ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ

ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ

ανισοτροπικα νανοσυνθετα φωτονικα υλικα

Αρίστη Χριστοφή

Διδακτορική Διατριβή

Αθήνα, Ιούνιος 2014

Μόνη πατρίδα τα παιδικά μας χρόνια

Summary

In this thesis we study the optical properties of anisotropic photonic nanocomposites, which contain chiral or gyrotropic constituents, by means of rigorous full-electrodynamic calculations using the layer-multiple-scattering method that we properly extend to structures of simple and coated bi-isotropic spheres, arbitrarily oriented axis-symmetric isotropic particles, and gyrotropic spheres magnetized along an arbitrary direction.

We present a detailed analysis of the optical modes and light propagation in photonic crystals consisting of homogeneous and metal-coated bi-isotropic spheres in a simple isotropic medium. The photonic band structure of these crystals, which exhibits remarkable features peculiar to crystals that possess time-reversal but not space-inversion symmetry, is analyzed in the light of group theory and discussed in conjunction with relevant reflection and transmission spectra. We reveal the occurrence of strong band bending away from the Bragg points with consequent negative-slope dispersion inside the first Brillouin zone, slow-photon bands, and sizeable frequency gaps, which give rise to polarization-selective transmission and negative refraction for a short range of angles of incidence.

We investigate the optical response of three-dimensional spiral-staircase structures of metallic nanorods. We show that the combination of plasmonic modes and helical arrangement of the nanorods results in the formation of collective optical eigenmodes with a specific predominant circular polarization character, sizable polarization gaps, and negative group velocity bands that lead to negative refraction. Multilayer slabs of these structures exhibit giant optical activity effects, combined with reduced dissipative losses, which persist for any angle of incidence and polarization direction. These effects, which are robust against the twisting angle and become more pronounced with increasing particle concentration, can be tuned within a broad range of frequencies in the infrared and visible spectrum by appropriately choosing the rod length. All of these features make the proposed structures potentially useful for polarization control applications in miniaturized optoelectronic devices.

We show that a relatively sparse photonic crystal of high-permittivity magnetic garnet spheres can induce a giant Faraday rotation of light transmitted through a finite slab of it. The underlying mechanism resides in wave propagation through collective Bloch modes which are strongly localized in the particles. An appropriate planar defect in this crystal supports nonreciprocal interface states, due to the simultaneous lack of space-inversion and time-reversal symmetries. Moreover, strong nonreciprocal magnetochiral dichroism is demonstrated in helical structures of such spheres, in flat band regions associated with enhanced natural and magnetic optical activity.

A generic three-dimensional chiral structure as well as surface geometries of crystals of magnetized plasma spheres that lack both space-inversion and time-reversal symmetries are also investigated. Photonic band diagrams of the chiral structure and relevant transmission spectra, are analyzed in the light of the theory of nonsymmorphic space groups, providing a consistent interpretation of some remarkable features and effects like Dirac points, polarization-dependent transmission, as well as band splitting and nonreciprocal optical response. On the other hand, dispersion diagrams of Tamm states at the (001) surface of a semi-infinite fcc crystal of magnetized plasma spheres as well as of guided modes of a square array of such spheres on a quartz substrate, and of plasmon polaritons at the surface of a plasmonic material coated with an overlayer of magnetized garnet spheres are calculated and nonreciprocal optical response of these structures is demonstrated in the Voigt geometry.

Σύνοψη

Στη διατριβή αυτή μελετώνται οι οπτικές ιδιότητες ανισοτροπικών νανοσύνθετων φωτονικών υλικών, που εμπεριέχουν χειρόμορφα ή γυροτροπικά συστατικά, μέσω ηλεκτροδυναμικών υπολογισμών ακριβείας με τη μέθοδο στρωματικής πολλαπλής σκέδασης, την οποία επεκτείνουμε κατάλληλα σε σφαίρες από δισοτροπικό υλικό χωρίς και με επικάλυψη, δομές ισοτροπικών σωματιδίων με αξονική συμμετρία και οποιονδήποτε προσανατολισμό, καθώς και γυροτροπικές σφαίρες μαγνητισμένες κατά οποιαδήποτε διεύθυνση.

Παρουσιάζεται μια λεπτομερής ανάλυση των οπτικών ιδιοκαταστάσεων και της διάδοσης φωτός σε κρυστάλλους από δισοτροπικές σφαίρες, ομοιογενείς ή καλυμμένες με μεταλλικό φλοιό, σε απλό ισοτροπικό περιβάλλον μέσο. Η φωτονική δομή ζωνών των κρυστάλλων αυτών, η οποία έχει αξιοσημείωτα χαρακτηριστικά που απορρέουν από την ύπαρξη συμμετρίας αντιστροφής χρόνου αλλά όχι χώρου, αναλύεται υπό το πρίσμα της θεωρίας ομάδων και συζητάται σε σχέση με αντίστοιχα φάσματα διέλευσης και ανάκλασης. Διαπιστώνεται η εμφάνιση ισχυρής κάμψης των ζωνών εκτός των σημείων Bragg με συνεπακόλουθη αρνητική κλίση της καμπύλης διασποράς μέσα στην πρώτη ζώνη Brillouin, καθώς και η ύπαρξη ζωνών αργών φωτονίων και χασμάτων συχνοτήτων που επάγουν διέλευση επιλεκτική ως προς την πόλωση και αρνητική διάθλαση για μια στενή περιοχή γωνιών πρόσπτωσης.

Μελετάται η οπτική απόκριση τρισδιάστατων σπειρόμορφων δομών μεταλλικών νανοκυλίνδρων. Δείχνεται ότι ο συνδυασμός πλασμονικών καταστάσεων και ελικοειδούς διάταξης των νανοκυλίνδρων προκαλεί το σχηματισμό συλλογικών οπτικών ιδιοκαταστάσεων με συγκεκριμένο κυρίαρχο χαρακτήρα κυκλικής πόλωσης, ευρέα χάσματα πόλωσης, και ζώνες με αρνητική ταχύτητα ομάδας που οδηγούν σε αρνητική διάθλαση. Πολυστρωματικά πλακίδια αυτών των δομών εκδηλώνουν γιγαντιαία φαινόμενα οπτικής ενεργότητας, σε συνδυασμό με χαμηλές απώλειες, που διατηρούνται για κάθε γωνία πρόσπτωσης και διεύθυνση πόλωσης. Τα φαινόμενα αυτά, τα οποία παραμένουν σταθερά αν μεταβληθεί το βήμα της ελικοειδούς διάταξης και γίνονται πιο έντονα με την αύξηση της συγκέντρωσης των σωματιδίων, μπορούν να ρυθμιστούν κατά βούληση σε μια ευρεία περιοχή συχνοτήτων εντός του υπερύθρου και ορατού φάσματος επιλέγοντας κατάλληλα το μήκος των κυλίνδρων. Όλα αυτά τα χαρακτηριστικά καθιστούν τις προτεινόμενες δομές εν δυνάμει χρήσιμες σε εφαρμογές ελέγχου της πόλωσης σε μικροσκοπικές οπτοηλεκτρονικές διατάξεις.

Δείχνεται ότι ένας σχετικά αραιός φωτονικός κρύσταλλος από σφαίρες μαγνητισμένου γρανάτη με μεγάλη διηλεκτρική σταθερά μπορεί να επάγει τεράστια στροφή Faraday σε φως που διέρχεται από ένα πεπερασμένο πλακίδιό του. Ο υπεύθυνος μηχανισμός ανάγεται σε κυματική διάδοση μέσω συλλογικών καταστάσεων Bloch που είναι ισχυρά εντοπισμένες στα σωματίδια. Μια κατάλληλη επίπεδη ατέλεια στον κρύσταλλο αυτό εμφανίζει μη αντιστρεπτές καταστάσεις ενδοεπιφάνειας, λόγω ταυτόχρονης απουσίας συμμετρίας αντιστροφής χώρου και χρόνου. Επιπλέον, έντονος μη αντιστρεπτός χειρομαγνητικός διχρωισμός εκδηλώνεται σε ελικοειδείς δομές τέτοιων σφαιρών, σε περιοχές στενών ζωνών που είναι συνυφασμένες με αυξημένη φυσική και μαγνητική οπτική ενεργότητα.

Μελετάται μια πρότυπη τρισδιάστατη χειρόμορφη δομή καθώς και επιφανειακές γεωμετρίες κρυστάλλων από μαγνητισμένες σφαίρες πλάσματος, που δεν έχουν συμμετρία αντιστροφής χώρου και χρόνου. Φωτονικά διαγράμματα ζωνών της χειρόμορφης δομής, σε συνδυασμό με αντίστοιχα φάσματα διέλευσης, αναλύονται υπό το πρίσμα της θεωρίας των μη σύμμορφων ομάδων χώρου, δίνοντας μια συνεπή ερμηνεία κάποιων αξιοσημείωτων χαρακτηριστικών και φαινομένων όπως σημεία Dirac, διέλευση εξαρτώμενη από την πόλωση, καθώς και διαχωρισμός ζωνών και μη αντιστρεπτή οπτική απόκριση. Υπολογίζονται διαγράμματα διασποράς των καταστάσεων Tamm στην επιφάνεια (001) ενός ημιάπειρου κρυστάλλου fcc από μαγνητισμένες σφαίρες πλάσματος καθώς και καταστάσεων κυματοδηγού ενός τετραγωνικού πλέγματος τέτοιων σφαιρών σε υπόστρωμα χαλαζία και πλασμονίων πολαριτονίων στην επιφάνεια πλασμονικού υλικού καλυμμένου με επίστρωση από σφαίρες μαγνητισμένου γρανάτη, και δείχνεται η μη αντιστρεπτή οπτική απόκριση αυτών των δομών σε γεωμετρία Voigt.

