilon = 1.5 + i10^{-8}$, $r_A = 2.01\lambda_A$ (a), $\varepsilon = 1.01 + i10^{-8}$, $r_A = 2.01\lambda_A$ (b). Moment diploe nguyên tử định hướng theo phương ϕ

Trên hình 1, chúng tôi vẽ hàm dưới dấu tích phân trong phương trình (6). Hình vẽ cho thấy tại một số giá trị của k_z (các vị trí cộng hưởng), hàm số biến thiên đột ngột với những đỉnh rất sắc, đến cỡ 4×10^5 ứng với $R = 2\lambda_A$, $\varepsilon = 1.5 + i10^{-8}$, $r_A = 2.01\lambda_A$ (hình 1a).

Các vạch cộng hưởng này chính là nguyên nhân gây khó khăn trong việc tính số cho phương trình (6), do hàm lấy tích phân f biến thiên đột ngột trong vùng này, dẫn đến việc lấy tích phân số cho phương trình (6) gặp trở ngại rất lớn. Để tránh những khó khăn này chúng tôi thực hiện việc lấy tích phân theo định lí Cauchy, thay vì lấy tích phân trực tiếp theo trục thực k_z , chúng tôi chuyển sang lấy tích phân trong mặt phẳng phức k_z ; theo contour dọc theo nửa đường elip mở về phía bên dưới trục thực trong góc phần tư thứ tư (hình 2) để tránh xa các cực điểm này.

4. Thực hiện giải số

Với sự phức tạp và công kênh của tensor Green do cấu trúc hình học gây ra, đối với hệ trụ, cấu trúc của tensor Green phức tạp hơn so với hệ phẳng và hệ cầu. Ở đây, các tính toán không thể thực hiện giải tích được mà chúng ta phải thực hiện giải số. Như đã đề cập ở trên, để tránh các cực điểm, tích phân phải được thực hiện theo contour chạy trong góc phần tư thứ tư của mặt phẳng phức k_z như được biểu diễn trên hình 2. Theo Marocico, đường lấy tích phân được chia thành ba đoạn [8]. Ở đây để đơn giản, chúng tôi lấy tích phân theo một nửa đường elip vòng xuống phía bên dưới của trục thực bắt đầu từ k_z thỏa điều kiện sao cho đường lấy tích phân ôm trọn các cộng hưởng, với bán trục chính là a và bán trục phụ là b (hình 2).



Hình 2. Đường lấy tích phân trong mặt phẳng phức k_z

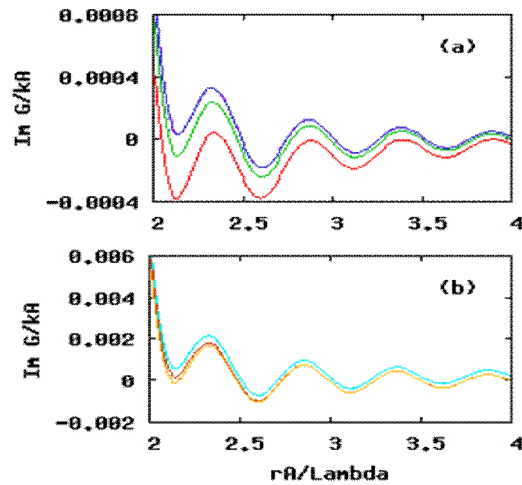
Đương nhiên là chúng ta phải đảm bảo rằng a được chọn đủ lớn để đường lấy tích phân bao trọn các kì dị như đã thảo luận ở trên; chúng tôi chọn giá trị $a = \frac{\omega_A}{2c} \text{Re}[\varepsilon] + \delta - 0.5$, với δ là hằng số cộng thêm để đảm bảo đường lấy tích phân bao trọn vùng cộng hưởng. Chúng tôi sẽ khảo sát thay đổi các giá trị của bán trục bé b và bán trục lớn a để thấy được trong khoảng giá trị nào của chúng kết quả tính số sẽ không gây ra sai khác đáng kể; từ đó chỉ rõ giới hạn của các tham số này sao cho kết quả thu được là tốt nhất. a được chọn sao cho các vạch cộng hưởng của hàm Green nằm trong giới hạn của elip. Về nguyên tắc, cung đường cong này có thể mở rộng tùy ý, kết quả tính toán cũng sẽ không thay đổi. Thế nhưng về mặt kĩ thuật, đối với một số hàm số cụ thể, do tính chất của hàm Bessel việc mở rộng về phía tiến xa trục thực sẽ gặp phải những trở ngại đáng kể, do đó cung elip ở đây cũng sẽ chỉ được mở rộng về nửa mặt phẳng phức bên dưới đủ lớn để có thể tránh đủ xa các cực điểm, mặc khác cũng không mở quá sâu về phía dưới. Điều này cũng đã được Paulus đề cập đến trong trường hợp hệ phẳng. [9]