Δημοσιεύσεις

Σε διεθνή περιοδικά

1. *Photonic eigenmodes and light propagation in periodic structures of chiral nanoparticles,*
A. Christofi, N. Stefanou, and G. Gantzounis, Phys. Rev. B **83**, 245126 (2011).

2. *Spiral-staircase photonic structures of metallic nanorods,*
A. Christofi, N. Stefanou, G. Gantzounis, and N. Papanikolaou, Phys. Rev. B **84**, 125109 (2011).

3. *Photonic structures of metal-coated chiral spheres,*
A. Christofi and N. Stefanou, J. Opt. Soc. Am. B **29**, 1165 (2012).

4. *Giant optical activity of helical architectures of plasmonic nanorods,*
A. Christofi, N. Stefanou, and G. Gantzounis, J. Phys. Chem. C **116**, 16674 (2012).

5. *Nonreciprocal optical response of helical periodic structures of plasma spheres in a static magnetic field,*
A. Christofi and N. Stefanou, Phys. Rev. B **87**, 115125 (2013).

6. *Nonreciprocal photonic surface states in periodic structures of magnetized plasma nanospheres,*
A. Christofi and N. Stefanou, Phys. Rev. B **88**, 125133 (2013).

7. *Strong magnetochiral dichroism of helical structures of garnet particles,*
A. Christofi and N. Stefanou, Opt. Lett. **38**, 4629 (2013).

8. *Layer multiple scattering calculations for nonreciprocal photonic structures,*
A. Christofi and N. Stefanou, Int. J. Mod. Phys. B **28**, 1441012 (2014).

9. *Periodic structures of magnetic garnet particles for strong Faraday rotation enhancement,*
A. Christofi, N. Stefanou, and N. Papanikolaou, *under review* (2014).

Σε πρακτικά συνεδρίων (σε διεθνή περιοδικά ή ειδικούς τόμους)

1. *Chiral metamaterials of metallic nanorods,*
A. Christofi, N. Stefanou, G. Gantzounis, and N. Papanikolaou, Proceedings of the XXV Panhellenic Conference on Solid State Phyiscs and Materials Science, (2011).

2. *Optical modes of chiral photonic composites,*
A. Christofi, N. Stefanou, and S. Thanos, Microel. Eng. **90**, 152 (2012).

3. *Helical assemblies of plasmonic nanorods as chiral metamaterials,*
A. Christofi, N. Stefanou, G. Gantzounis, and N. Papanikolaou, Proc. SPIE **8423**, 84230A (2012). [**Best Student Paper Award**]

4. *Nonreciprocal plasmonic nanoarchitectures,*
   A. Christofi and N. Stefanou, Proceedings of the XXVI Panhellenic Conference on Solid State Phyiscs and Materials Science, (2013).

5. *Multiple scattering calculations for nonreciprocal planar magnetoplasmonic nano-structures,*
   A. Christofi, C. Tserkezis, and N. Stefanou, J. Quant. Spectrosc. Ratiat. Transfer doi:10.1016/j.jqsrt.2013.12.020 (2014). [**Invited Paper**]

Πρόλογος

Η παρούσα διδακτορική διατριβή εκπονήθηκε στο Τμήμα Φυσικής του Εθνικού και Καποδιστριακού Πανεπιστημίου Αθηνών, από τον Μάρτιο του 2010 μέχρι τον Απρίλιο του 2014, με κύριο επιβλέποντα τον Καθηγητή Νικόλαο Στεφάνου. Έναν εξαίρετο άνθρωπο αλλά και χαρισματικό επιστήμονα και δάσκαλο, που είχα την τύχη να ανταμώσω πριν από περίπου τεσσεράμισι χρόνια. Από τότε ξεκίνησε η συνεργασία μας, το αποτέλεσμα της οποίας κρατάει κανείς στα χέρια του σήμερα. Όσα ευχαριστώ και αν ειπωθούν προς το πρόσωπό του, τόσο για το άριστο κλίμα της συνεργασίας μας, όσο και για τις στιγμές κατανόησης και συμπαράστασης που μου έχει χαρίσει, θα είναι λίγα. Του χρωστάω επίσης, ένα μεγάλο ευχαριστώ γιατί με έκανε να πιστέψω ακόμη περισσότερο στη Θεωρητική Φυσική και ο ενθουσιασμός και η όρεξή μου για Έρευνα να συνεχίζουν να είναι οι μόνες κινητήριες δυνάμεις μου.

Στην Τριμελή Συμβουλευτική Επιτροπή συμμετείχαν επίσης ο Ερευνητής Α΄ του Εθνικού Κέντρου Έρευνας Φυσικών Επιστημών "Δημόκριτος" Σ. Θάνος και ο Επίκουρος Καθηγητής του Τμήματος Φυσικής του Εθνικού και Καποδιστριακού Πανεπιστημίου Αθηνών Ε. Συσκάκης, τους οποίους ευχαριστώ ιδιαιτέρως. Επίσης, ευχαριστώ τα υπόλοιπα μέλη της επταμελούς εξεταστικής επιτροπής, τον Καθηγητή Ι. Στρατή (Τμήμα Μαθηματικών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών), τον Καθηγητή Δ. Συβρίδη (Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών), τον Αναπληρωτή Καθηγητή Κ. Καλλή (Τμήμα Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Ηλεκτρονικών Υπολογιστών και Πληροφορικής, Τεχνολογικό Πανεπιστήμιο Κύπρου) και τον Επίκουρο Καθηγητή Β. Γιαννόπαπα (Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο).

Ευχαριστώ επίσης, το Εθνικό Κέντρο Έρευνας Φυσικών Επιστημών "Δημόκριτος" για την τετράχρονη υποτροφία για διδακτορικές σπουδές, καθώς και τον Διεθνή Οργανισμό SPIE για την οικονομική στήριξη μέσω της "Υποτροφίας Οπτικής και Φωτονικής SPIE".

Ακόμη, θέλω να ευχαριστήσω τους συνεργάτες της ερευνητικής ομάδας με την οποία αλληλεπίδρασα αυτά τα χρόνια: τον Δρ. Ν. Παπανικολάου, τον Δρ. Ι. Ψαρόμπα, τον Δρ. Χ. Τσερκέζη, και τον Υπ. Δρ. Ε. Αλμπάνη. Ιδιαίτερα όμως ευχαριστώ τον Δρ. Γ. Γκαντζούνη για όλη τη βοήθεια και επικοινωνία που είχαμε ειδικά τα πρώτα δύσκολα χρόνια.

Πολλά ευχαριστώ στην αγαπημένη φίλη Μυρτώ Παπαδάκη, που με το ταλέντο και την αισθητική της έκανε τη διατριβή αυτή να μοιάζει ομορφότερη. Επίσης, ευχαριστώ τη φίλη για μια ζωή Υπ. Δρ. Γεωργία Βερτσιώτη που ήταν δίπλα μου όλα αυτά τα χρόνια.

Και τέλος, μία συγγνώμη και ένα μεγάλο ευχαριστώ στον πατέρα μου Μιλτιάδη, στη μητέρα μου Θεοδώρα και στην αδερφή μου Αλεξία, για τις λίγες ώρες που τους έχω χαρίσει τα τελευταία αυτά χρόνια και για την πολλή κατανόηση και αγάπη που εισέπραξα παρόλα αυτά.

Αρίστη

Περιεχόμενα

Εισαγωγή

Χειρομορφία σε ένα μόριο ή μια δομή σημαίνει ότι αυτό(ή) δεν μπορεί να ταυτιστεί με την κατοπτρική του(της) εικόνα λόγω απουσίας χωρικής συμμετρίας αντιστροφής. Ένα αποτέλεσμα της χειρομορφίας είναι και η οπτική ενεργότητα των υλικών, δηλαδή η ικανότητά τους να στρέφουν το επίπεδο πόλωσης γραμμικά πολωμένου διερχόμενου φωτός, κατά την ίδια φορά ανεξάρτητα της κατεύθυνσης πρόσπτωσης (F. J. D. Arago, J. B. Biot 1811). Αντίστοιχα, γυροτροπικά υλικά είναι εκείνα των οποίων η οπτική απόκριση αλλάζει με την παρουσία ενός στατικού μαγνητικού πεδίου, είτε αυτό εφαρμόζεται εξωτερικά είτε προέρχεται από ενδογενή μαγνήτιση του υλικού. Το πεδίο αυτό αίρει τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου, τοπικά, δηλαδή αν η αντιστροφή εφαρμοστεί μόνο στη διάδοση της ακτινοβολίας και όχι στις πηγές του μαγνητικού πεδίου, και προκαλεί διάφορα ενδιαφέροντα μαγνητο-οπτικά φαινόμενα. Για παράδειγμα ηλεκτρομαγνητικά (ΗΜ) κύματα με δεξιόστροφη και αριστερόστροφη κυκλική πόλωση διαδίδονται κατά τη διεύθυνση του πεδίου με διαφορετικές ταχύτητες, προκαλώντας στροφή του επιπέδου πόλωσης γραμμικά πολωμένου φωτός κατά τη διέλευση (M. Faraday 1845) ή την ανάκλαση (J. Kerr 1877) με φορά που εξαρτάται από την κατεύθυνση πρόσπτωσης.

Οι φωτονικοί κρύσταλλοι είναι σύνθετα υλικά, φυσικής ή τεχνητής προέλευσης, από συστατικά μακροσκοπικών διαστάσεων ώστε να περιγράφονται από την κλασική ΗΜ θεωρία, διατεταγμένα περιοδικά στο χώρο. Τέτοιοι κρύσταλλοι, στο όριο του μεγάλου μήκους κύματος ως προς τις διαστάσεις των δομικών τους μονάδων και την απόσταση μεταξύ τους, συμπεριφέρονται ως ομοιογενή μέσα (μεταϋλικά) ενώ σε μικρότερα μήκη κύματος η συμπεριφορά τους γίνεται πιο πολύπλοκη. Από τις πιο ενδιαφέρουσες ιδιότητές τους είναι η ύπαρξη φωτονικού χάσματος, μιας περιοχής δηλαδή συχνοτήτων όπου δεν υπάρχουν καταστάσεις του ΗΜ πεδίου, κάτι που μπορεί να βρει εφαρμογές στο σχεδιασμό απόλυτων κατόπτρων χωρίς απώλειες, κυματοδηγών, και laser χαμηλού κατωφλίου λόγω καταστολής της αυθόρμητης αποδιέγερσης. Κατάλληλα σχεδιασμένα μεταϋλικά, που μπορούν να χαρακτηριστούν από αρνητικό δείκτη διάθλασης, υπόσχονται εφαρμογές στην κατασκευή υπερφακών με διακριτική ικανότητα που δεν περιορίζεται από το μήκος κύματος ενώ επενδύσεις από τέτοια υλικά που καθιστούν ένα αντικείμενο αόρατο, σε συγκεκριμένες συχνότητες, δεν βρίσκονται πλέον στη σφαίρα της φαντασίας. Η παρουσία ατελειών σε φωτονικούς κρυστάλλους διευρύνει το φάσμα των προσφερόμενων δυνατοτήτων για τον έλεγχο της διάδοσης του φωτός και την κατασκευή φίλτρων, κυματοδηγών και άλλων οπτικών στοιχείων με πολλά συγκριτικά πλεονεκτήματα.

Φωτονικοί κρύσταλλοι που κάποια από τα συστατικά τους είναι υλικά με ελεύθερα ηλεκτρόνια, όπως μέταλλα ή εμπλουτισμένοι ημιαγωγοί, εκδηλώνουν πολύ ενδιαφέροντα φαινόμενα λόγω της διέγερσης επιφανειακών πλασμονίων. Πρόκειται για συλλογικές ταλαντώσεις του ηλεκτρονικού νέφους στις διεπιφάνειες αυτών των υλικών που προκαλούν μεγάλη αύξηση του ΗΜ πεδίου, τοπικά, και έντονη απορρόφηση του φωτός, φαινόμενα που βρίσκουν εφαρμογές σε ενίσχυση της σκέδασης Raman, μη γραμμική οπτική, φωτοβολταϊκά, θερμική εκπομπή, (βιο)αισθητήρες, οπτικά ολοκληρωμένα κυκλώματα, κλπ.

Στην παρούσα διατριβή μελετώνται θεωρητικά νανοσύνθετες τρισδιάστατες (3Δ) φωτονικές δομές σωματιδίων σε απλό ισοτροπικό και ομοιογενές υλικό, οι οποίες εμφανίζουν ανισοτροπική οπτική απόκριση λόγω χειρομορφίας, είτε της δόμησης είτε των ίδιων των συστατικών τους εγγενώς, ή/και γυροτροπία, ενώ συγχρόνως μπορεί να περιέχουν και πλασμονικά υλικά. Ο συνδυασμός των στοιχείων αυτών (δόμηση, χειρομορφία, γυροτροπία, πλασμονική) προσφέρει εντυπωσιακές δυνατότητες στο σχεδιασμό νέων σύνθετων υλικών, όπως μαγνητοφωτονικοί, μαγνητοπλασμονικοί, χειρομαγνητικοί, χειροπλασμονικοί κρύσταλλοι, για έλεγχο της διάδοσης και πόλωσης του φωτός στη νανοκλίμακα. Η θεωρητική περιγραφή των δομών αυτών γίνεται με αριθμητικούς υπολογισμούς ακριβείας, χρησιμοποιώντας την ηλεκτροδυναμική στρωματική μέθοδο πολλαπλής σκέδασης, η οποία και επεκτείνεται κατάλληλα για διισοτροπικούς (ομοιογενείς και διστρωματικούς) καθώς και γυροτροπικούς σφαιρικούς σκεδαστές. Η μέθοδος αυτή είναι ταχύτατη και ελεγχόμενης ακρίβειας ενώ συγχρόνως προσφέρει μια πιο άμεση φυσική ερμηνεία των αποτελεσμάτων σε σύγκριση με άλλες μεθόδους, π.χ., πεπερασμένων στοιχείων ή πεπερασμένων διαφορών στο πεδίο του χρόνου. Επίσης, επειδή ο υπολογισμός γίνεται ανεξάρτητα για κάθε τιμή της συχνότητας, είναι εύκολη η παράλληλη επεξεργασία ενώ μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως δεδομένα εισόδου οι πραγματικές πειραματικές ΗΜ παράμετροι των συστατικών υλικών, ακόμη και όταν αυτά εμφανίζουν διασπορά και έχουν απορρόφηση. Εξάλλου, επειδή οι δομές οικοδομούνται στρωματικά με μοναδική απαίτηση να έχουν την ίδια διδιάστατη (2Δ) περιοδικότητα στη διάταξη των σωματιδίων, μπορεί κανείς να περιγράψει ρεαλιστικές πειραματικές συνθήκες, π.χ., να λάβει υπόψη την παρουσία ενός ομοιογενούς υμενίου ή υποστρώματος και να υπολογίσει τους συντελεστές διέλευσης, ανάκλασης και απορρόφησης ΗΜ κύματος συγκεκριμένης πόλωσης, που προσπίπτει υπό δεδομένη γωνία σε ένα τέτοιο σύνθετο πλακίδιο.

Η δομή της διατριβής έχει ως εξής. Στο Κεφάλαιο 1 παρατίθενται τα απαραίτητα στοιχεία της ΗΜ θεωρίας, με έμφαση στη διάδοση ΗΜ κυμάτων σε διισοτροπικά και γυροτροπικά μέσα. Επίσης οικοδομείται ένα μεθοδολογικό πλαίσιο περιγραφής σύνθετων φωτονικών δομών με βάση τη συνάρτηση Green του ομοιογενούς υποβάθρου. Στο Κεφάλαιο 2 αναπτύσσεται ένας φορμαλισμός σκέδασης από μεμονωμένα σφαιρικά σωματίδια διαφόρων τύπων: απλά ισοτροπικά (ομοιογενή και πολυστρωματικά), διισοτροπικά (ομοιογενή και διστρωματικά), ομοιογενή γυροηλεκτρικά και γυρομαγνητικά, καθώς και μη σφαιρικά ομοιογενή σωματίδια από απλό ισοτροπικό υλικό. Η στρωματική μέθοδος πολλαπλής σκέδασης, ενιαία για όλους τους προαναφερθέντες τύπους σκεδαστών, αναπτύσσεται στο Κεφάλαιο 3 και εφαρμογές της παρουσιάζονται στα τέσσερα τελευταία κεφάλαια. Το Κεφάλαιο 4 πραγματεύεται περιοδικές δομές από διισοτροπικές σφαίρες, ομοιογενείς ή καλυμμένες με μεταλλικό φλοιό. Αναδεικνύεται ο πλουραλισμός του διαγράμματος φωτονικών ζωνών τέτοιων κρυστάλλων και η εμφάνιση του φαινομένου της αρνητικής διάθλασης. Στο Κεφάλαιο 5 μελετώνται ελικοειδείς αρχιτεκτονικές μεταλλικών νανοκυλίνδρων που εκδηλώνουν αρνητική διάθλαση, καθώς και γιγαντιαία οπτική ενεργότητα και κυκλικό διχρωισμό. Τέλος, τα Κεφάλαια 6 και 7 είναι αφιερωμένα σε κρυστάλλους από μαγνητικά νανοσωματίδια και σωματίδια πλάσματος υπό την επίδραση εξωτερικού στατικού ομοιογενούς μαγνητικού πεδίου, αντίστοιχα. Δείχνεται ότι τέτοιοι κρύσταλλοι προκαλούν τεράστια στροφή Faraday ενώ, αν ταυτόχρονα απουσιάζει η συμμετρία αντιστροφής χώρου, εκδηλώνουν ενδιαφέροντα φαινόμενα μη αντιστρεπτής οπτικής απόκρισης.

Κεφάλαιο 1

Ηλεκτρομαγνητικά κύματα σε ομοιογενή μέσα

1.1 Οι εξισώσεις Maxwell στην ύλη

Η διάδοση ΗΜ ακτινοβολίας στην ύλη, καθώς και όλα τα σχετικά ηλεκτρικά και μαγνητικά φαινόμενα, περιγράφονται κλασικά από τις εξισώσεις του Maxwell οι οποίες, στο σύστημα μονάδων SI, γράφονται [1]

$$\begin{aligned} &\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r},t) = \rho(\mathbf{r},t) & &\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r},t) = 0 \\ &\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r},t) = -\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r},t)}{\partial t} & &\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r},t) = \frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \mathbf{j}(\mathbf{r},t)\ , \end{aligned} \tag{1.1}$$

όπου $\mathbf{E}$ και $\mathbf{H}$ είναι το μακροσκοπικό ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο, αντίστοιχα, $\mathbf{D}$ η ηλεκτρική μετατόπιση και $\mathbf{B}$ η μαγνητική επαγωγή, ενώ με ρ και $\mathbf{j}$ συμβολίζουμε την πυκνότητα (ελεύθερου) ηλεκτρικού φορτίου και ρεύματος, αντίστοιχα. Με εφαρμογή της απόκλισης και στα δύο μέλη της τέταρτης εξίσωσης Maxwell και με χρήση της πρώτης, καθώς και της ιδιότητας ότι η απόκλιση του στροβιλισμού ενός διανύσματος ισούται με μηδέν, προκύπτει η εξίσωση συνέχειας του ηλεκτρικού φορτίου