Như một ví dụ chúng tôi sử dụng kĩ thuật này để tính số cho tensor Green cho hệ trụ cho bởi biểu thức (6). Việc thực hiện nhiều tính toán cho các thông số khác nhau cho phép chúng tôi hiểu rõ hơn phương pháp lấy tích phân theo định lí Cauchy.

5. Thảo luận kết quả

Ở đây, chúng tôi sẽ sử dụng các kí hiệu \bar{a} và \bar{b} là các bán trục bé không thứ nguyên của elip. Ứng với khối trụ có bán kính $R = 2\lambda_A$ hệ số điện môi $\varepsilon = 1.1 + i10^{-8}$,

kết quả tính số cho thấy khi thay đổi giá trị của bán trục bé trong khoảng $0 < \bar{b} < 5 \times 10^{-2} \bar{a}$ và $\text{Re} \sqrt{\varepsilon} / 2 - 0.499 \leq \bar{a} \leq \text{Re} \sqrt{\varepsilon} / 2$, đường cong thu được có giá trị thay đổi phụ thuộc vào giá trị của b . Để minh họa cho điều này chúng tôi vẽ các đường cong tương ứng với tham số \bar{b} lần lượt bằng $0.01\bar{a}$ -màu đỏ và $0.02\bar{a}$ -màu xanh lá. Tuy nhiên, nếu tăng b lên thuộc miền giá trị $\bar{b} \geq 5 \times 10^{-2} \bar{a}$, các đường cong thu được trùng khớp lên nhau tới mức khó có thể phân biệt chúng bằng mắt thường-đường màu xanh dương [hình 3a].

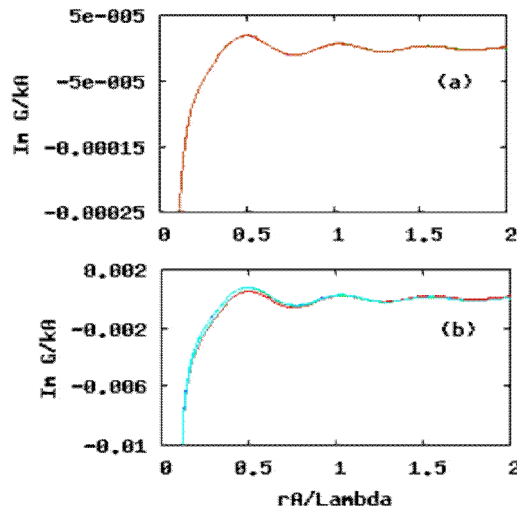


Hình 3. Phần ảo của hàm Green tính theo đơn vị của k_A được vẽ như một hàm của tọa độ nguyên tử r_A / λ_A tương ứng với các hệ số $R = 2\lambda_A, \varepsilon = 1.1 + i10^{-8}$, \bar{b} lần lượt bằng $0.01\bar{a}$, $\delta = 0.001$ -màu đỏ và $0.02\bar{a}$, $\delta = 0.001$ -màu xanh lá và tất cả các đường cong với các thông số tương ứng $\bar{b} = 0.05\bar{a}, 2\bar{a}, 3\bar{a}$ với cùng tham số $\delta = 0.001$ và $\bar{b} = 0.05\bar{a}, 3\bar{a}$ với $\delta = 0.5$ đều nhập làm một thành đường cong màu xanh dương (a) và $\varepsilon = 1.5 + i10^{-8}$, \bar{b} lần lượt bằng $0.01\bar{a}$, $\delta = 0.1$ -màu xanh và $0.02\bar{a}$, $\delta = 0.1$ -màu đỏ và các đường cong ứng với các thông số $\bar{b} = 0.04\bar{a}, 0.05\bar{a}, 0.1\bar{a}, 0.5\bar{a}, 3\bar{a}$ với cùng $\delta = 0.1$ và các đường với $\bar{b} = 0.04\bar{a}, 3\bar{a}$ với $\delta = 0.5$ đều nhập làm một thành đường màu cam (b). Moment diploe nguyên tử định hướng theo phương ϕ .