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r},t) = 0. \tag{1.2}$$

Η αρχή διατήρησης της ενέργειας απαιτεί ο ρυθμός μεταβολής της ΗΜ ενέργειας σε δεδομένο όγκο συν το ρυθμό ροής ενέργειας από την επιφάνεια που τον περικλείει να αντισταθμίζεται από το έργο του πεδίου εντός αυτού του όγκου. Αν έχουμε μια κατανομή φορτίων και ρευμάτων, ο ρυθμός παραγωγής έργου από το ΗΜ πεδίο ανά μονάδα όγκου είναι $\mathbf{E}\cdot\mathbf{j}$ και από την τέταρτη εξίσωση Maxwell έχουμε

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t)\cdot[\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r},t)] - \mathbf{E}(\mathbf{r},t)\cdot\frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \mathbf{E}(\mathbf{r},t)\cdot\mathbf{j}(\mathbf{r},t)\ . \tag{1.3}$$

Χρησιμοποιώντας τη διανυσματική ταυτότητα (Α΄.10) και την τρίτη εξίσωση Maxwell, η Εξ. (1.3) γράφεται

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(\mathbf{r},t)\cdot\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \mathbf{E}(\mathbf{r},t)\cdot\frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \nabla\cdot[\mathbf{E}(\mathbf{r},t)\times\mathbf{H}(\mathbf{r},t)] &= -\mathbf{E}(\mathbf{r},t)\cdot\mathbf{j}(\mathbf{r},t) \\ \Rightarrow \frac{\partial U(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \nabla\cdot\mathbf{S}(\mathbf{r},t) &= -\mathbf{E}(\mathbf{r},t)\cdot\mathbf{j}(\mathbf{r},t) \end{aligned} \tag{1.4}$$

όπου $\mathbf{S} \equiv \mathbf{E}\times\mathbf{H}$ και $\partial_t U = \mathbf{H}\cdot\partial_t\mathbf{B}+\mathbf{E}\cdot\partial_t\mathbf{D}$. Αν δεν υπάρχει παραγωγή ή απώλεια ενέργειας ($\mathbf{E}\cdot\mathbf{j} = 0$) η Εξ. (1.4) είναι ίδια με την εξίσωση συνέχειας του ηλεκτρικού φορτίου (1.2). Το βαθμωτό μέγεθος U συμβολίζει την πυκνότητα ενέργειας (ανά μονάδα όγκου) του ΗΜ πεδίου. Το διάνυσμα $\mathbf{S}$ λέγεται διάνυσμα Poynting και εκφράζει την πυκνότητα ροής ενέργειας (ενέργεια ανά μονάδα επιφάνειας ανά μονάδα χρόνου) κατά τη διεύθυνσή του. Επομένως, η ποσότητα $\nabla\cdot\mathbf{S}$ δίνει την ΗΜ ισχύ που εκρέει από τη μονάδα όγκου. Η Εξ. (1.4) είναι γνωστή ως εξίσωση της συνέχειας ή διατήρησης της ενέργειας (θεώρημα Poynting).

1.2 Καταστατικές εξισώσεις

Η ηλεκτρική μετατόπιση και η μαγνητική επαγωγή συνδέονται με το ηλεκτρικό και το μαγνητικό πεδίο μέσω *καταστατικών εξισώσεων*, οι οποίες είναι χαρακτηριστικές του κάθε υλικού. Θεωρούμε ότι βρισκόμαστε στο όριο της γραμμικής απόκρισης, οπότε εν γένει ισχύει

$$\begin{aligned} D_i(\mathbf{r},t) &= \int_V d^3r' \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \sum_j \left[\epsilon_{ij}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t')E_j(\mathbf{r}',t') + \xi_{ij}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t')H_j(\mathbf{r}',t')\right] \\ B_i(\mathbf{r},t) &= \int_V d^3r' \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \sum_j \left[\zeta_{ij}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t')E_j(\mathbf{r}',t') + \mu_{ij}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t')H_j(\mathbf{r}',t')\right] \ , \end{aligned} \tag{1.5}$$

όπου η χωρική ολοκλήρωση γίνεται σε όλον τον όγκο, V, του υλικού. Στη γενική αυτή περίπτωση μιλάμε για *διανισοτροπικό* υλικό διότι τόσο η ηλεκτρική μετατόπιση όσο και η μαγνητική επαγωγή εξαρτώνται συγχρόνως και από το ηλεκτρικό και από το μαγνητικό πεδίο μέσω τανυστών δεύτερης τάξης που ορίζονται από κατάλληλες ΗΜ παραμέτρους του υλικού (συναρτήσεις απόκρισης). Για ένα *απλό ανισοτροπικό* υλικό, $\xi_{ij} = \zeta_{ij} = 0$, ενώ για τα αντίστοιχα *ισοτροπικά* υλικά οι τανυστές απόκρισης που τα περιγράφουν είναι βαθμωτά μεγέθη: $\alpha_{ij} = \alpha\delta_{ij}$.

Λόγω της *χρονικής ομοιογένειας*, η χρονική εξάρτηση των συναρτήσεων απόκρισης υπεισέρχεται μέσω της διαφοράς $t-t'$ και όχι μέσω των χρονικών στιγμών t και t' ξεχωριστά ενώ, λόγω της αρχής της *αιτιότητας*, οι συναρτήσεις αυτές μηδενίζονται για $t < t'$. Αν επιπλέον θεωρήσουμε *τοπικότητα* στην απόκριση, δηλαδή ότι σε κάθε σημείο του χώρου η ηλεκτρική μετατόπιση και η μαγνητική επαγωγή εξαρτώνται μόνο από τις τιμές των πεδίων στο ίδιο σημείο του χώρου, προκύπτει ότι $\alpha_{ij}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = \alpha_{ij}(\mathbf{r},t-t')\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ οπότε οι Εξ. (1.5) γράφονται

$$\begin{aligned} D_i(\mathbf{r},t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \sum_j \left[\epsilon_{ij}(\mathbf{r},t-t')E_j(\mathbf{r},t') + \xi_{ij}(\mathbf{r},t-t')H_j(\mathbf{r},t')\right] \\ B_i(\mathbf{r},t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \sum_j \left[\zeta_{ij}(\mathbf{r},t-t')E_j(\mathbf{r},t') + \mu_{ij}(\mathbf{r},t-t')H_j(\mathbf{r},t')\right] \ . \end{aligned} \tag{1.6}$$

Εφαρμόζοντας στις Εξ. (1.6) το μετασχηματισμό Fourier $[\int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(i\omega t)\ldots]$ παίρνουμε

$$\begin{aligned} D_i(\mathbf{r},\omega) &= \sum_j \left[\epsilon_{ij}(\mathbf{r},\omega)E_j(\mathbf{r},\omega) + \xi_{ij}(\mathbf{r},\omega)H_j(\mathbf{r},\omega)\right] \\ B_i(\mathbf{r},\omega) &= \sum_j \left[\zeta_{ij}(\mathbf{r},\omega)E_j(\mathbf{r},\omega) + \mu_{ij}(\mathbf{r},\omega)H_j(\mathbf{r},\omega)\right] \ , \end{aligned} \tag{1.7}$$

όπου

$$f(\mathbf{r};\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(i\omega t) f(\mathbf{r},t) \ . \tag{1.8}$$

Σε μορφή πίνακα, γράφουμε συμβολικά

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D} \\ \mathbf{B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\epsilon} & \boldsymbol{\xi} \\ \boldsymbol{\zeta} & \boldsymbol{\mu} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E} \\ \mathbf{H} \end{pmatrix} \ . \tag{1.9}$$

Σημειώνουμε ότι, ενώ τα μετασχηματισμένα πεδία και οι αντίστοιχες μετασχηματισμένες συναρτήσεις απόκρισης είναι μιγαδικές ποσότητες, τα χωροχρονικά πεδία και οι αντίστοιχες συναρτήσεις απόκρισης είναι πραγματικές ποσότητες, γεγονός που επιβάλλει τη συνθήκη

$$f(\mathbf{r};-\omega) = f^*(\mathbf{r};\omega) \ , \tag{1.10}$$

όπου το σύμβολο $*$ δηλώνει μιγαδική συζυγία. Λόγω της γραμμικότητας των εξισώσεων του Maxwell, το συνολικό πεδίο μπορεί να προκύψει ως γραμμικός συνδυασμός μονοχρωματικών (μίας συχνότητας) πεδίων (αρχή της επαλληλίας). Έτσι αρκεί να επιλύσουμε τις εξισώσεις του Maxwell για κάθε μονοχρωματικό πεδίο της μορφής

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r},t) &= \mathrm{Re}[\mathbf{E}(\mathbf{r},\omega)\exp(-i\omega t)] \\ \mathbf{H}(\mathbf{r},t) &= \mathrm{Re}[\mathbf{H}(\mathbf{r},\omega)\exp(-i\omega t)] \ . \end{aligned} \tag{1.11}$$

Η μέση πυκνότητα ροής ενέργειας μονοχρωματικού αρμονικού ΗΜ κύματος δίνεται από τη χρονική μέση τιμή του διανύσματος Poynting σε διάρκεια μιας περιόδου η οποία, χρησιμοποιώντας τις Εξ. (1.11), γράφεται

$$\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{2}\mathrm{Re}\left[\mathbf{E}(\mathbf{r},\omega) \times \mathbf{H}^*(\mathbf{r},\omega)\right] \ . \tag{1.12}$$

Εξάλλου, με τη βοήθεια της διανυσματικής ταυτότητας (Α′.10), από τις εξισώσεις Maxwell σε ένα μέσο χωρίς πηγές παίρνουμε $\nabla \cdot [\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*] = i\omega[\mathbf{H}^* \cdot \mathbf{B} - \mathbf{E} \cdot \mathbf{D}^*]$ και, ολοκληρώνοντας τη μέση ισχύ που εκρέει από τη μονάδα όγκου, $\nabla \cdot \langle \mathbf{S} \rangle$, σε μια περιοχή όγκου V που περικλείεται από επιφάνεια $A(V)$, χρησιμοποιώντας το θεώρημα της απόκλισης του Gauss, έχουμε

$$\int_{A(V)} d^2r \widehat{\mathbf{n}} \cdot \langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle = -\frac{\omega}{2} \int_V d^2r \mathrm{Im}[\mathbf{H}^*(\mathbf{r},\omega) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r},\omega) - \mathbf{E}(\mathbf{r},\omega) \cdot \mathbf{D}^*(\mathbf{r},\omega)] \ , \tag{1.13}$$

όπου $\widehat{\mathbf{n}}$ το μοναδιαίο διάνυσμα κάθετο στην επιφάνεια που διευθύνεται προς τα έξω. Αν υπάρχουν απώλειες, η ισχύς που εισρέει από την επιφάνεια είναι μικρότερη από αυτήν που εκρέει. Συνεπώς το αριστερό μέλος της Εξ. (1.13) είναι $\leqslant 0$, με την ισότητα να ισχύει όταν δεν έχουμε απώλειες. Επομένως πρέπει

$$\mathrm{Im}[\mathbf{H}^*(\mathbf{r},\omega)\cdot\mathbf{B}(\mathbf{r},\omega)-\mathbf{E}(\mathbf{r},\omega)\cdot\mathbf{D}^*(\mathbf{r},\omega)]\geqslant 0\ . \tag{1.14}$$

Γράφοντας $2\mathrm{Im}z=i(z^*-z)$ και χρησιμοποιώντας τις καταστατικές εξισώσεις (1.7), η ανισότητα (1.14) οδηγεί στη συνθήκη

$$(\mathbf{E}^*,\mathbf{H}^*)\left\{i\left[\begin{pmatrix}\boldsymbol{\epsilon} & \boldsymbol{\xi}\\ \boldsymbol{\zeta} & \boldsymbol{\mu}\end{pmatrix}^{\dagger}-\begin{pmatrix}\boldsymbol{\epsilon} & \boldsymbol{\xi}\\ \boldsymbol{\zeta} & \boldsymbol{\mu}\end{pmatrix}\right]\right\}\begin{pmatrix}\mathbf{E}\\ \mathbf{B}\end{pmatrix}\geq 0\ , \tag{1.15}$$

όπου το σύμβολο † δηλώνει προσαρτημένο πίνακα (μιγαδικό συζυγή του αναστρόφου). Δηλαδή, σε ένα μέσο με απώλειες και χωρίς πηγές, πρέπει ο ερμιτιανός πίνακας εντός του αγκίστρου στην ανισότητα (1.15) να είναι θετικά ορισμένος (όλες του οι ιδιοτιμές να είναι θετικές). Σ' ένα απλό ισοτροπικό και ομοιογενές μέσο, αυτό συνεπάγεται $\mathrm{Im}\epsilon\geq 0$ και $\mathrm{Im}\mu\geq 0$. Σε ένα ομοιογενές μέσο, προφανώς, οι συναρτήσεις απόκρισης δεν εξαρτώνται από τη θέση $\mathbf{r}$. Στη συνέχεια όταν αναφερόμαστε στο πεδίο των συχνοτήτων, για απλότητα, θα παραλείπουμε την εξάρτηση των διαφόρων ποσοτήτων από την γωνιακή συχνότητα ω.

Μια υποκατηγορία των διανισοτροπικών μέσων είναι τα *δισοτροπικά* υλικά, των οποίων οι τανυστές απόκρισης εκφυλίζονται σε βαθμωτά μεγέθη. Τέτοια υλικά είναι οι οπτικά ενεργές ουσίες, οι οποίες χαρακτηρίζονται από χειρόμορφη διάταξη σε μοριακό ή μακροσκοπικό επίπεδο δόμησης και, αν θεωρηθούν ομοιογενείς, μπορούν να περιγραφούν από τρείς μιγαδικές ΗΜ παραμέτρους, στη γενική περίπτωση που υπάρχουν απώλειες, με τις καταστατικές εξισώσεις στο πεδίο των συχνοτήτων [2]

$$\begin{aligned}\mathbf{D}(\mathbf{r})&=\epsilon_L\mathbf{E}(\mathbf{r})+i\gamma\mathbf{H}(\mathbf{r})\\ \mathbf{B}(\mathbf{r})&=-i\gamma\mathbf{E}(\mathbf{r})+\mu_L\mathbf{H}(\mathbf{r})\ .\end{aligned} \tag{1.16}$$

Από τη συνθήκη (1.15) προκύπτουν περιορισμοί: $\mathrm{Im}\epsilon_L+\mathrm{Im}\mu_L\geq 0$ και $\mathrm{Im}\epsilon_L\mathrm{Im}\mu_L\geq(\mathrm{Im}\gamma)^2$ οι οποίοι, εφόσον $(\mathrm{Im}\gamma)^2\geq 0$, είναι ισοδύναμοι με

$$\mathrm{Im}\epsilon_L\geq 0,\ \ \mathrm{Im}\mu_L\geq 0,\ \ \mathrm{Im}\epsilon_L\mathrm{Im}\mu_L\geq(\mathrm{Im}\gamma)^2\ . \tag{1.17}$$

Απουσία χειρομορφίας ($\gamma=0$) καταλήγουμε στους γνωστούς περιορισμούς για τα απλά ισοτροπικά υλικά. Εναλλακτικά, τα δισοτροπικά υλικά μπορούν να περιγραφούν από τις φαινομενολογικές καταστατικές εξισώσεις Drude-Born-Fedorov [3–5] στο πεδίο του χρόνου

$$\begin{aligned}\mathbf{D}(\mathbf{r},t)&=\epsilon_0\epsilon_c[\mathbf{E}(\mathbf{r},t)+\beta_c\nabla\times\mathbf{E}(\mathbf{r},t)]\\ \mathbf{B}(\mathbf{r},t)&=\mu_0\mu_c[\mathbf{H}(\mathbf{r},t)+\beta_c\nabla\times\mathbf{H}(\mathbf{r},t)]\ ,\end{aligned} \tag{1.18}$$

όπου ϵ_0 είναι η ηλεκτρική επιδεκτικότητα και μ_0 η μαγνητική διαπερατότητα του κενού, στις οποίες φαίνεται σαφώς ο μη τοπικός χαρακτήρας με την παρουσία των όρων στροβιλισμού των πεδίων. Για μονοχρωματικά αρμονικά πεδία, μπορεί να δειχθεί απευθείας από τις εξισώσεις Maxwell η πλήρης ισοδυναμία των καταστατικών εξισώσεων (1.16) και (1.18), κάνοντας την αντιστοίχιση

$$\begin{aligned}\epsilon_L&\longleftrightarrow\epsilon_0\epsilon_c/[1-(q_c\beta_c)^2]\\ \mu_L&\longleftrightarrow\mu_0\mu_c/[1-(q_c\beta_c)^2]\\ \gamma&\longleftrightarrow q_c\beta_c\sqrt{\epsilon_0\mu_0\epsilon_c\mu_c}/[1-(q_c\beta_c)^2]\ .\end{aligned} \tag{1.19}$$

όπου $q_c = \omega\sqrt{\epsilon_c\mu_c}/c$ και $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ είναι η ταχύτητα του φωτός στο κενό.

Στην παρούσα διατριβή θα ασχοληθούμε επίσης με μια υποκατηγορία των απλών ανισοτροπικών μέσων, τα *γυροτροπικά* υλικά, στα οποία η ανισοτροπία προκαλείται από την παρουσία ενός στατικού ομοιογενούς μαγνητικού πεδίου. Τέτοια ομοιογενή υλικά, όπως πλάσμα σε μαγνητικό πεδίο ή μαγνητικά υλικά στο ορατό και στο υπέρυθρο, περιγράφονται από ένα σχετικό διηλεκτρικό τανυστή της μορφής

$$\boldsymbol{\epsilon}_g = \epsilon_z \begin{pmatrix} \epsilon_r & -i\epsilon_\kappa & 0 \\ i\epsilon_\kappa & \epsilon_r & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{1.20}$$

(*γυροηλεκτρικά* υλικά) ή, π.χ μαγνητικά υλικά στα μικροκύματα, από έναν τανυστή σχετικής μαγνητικής διαπερατότητας

$$\boldsymbol{\mu}_g = \mu_z \begin{pmatrix} \mu_r & -i\mu_\kappa & 0 \\ i\mu_\kappa & \mu_r & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{1.21}$$

(*γυρομαγνητικά* υλικά) αν το μαγνητικό πεδίο διευθύνεται κατά τον άξονα z. Είναι όμως δυνατό να έχουμε συγχρόνως διηλεκτρική και μαγνητική απόκριση τανυστικής μορφής [6, 7].