Ở đây, chúng tôi đã khảo sát các trường hợp ứng với giá trị của bán trục bé lên đến $\bar{b} = 3\bar{a}$; kết quả thu được cũng vẫn trùng khớp rất tốt với trường hợp $\bar{b} = 5 \times 10^{-2} \bar{a}$. Trong khi đó chúng tôi cũng thực hiện tương tự đối với trường hợp $\varepsilon = 1.5 + i10^{-8}$, bức tranh cũng diễn ra đúng như vậy, với $\bar{b} \geq 4 \times 10^{-2} \bar{a}$ và $\text{Re} \sqrt{\varepsilon} / 2 - 0.4 \leq \bar{a} \leq \text{Re} \sqrt{\varepsilon} / 2$, các đường cong cũng trùng khớp lên nhau không thể phân biệt bằng mắt thường được-đường cong màu cam [hình 3b]. Thậm chí ứng với các thông số này, chúng tôi đã khảo sát với tham số $\bar{b} = 23\bar{a}$ kết quả vẫn trùng khớp rất tốt; đường cong thu được cũng trùng khớp rất tốt lên đường màu cam trên hình 3b.

Tuy nhiên, khi $\bar{b} > 23\bar{a}$ kết quả thu được thật sự không ổn định, việc mở rộng đường lấy tích phân đi quá xa trục thực gặp phải một số vấn đề không mong muốn, lí do là vì các hàm Bessel, Hankel rất khó tính được chính xác khi biến số lớn. Khó khăn này cũng đã được đề cập ở [3]

Ngoài ra, chúng tôi cũng khảo sát trường hợp ứng với bán kính khối trụ bé hơn, $R = 0.1\lambda_A$, hình 4. Với $\varepsilon = 1.01 + i10^{-8}$ tất cả các đường cong đều trùng khớp rất tốt lên nhau khi chúng tôi sử dụng các giá trị của bán trục bé dao động trong khoảng $0.0005\bar{a} \leq \bar{b} \leq 3\bar{a}$ và $\text{Re}\sqrt{\varepsilon}/2 - 0.49 \leq \bar{a} \leq \text{Re}\sqrt{\varepsilon}/2$, hình 4a.



Hình 4. Phần ảo của hàm Green tính theo đơn vị của k_A được vẽ như một hàm của tọa độ nguyên tử r_A/λ_A tương ứng với các hệ số $R = 0.1\lambda_A, \varepsilon = 1.01 + i10^{-8}$ các đường tương ứng với các thông số $\bar{b} = 0.0005\bar{a}, 0.001\bar{a}, 3\bar{a}$ với $\delta = 0.01$ và các đường ứng với $\bar{b} = 0.0005\bar{a}, 3\bar{a}, \delta = 0.5$ đều nhập thành một đường không thể phân biệt được (a) và $\varepsilon = 1.5 + i10^{-8}$ đường màu đỏ ứng với $\bar{b} = 0.001\bar{a}, \delta = 0.2$, các đường ứng với các thông số $\bar{b} = 0.01\bar{a}, \delta = 0.2, \bar{b} = 0.01\bar{a}, \delta = 0.5, \bar{b} = 3\bar{a}, \delta = 0.01$ và $\bar{b} = 3\bar{a}, \delta = 0.5$ đều nhập làm một thành đường màu xanh (b). Moment diploe nguyên tử định hướng theo phương ϕ