1.3 Λύσεις της κυματικής εξίσωσης σε απλά ισοτροπικά ομοιογενή μέσα

Σε ένα απλό ισοτροπικό ομοιογενές μέσο χωρίς πηγές φορτίων και ρευμάτων, το οποίο περιγράφεται από τις καταστατικές εξισώσεις $\mathbf{D} = \epsilon_0\epsilon\mathbf{E}$ και $\mathbf{B} = \mu_0\mu\mathbf{H}$, οι εξισώσεις Maxwell για ένα αρμονικό μονοχρωματικό πεδίο είναι $\nabla\cdot\mathbf{B} = 0$, $\nabla\cdot\mathbf{D} = 0$, $\nabla\times\mathbf{E} = i\omega\mathbf{B}$, $\nabla\times\mathbf{H} = -i\omega\mathbf{D}$. Χρησιμοποιώντας τη διανυσματική ταυτότητα (Α΄.6) καταλήγουμε στην κυματική εξίσωση για το ηλεκτρικό πεδίο

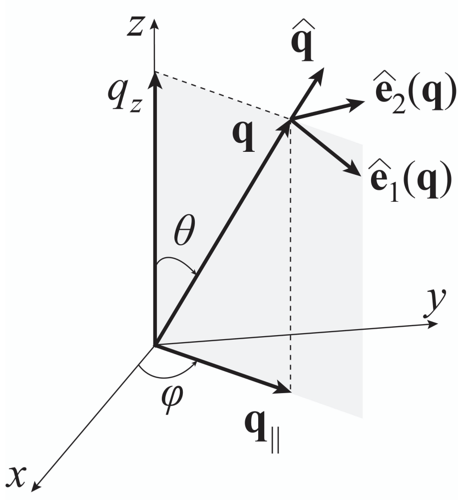
$$\nabla^2\mathbf{E}(\mathbf{r}) + q^2\mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0 \tag{1.22}$$

όπου $q = \omega\sqrt{\epsilon\mu}/c$. Ένα πλήρες σύνολο λύσεων της Εξ. (1.22) αποτελούν τα επίπεδα κύματα

$$\mathbf{E}_{\mathbf{q}\mathrm{p}}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{q})\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}) , \tag{1.23}$$

με $\mathbf{E}_0(\mathbf{q}) = E_0(\mathbf{q})\,\widehat{\mathbf{e}}_\mathrm{p}(\mathbf{q})$, όπου τα $\widehat{\mathbf{e}}_\mathrm{p}(\mathbf{q})$, $\mathrm{p} = 0, 1, 2$ συμβολίζουν το ακτινικό, πολικό και αζιμουθιακό μοναδιαίο διάνυσμα, αντίστοιχα, για ένα δεδομένο κυματάνυσμα $\mathbf{q}$, και καθορίζουν την πόλωση (Σχ. 1.1). Σημειώνεται ότι το διάμηκες κύμα $\widehat{\mathbf{e}}_0(\mathbf{q}) = \widehat{\mathbf{q}}$ αποτελεί λύση μόνο αν $\omega = 0$, ή αν $\epsilon\mu = 0$, και επομένως δεν συνιστά οδεύον κύμα. Μολονότι οι τετριμμένες διαμήκεις λύσεις δεν υπεισέρχονται στην έκφραση ενός (εγκάρσιου) ΗΜ κύματος δεδομένης συχνότητας $\omega \neq 0$, αποτελούν ουσιώδεις μαθηματικές λύσεις της κυματικής εξίσωσης. Το μαγνητικό πεδίο του ΗΜ κύματος υπολογίζεται από το ηλεκτρικό με την εξίσωση Maxwell $\nabla\times\mathbf{E} = i\omega\mathbf{B}$.

Εναλλακτικά, οι λύσεις της κυματικής εξίσωσης (1.22) μπορούν να αναπτυχθούν σε μια πλήρη βάση διανυσματικών σφαιρικών κυμάτων για δεδομένο q. Η βάση αυτή περιλαμβάνει:



Σχήμα 1.1: Τοπικό σύστημα συντεταγμένων και ανάλυση του κυματανύσματος σε συνιστώσες.

(α) Διαμήκεις κυματοσυναρτήσεις ($\nabla \times \mathbf{F}_{Llm} = 0$)

$$\mathbf{F}_{Llm}(\mathbf{r}) = \frac{1}{q}\nabla\left[f_l(qr)Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\right] \ , \quad l = 0, 1, 2, \ldots \ ; m = -l, -l+1, \ldots, l, \tag{1.24}$$

όπου Y_{lm} είναι οι συνήθεις σφαιρικές αρμονικές (βλ. Παράρτημα Β′) και f_l μπορεί να είναι ένας οποιοσδήποτε γραμμικός συνδυασμός των σφαιρικών συναρτήσεων Bessel και Hankel, j_l και h_l^+, αντίστοιχα (βλ. Παράρτημα Γ′).
(β) Εγκάρσιες κυματοσυναρτήσεις ($\nabla \cdot \mathbf{F}_{Hlm} = 0$, $\nabla \cdot \mathbf{F}_{Elm} = 0$)

$$\mathbf{F}_{Hlm}(\mathbf{r}) = f_l(qr)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) \ , \quad l = 1, 2, \ldots \ ; m = -l, -l+1, \ldots, l, \tag{1.25}$$

και

$$\mathbf{F}_{Elm}(\mathbf{r}) = \frac{i}{q}\nabla \times f_l(qr)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) \ , \quad l = 1, 2, \ldots \ ; m = -l, -l+1, \ldots, l, \tag{1.26}$$

όπου $\mathbf{X}_{lm}$ είναι οι διανυσματικές σφαιρικές αρμονικές (βλ. Παράρτημα Β′). Το σύνολο αυτών των διανυσματικών σφαιρικών κυμάτων αποτελεί πλήρη βάση ανάπτυξης οποιουδήποτε διανυσματικού πεδίου. Οι διανυσματικές σφαιρικές κυματοσυναρτήσεις ικανοποιούν τις ακόλουθες διαφορικές εξισώσεις

$$\begin{aligned}
&\nabla \cdot \mathbf{F}_{Llm}(\mathbf{r}) = -qf_l(qr)Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) \\
&\nabla \times \mathbf{F}_{Hlm}(\mathbf{r}) = -iq\mathbf{F}_{Elm}(\mathbf{r}) \\
&\nabla \times \mathbf{F}_{Elm}(\mathbf{r}) = iq\mathbf{F}_{Hlm}(\mathbf{r}) \\
&\nabla \times \nabla \times \mathbf{F}_{Hlm}(\mathbf{r}) = q^2\mathbf{F}_{Hlm}(\mathbf{r}) \\
&\nabla \times \nabla \times \mathbf{F}_{Elm}(\mathbf{r}) = q^2\mathbf{F}_{Elm}(\mathbf{r}) \ ,
\end{aligned} \tag{1.27}$$

καθώς και τις σχέσεις ορθογωνιότητας

$$\begin{aligned}
&\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\, \overline{\mathbf{F}}_{Hlm}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{F}_{El'm'}(\mathbf{r}) = 0 \\
&\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\, \overline{\mathbf{F}}_{Llm}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{F}_{Hl'm'}(\mathbf{r}) = 0 \\
&\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\, \overline{\mathbf{F}}_{Hlm}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{F}_{Hl'm'}(\mathbf{r}) = f_l^2(qr)\delta_{ll'}\delta_{mm'} \\
&\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\, \overline{\mathbf{F}}_{Elm}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{F}_{El'm'}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2l+1}[(l+1)f_{l-1}^2(qr) + l f_{l+1}^2(qr)]\delta_{ll'}\delta_{mm'} \\
&\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\, \overline{\mathbf{F}}_{Llm}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{F}_{Ll'm'}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2l+1}[l f_{l-1}^2(qr) + (l+1) f_{l+1}^2(qr)]\delta_{ll'}\delta_{mm'} \\
&\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\, \overline{\mathbf{F}}_{Llm}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{F}_{El'm'}(\mathbf{r}) = \frac{\psi_l}{2l+1}[f_{l+1}^2(qr) - f_{l-1}^2(qr)]\delta_{ll'}\delta_{mm'} \ ,
\end{aligned} \tag{1.28}$$

όπου $\psi_l = \sqrt{l(l+1)}$ και η παύλα πάνω από μια διανυσματική κυματοσυνάρτηση δηλώνει μιγαδική συζυγία μόνο στο γωνιακό της μέρος.

Η ιδιότητα $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$ σημαίνει ότι το ηλεκτρικό πεδίο μπορεί να αναπτυχθεί στη βάση των εγκάρσιων κυματοσυναρτήσεων $\mathbf{F}_{Hlm}$ και $\mathbf{F}_{Elm}$, χωρίς να υπεισέρχονται οι $\mathbf{F}_{Llm}$. Γράφουμε λοιπόν τη λύση της Εξ. (1.22) ως εξής

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} [a_{Hlm}\mathbf{F}_{Hlm}(\mathbf{r}) + a_{Elm}\mathbf{F}_{Elm}(\mathbf{r})] \ , \tag{1.29}$$

όπου a_{Hlm} και a_{Elm} συντελεστές που έχουν διαστάσεις ηλεκτρικού πεδίου.

Έστω τώρα ένα (εγκάρσιο) επίπεδο κύμα της μορφής (1.23). Δεδομένου ότι ένα τέτοιο κύμα είναι πεπερασμένο παντού στον χώρο, η πολυπολική του ανάπτυξη σε σφαιρικά κύματα δεν μπορεί παρά να περιέχει μόνο τις j_l που είναι πεπερασμένες παντού στο χώρο (βλ. Παράρτημα Γ'). Επομένως

$$\mathbf{E}_{\mathbf{q}\mathrm{p}}(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \left[a_{Hlm}^0 j_l(qr)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) + a_{Elm}^0 \frac{i}{q} \nabla \times j_l(qr)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) \right] \ . \tag{1.30}$$

Γράφουμε τους συντελεστές a_{Plm}^0, $P = H, E$, στη μορφή

$$a_{Plm}^0 = \mathbf{A}_{Plm}^0(\widehat{\mathbf{q}}) \cdot \mathbf{E}_0(\mathbf{q}) \ , \tag{1.31}$$

με τα διανύσματα $\mathbf{A}_{Plm}^0$ να ορίζονται στο επίπεδο των $\widehat{\mathbf{e}}_1$, $\widehat{\mathbf{e}}_2$. Αντικαθιστώντας στην Εξ. (1.30) και κάνοντας χρήση του αναπτύγματος [8]

$$\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) = 4\pi \sum_{lm} i^l j_l(qr) Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) Y_{lm}^*(\widehat{\mathbf{q}}) \tag{1.32}$$

καθώς και σχέσεων του Παραρτήματος Β′, καταλήγουμε στις ακόλουθες εκφράσεις για τα $\mathbf{A}^0_{Plm}$

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}^0_{Hlm}(\widehat{\mathbf{q}}) &= \frac{4\pi i^l\,(-1)^{m+1}}{\psi_l} \\
&\times \Big\{\Big[\alpha_l^m \cos\theta\, e^{i\phi}\, Y_{l-m-1}(\widehat{\mathbf{q}}) + m\sin\theta\, Y_{l-m}(\widehat{\mathbf{q}}) \\
&+ \alpha_l^{-m}\cos\theta\, e^{-i\phi}\, Y_{l-m+1}(\widehat{\mathbf{q}})\Big]\,\widehat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{q}) \\
&+ i\Big[\alpha_l^m\, e^{i\phi}\, Y_{l-m-1}(\widehat{\mathbf{q}}) - \alpha_l^{-m}\, e^{-i\phi}\, Y_{l-m+1}(\widehat{\mathbf{q}})\Big]\,\widehat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{q})\Big\} \\
&= 4\pi i^l\,(-1)^{m+1}\,\mathbf{X}_{l-m}(\widehat{\mathbf{q}})
\end{aligned} \tag{1.33}$$

και

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}^0_{Elm}(\widehat{\mathbf{q}}) &= \frac{4\pi i^l\,(-1)^{m+1}}{\psi_l} \\
&\times \Big\{i\Big[\alpha_l^m\, e^{i\phi}\, Y_{l-m-1}(\widehat{\mathbf{q}}) - \alpha_l^{-m}\, e^{-i\phi}\, Y_{l-m+1}(\widehat{\mathbf{q}})\Big]\,\widehat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{q}) \\
&- \Big[\alpha_l^m \cos\theta\, e^{i\phi}\, Y_{l-m-1}(\widehat{\mathbf{q}}) + m\sin\theta\, Y_{l-m}(\widehat{\mathbf{q}}) \\
&+ \alpha_l^{-m}\cos\theta\, e^{-i\phi}\, Y_{l-m+1}(\widehat{\mathbf{q}})\Big]\,\widehat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{q})\Big\} \\
&= 4\pi i^l\,(-1)^{m+1}\,\mathbf{X}_{l-m}(\widehat{\mathbf{q}}) \times \widehat{\mathbf{q}}\ ,
\end{aligned} \tag{1.34}$$

όπου $\psi_l = \sqrt{l\,(l+1)}$, $\alpha_l^m = [(l-m)\,(l+m+1)]^{1/2}/2$, θ και ϕ είναι οι γωνιακές μεταβλητές του $\mathbf{q}$ και $\widehat{\mathbf{e}}_1$, $\widehat{\mathbf{e}}_2$ είναι, θυμίζουμε, το πολικό και αζιμουθιακό μοναδιαίο διάνυσμα, αντίστοιχα, που είναι κάθετα στο $\mathbf{q}$ στο σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων (βλ. Σχ. 1.1). Σημειώνουμε ότι η συνιστώσα z του κυματανύσματος, q_z, μπορεί να είναι πραγματική ή φανταστική. Στη δεύτερη περίπτωση το $\cos\theta$ στις εκφράσεις των $Y_{lm}(\widehat{\mathbf{q}})$ (βλ. Παράρτημα Β′) αντικαθίσταται από το q_z/q.

1.4 Λύσεις της κυματικής εξίσωσης σε δισοτροπικά ομοιογενή μέσα

Για ένα αρμονικό μονοχρωματικό πεδίο, οι εξισώσεις Maxwell σε ένα δισοτροπικό ομοιογενές μέσο χωρίς πηγές φορτίων και ρευμάτων, το οποίο περιγράφεται από τις καταστατικές εξισώσεις (1.18), μπορούν να γραφούν σε συμπαγή μορφή ως εξής

$$\nabla\cdot\begin{pmatrix}\mathbf{E}\\ \mathbf{H}\end{pmatrix} = 0 \ \text{και}\ \nabla\times\begin{pmatrix}\mathbf{E}\\ \mathbf{H}\end{pmatrix} = \mathbf{K}\begin{pmatrix}\mathbf{E}\\ \mathbf{H}\end{pmatrix}\ , \tag{1.35}$$

όπου

$$\mathbf{K} = \frac{q_c}{1-q_c^2\beta_c^2}\begin{pmatrix} q_c\beta_c & iZ_c \\ -iZ_c^{-1} & q_c\beta_c\end{pmatrix}\ , \tag{1.36}$$

με $Z_c = \sqrt{\mu_0\mu_c/(\epsilon_0\epsilon_c)}$ και $q_c = \omega\sqrt{\epsilon_c\mu_c}/c$. Χρησιμοποιώντας τη διανυσματική ταυτότητα (Α΄.6), καταλήγουμε στην κυματική εξίσωση

$$\nabla^2 \begin{pmatrix} \mathbf{E} \\ \mathbf{H} \end{pmatrix} + \mathbf{K}^2 \begin{pmatrix} \mathbf{E} \\ \mathbf{H} \end{pmatrix} = 0 \ . \tag{1.37}$$

Κάνοντας τώρα ένα γραμμικό μετασχηματισμό του ΗΜ πεδίου [9]

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E} \\ \mathbf{H} \end{pmatrix} = \mathbf{\Lambda} \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_L \\ \mathbf{Q}_R \end{pmatrix} \ , \tag{1.38}$$

με

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} 1 & -iZ_c \\ -iZ_c^{-1} & 1 \end{pmatrix} \ , \tag{1.39}$$

μπορούμε να διαγωνιοποιήσουμε τον πίνακα $\mathbf{K}$

$$\mathbf{\Lambda}^{-1}\mathbf{K}\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} q_L & 0 \\ 0 & -q_R \end{pmatrix} \ , \tag{1.40}$$

όπου $q_L = q_c/(1 - q_c\beta_c)$ και $q_R = q_c/(1 + q_c\beta_c)$, οπότε τα μετασχηματισμένα πεδία (πεδία Beltrami) ικανοποιούν τις εξισώσεις $\nabla\cdot\mathbf{Q}(\mathbf{r}) = 0$, $\nabla\times\mathbf{Q}(\mathbf{r}) = \lambda\mathbf{Q}(\mathbf{r})$, και $\nabla^2\mathbf{Q}(\mathbf{r})+\lambda^2\mathbf{Q}(\mathbf{r}) = 0$, με $\lambda = q_L$ για $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_L$ και $\lambda = -q_R$ για $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_R$. Μπορεί να δειχθεί με απευθείας αντικατάσταση ότι οι εξισώσεις αυτές επιδέχονται ως λύσεις αριστερόστροφα και δεξιόστροφα κυκλικά πολωμένα (LCP και RCP, αντίστοιχα) επίπεδα κύματα[1]

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_L(\mathbf{r}) &= \exp(i\mathbf{q}_L\cdot\mathbf{r})\widehat{\mathbf{e}}_L \\ \mathbf{Q}_R(\mathbf{r}) &= \exp(i\mathbf{q}_R\cdot\mathbf{r})\widehat{\mathbf{e}}_R \ , \end{aligned} \tag{1.41}$$

όπου $\widehat{\mathbf{e}}_L$, $\widehat{\mathbf{e}}_R$ μοναδιαία διανύσματα ορισμένα ως $\widehat{\mathbf{e}}_L = (\widehat{\mathbf{e}}_{1L} + i\widehat{\mathbf{e}}_{2L})/\sqrt{2}$, $\widehat{\mathbf{e}}_R = (\widehat{\mathbf{e}}_{1R} - i\widehat{\mathbf{e}}_{2R})/\sqrt{2}$, με κάθε τριάδα μοναδιαίων διανυσμάτων $(\widehat{\mathbf{e}}_{1L}, \widehat{\mathbf{e}}_{2L}, \widehat{\mathbf{q}}_L)$ και $(\widehat{\mathbf{e}}_{1R}, \widehat{\mathbf{e}}_{2R}, \widehat{\mathbf{q}}_R)$ να ορίζει ένα ορθογώνιο δεξιόστροφο σύστημα όπως στο Σχ. 1.1. Ομοίως, μπορεί να δειχθεί με απευθείας αντικατάσταση, χρησιμοποιώντας τις ιδιότητες (1.27), ότι αντίστοιχες λύσεις σε μορφή σφαιρικών κυμάτων είναι οι $f_l(q_Lr)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) + \frac{1}{q_L}\nabla\times f_l(q_Lr)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}})$ και $f_l(q_Rr)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) - \frac{1}{q_R}\nabla\times f_l(q_Rr)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}})$, αντίστοιχα. Από τα πεδία Beltrami, σε οποιαδήποτε αναπαράσταση, είτε επιπέδων είτε σφαιρικών κυμάτων, μπορεί κανείς να υπολογίσει το ΗΜ πεδίο από την Εξ. (1.38).

1.5 Λύσεις της κυματικής εξίσωσης σε γυροηλεκτρικά ομοιογενή μέσα

Η ΗΜ απόκριση των γυροηλεκτρικών υλικών περιγράφεται από ένα διηλεκτρικό τανυστή $\boldsymbol{\epsilon}_g$ της μορφής (1.20) αν το μαγνητικό πεδίο διευθύνεται κατά τον άξονα z και μια βαθμωτή

[1] Ο δείκτης L εδώ συμβολίζει πόλωση LCP και δεν πρέπει να συγχέεται με το δείκτη L των διαμήκων διανυσματικών σφαιρικών κυματοσυναρτήσεων που ορίστηκαν με την Εξ. (1.24).