Tương ứng với $\varepsilon = 1.5 + i10^{-8}$, với các giá trị của các tham số $0.01\bar{a} \leq \bar{b} \leq 3\bar{a}$ và $\text{Re}\sqrt{\varepsilon}/2 - 0.4 \leq \bar{a} \leq \text{Re}\sqrt{\varepsilon}/2$ các đường cong thu được cũng trùng khớp lên nhau được biểu diễn bởi đường màu xanh trên hình 4b. Trong khi đó ứng với các giá trị của bán trục bé nằm trong khoảng $\bar{b} < 0.01\bar{a}$, giá trị của các đường cong thu được phụ thuộc vào \bar{b} , để minh họa cho điều này chúng tôi vẽ đường cong thu được ứng với $\bar{b} = 0.001\bar{a}, \delta = 0.2$ -đường màu đỏ trên hình 4b. Điều này dễ hiểu là vì khi hệ số điện

môi ε của khối trụ tăng cao, tương tác cộng hưởng giữa trường và vật chất cũng tăng; dẫn đến các đỉnh cộng hưởng xuất hiện nhiều hơn và sắc hơn nên đường lấy tích phân cần tránh xa hơn khối trụ thực.

6. Kết luận

Trong bài báo này, chúng tôi đã khảo sát việc tính toán hàm Green mô tả tương tác giữa nguyên tử và trường khi có mặt khối trụ điện môi. Chúng tôi tập trung vào việc khảo sát các thông số của đường lấy tích phân trong mặt phẳng phức theo định lý Cauchy. Các kết quả cho thấy, kỹ thuật này cho phép tính được những hàm có tính chất không trơn và dao động rất mạnh trong một khoảng giới hạn nào đó; có thể được thực hiện một cách đơn giản và gọn nhẹ hơn mà vẫn có thể thu được kết quả tốt như mong muốn.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. I. V. Bondarev, G. Ya. Slepyan and S. A. Maksimenko (2002), “Spontaneous Decay of Excited Atomic States near a Carbon Nanotube”, *Phys. Rev. Lett.* 89, 115504.
2. C. S. E. van Ditzhuijzen, A. F. Koenderik, J. V. Hernandez, F. Robicieux, L. D. Noordam and H. B. Van Linden (2008), “Spatially Resolved Observation of Dipole-Dipole Interaction between Rydberg Atoms”, *Phys. Rev. Lett.* 100, 243201.
3. L. Y. Cao, B. Nabet and J. E. Spanier (2006), “Enhanced Raman Scattering from Individual Semiconductor Nanocones and Nanowires”, *Phys. Rev. Lett.* 96, 157402.
4. H. Ito, T. Nakata, K. Sakaki, M. Ohtsu, K. I. Lee and W. Jhe (1996), “Laser Spectroscopy of Atoms Guided by Evanescent Waves in Micron-Sized Hollow Optical Fibers”, *Phys. Rev. Lett.* 76, 4500.
5. M. A. Kaliteevski, S. Brand, R. A. Abram, A. Kavokin and L. S. Dang (2007), “Whispering gallery polaritons in cylindrical cavities”, *Phys. Rev. B* 75, 233309.
6. Li L.W., Leong M.S., Yeo T.S., and Kooi P.S. (2000), “Electromagnetic dyadic Green’s functions in spectral domain for multilayered cylinders”, *Journal of Electromagnetic Waves and Applications*, 14, tr. 961-985.
7. V. V. Klimov and M. Ducloy (2004), “Spontaneous emission rate of an excited atom placed near a nanofiber”, *Phys. Rev. A* 69, 013812.
8. C. A. Marocico and J. Knoester (2009), “Intermolecular resonance energy transfer in the presence of a dielectric cylinder”, *Phys. Rev. A* 79, 053816.
9. M. Paulus, P. Gay-Balmaz, and O. J. F. Martin (2000), “Accurate and efficient computation of the Green’s tensor for stratified media”, *Phys. Rev. E* 62, 5797.
10. M. J. Renn, D. Montgomery, O. Vdovin, D. Z. Anderson, C. E. Wieman and E. A. Cornell (1995), “Laser-Guided Atoms in Hollow-Core Optical Fibers”, *Phys. Rev. Lett.* 75, 3253.

(Ngày Tòa soạn nhận được bài: 23-3-2015; ngày phản biện đánh giá: 08-4-2015;
ngày chấp nhận đăng: 18-5-2015)