σχετική μαγνητική διαπερατότητα μ_g. Ξεκινώντας από τις εξισώσεις Maxwell για το χωρικό μέρος ενός μονοχρωματικού ΗΜ πεδίου γωνιακής συχνότητας ω σε ένα τέτοιο μέσο χωρίς πηγές: $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$, $\nabla \cdot \mathbf{D} = 0$, $\nabla \times \mathbf{E} = i\omega \mathbf{B}$, $\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega \mathbf{D}$ και τις καταστατικές εξισώσεις $\mathbf{B} = \mu_0 \mu_g \mathbf{H}$ και $\mathbf{D} = \epsilon_0 \boldsymbol{\epsilon}_g \mathbf{E}$, καταλήγουμε στην κυματική εξίσωση

$$\nabla \times \nabla \times [\epsilon_z \boldsymbol{\epsilon}_g^{-1} \mathbf{D}(\mathbf{r})] - q_g^2 \mathbf{D}(\mathbf{r}) = 0 \,, \tag{1.42}$$

όπου $q_g^2 = \omega^2 \epsilon_z \mu_g \epsilon_0 \mu_0 = \epsilon_z \mu_g \omega^2 / c^2$.

Θα λύσουμε την Εξ. (1.42) αναπτύσσοντας το κυματικό πεδίο στη συγκεκριμένη βάση διανυσματικών σφαιρικών κυμάτων που ορίσαμε στο Εδάφιο 1.3 με τις Εξ. (1.24), (1.25), και (1.26). Η ιδιότητα $\nabla \cdot \mathbf{D} = 0$ σημαίνει ότι η ηλεκτρική μετατόπιση μπορεί να αναπτυχθεί στη βάση των εγκάρσιων κυματοσυναρτήσεων $\mathbf{F}_{Hlm}$ και $\mathbf{F}_{Elm}$, χωρίς να υπεισέρχονται οι $\mathbf{F}_{Llm}$. Γράφουμε λοιπόν τη λύση της Εξ. (1.42) ως εξής

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \frac{q^2}{q_g^2} \epsilon_0 \epsilon_z \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \Big[a_{Hlm} \mathbf{F}_{Hlm}(\mathbf{r}) + a_{Elm} \mathbf{F}_{Elm}(\mathbf{r}) \Big] \,, \tag{1.43}$$

όπου a_{Hlm}, a_{Elm} είναι κατάλληλοι συντελεστές που έχουν διαστάσεις ηλεκτρικού πεδίου. Ο παράγοντας $q^2 \epsilon_0 \epsilon_z / q_g^2$ είναι, προς το παρόν, αυθαίρετος. Εισάγεται όμως εδώ γιατί έτσι θα καταλήξουμε, όπως θα δούμε αργότερα, σε μια απλή μορφή για τις μαγνητικές και ηλεκτρικές πολυπολικές συνιστώσες του ΗΜ πεδίου, ίδια με αυτή που έχουμε στην περίπτωση απλών ισοτροπικών υλικών. Μπορεί να δειχθεί ότι

$$\begin{aligned} \epsilon_z \boldsymbol{\epsilon}_g^{-1} \mathbf{D}(\mathbf{r}) = {} & \frac{q^2}{q_g^2} \epsilon_0 \epsilon_z \overline{w}_{00} \mathbf{F}_{L00}(\mathbf{r}) \\ & + \frac{q^2}{q_g^2} \epsilon_0 \epsilon_z \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \Big[\overline{w}_{lm} \mathbf{F}_{Llm}(\mathbf{r}) + \overline{d}_{lm} \mathbf{F}_{Hlm}(\mathbf{r}) + \overline{c}_{lm} \mathbf{F}_{Elm}(\mathbf{r}) \Big], \end{aligned} \tag{1.44}$$

όπου

$$\begin{aligned} \overline{w}_{00} &= -\sqrt{\frac{2}{3}} \epsilon'_\kappa a_{H10} - \sqrt{\frac{2}{15}} \overline{\epsilon}'_r a_{E20} \\ \overline{w}_{lm} &= \sum_{l'=1}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} \left(\tilde{f}_{lm}^{l'm'} a_{Hl'm'} + \overline{f}_{lm}^{l'm'} a_{El'm'} \right) \\ \overline{d}_{lm} &= \sum_{l'=1}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} \left(\tilde{g}_{lm}^{l'm'} a_{Hl'm'} + \overline{g}_{lm}^{l'm'} a_{El'm'} \right) \\ \overline{c}_{lm} &= \sum_{l'=1}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} \left(\tilde{e}_{lm}^{l'm'} a_{Hl'm'} + \overline{e}_{lm}^{l'm'} a_{El'm'} \right) \,, \end{aligned} \tag{1.45}$$

με $\overline{\epsilon}'_r = \epsilon'_r - 1, \epsilon'_r = \epsilon_r / (\epsilon_r^2 - \epsilon_\kappa^2), \epsilon'_\kappa = -\epsilon_\kappa / (\epsilon_r^2 - \epsilon_\kappa^2)$. Αναλυτικές εκφράσεις για τους συντελεστές $\tilde{g}_{lm}^{l'm'}$, $\overline{g}_{lm}^{l'm'}$, $\tilde{e}_{lm}^{l'm'}$, $\overline{e}_{lm}^{l'm'}$, $\tilde{f}_{lm}^{l'm'}$, $\overline{f}_{lm}^{l'm'}$ αποδεικνύονται στο Παράρτημα Δ′.

Αντικαθιστώντας τις Εξ. (1.43) και (1.44) στην κυματική εξίσωση (1.42) και λαμβάνοντας υπόψη τις Εξ. (1.27) καταλήγουμε στη σχέση

$$\sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\left[\left(q^2\overline{d}_{lm}-q_g^2a_{Hlm}\right)\mathbf{F}_{Hlm}(\mathbf{r})+\left(q^2\overline{c}_{lm}-q_g^2a_{Elm}\right)\mathbf{F}_{Elm}(\mathbf{r})\right]=0\ , \tag{1.46}$$

που μας δίνει την εξής εξίσωση ιδιοτιμών

$$\sum_{P'=H,E}\sum_{l'=1}^{\infty}\sum_{m'=-l'}^{l'}A_{Plm;P'l'm'}a_{P'l'm'}=\frac{q_g^2}{q^2}a_{Plm}\ , \tag{1.47}$$

όπου $A_{Hlm;Hl'm'}=\tilde{g}_{lm}^{l'm'}$, $A_{Hlm;El'm'}=\overline{g}_{lm}^{l'm'}$, $A_{Elm;Hl'm'}=\tilde{e}_{lm}^{l'm'}$, $A_{Elm;El'm'}=\overline{e}_{lm}^{l'm'}$. Αφού η Εξ. (1.42) ικανοποιείται αν η ηλεκτρική μετατόπιση έχει τη μορφή της Εξ. (1.43) με τους συντελεστές του αναπτύγματος να δίνονται από κάθε $j=1,2,\ldots$ ιδιοδιάνυσμα $a_{Plm;j}$ του πίνακα A και διανυσματικά σφαιρικά κύματα κυματαριθμού q_j που ορίζεται από την αντίστοιχη ιδιοτιμή, η γενική λύση για την ηλεκτρική μετατόπιση μπορεί να γραφεί στη μορφή

$$\mathbf{D}(\mathbf{r})=\sum_j b_j\frac{q_j^2}{q_g^2}\epsilon_0\epsilon_z\sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\left[a_{Hlm;j}\mathbf{F}_{Hlm}(\mathbf{r})+a_{Elm;j}\mathbf{F}_{Elm}(\mathbf{r})\right]\ , \tag{1.48}$$

όπου οι συντελεστές του αναπτύγματος b_j προσδιορίζονται, εν γένει, από τις συνοριακές συνθήκες.

Με την ηλεκτρική μετατόπιση να δίνεται από την Εξ. (1.48), χρησιμοποιώντας τις καταστατικές εξισώσεις, τις Εξ. (1.44) έως (1.47) και την εξίσωση Maxwell $\mathbf{H}=\frac{-i}{\omega\mu_0\mu_g}\nabla\times\mathbf{E}$ προκύπτει ότι τα πεδία $\mathbf{E}$ και $\mathbf{H}$ παίρνουν τη μορφή

$$\mathbf{E}(\mathbf{r})=\sum_j b_j\left\{\frac{q_j^2}{q_g^2}\overline{w}_{00;j}\mathbf{F}_{L00}(\mathbf{r})\right.$$
$$\left.+\sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\left[\frac{q_j^2}{q_g^2}\overline{w}_{lm;j}\mathbf{F}_{Llm}(\mathbf{r})+a_{Hlm;j}\mathbf{F}_{Hlm}(\mathbf{r})+a_{Elm;j}\mathbf{F}_{Elm}(\mathbf{r})\right]\right\} \tag{1.49}$$

και

$$\mathbf{H}(\mathbf{r})=\sum_j b_j\frac{q_j}{\omega\mu_0\mu_g}\sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\left[a_{Elm;j}\mathbf{F}_{Hlm}(\mathbf{r})-a_{Hlm;j}\mathbf{F}_{Elm}(\mathbf{r})\right]\ ,$$

αντίστοιχα, όπου $\overline{w}_{lm;j}=\sum_{l'=1}^{\infty}\sum_{m'=-l'}^{l'}\left(\tilde{f}_{lm}^{l'm'}a_{Hl'm';j}+\overline{f}_{lm}^{l'm'}a_{El'm';j}\right)$ και $\overline{w}_{00;j}=-\sqrt{\frac{2}{3}}\epsilon'_\kappa a_{H10;j}-\sqrt{\frac{2}{15}}\overline{\epsilon}'_r a_{E20;j}$.

1.6 Λύσεις της κυματικής εξίσωσης σε γυρομαγνητικά ομοιογενή μέσα

Ακολουθώντας εντελώς ανάλογη διαδικασία όπως στα γυροηλεκτρικά μέσα, σε ένα γυρομαγνητικό υλικό που περιγράφεται από μια σχετική διηλεκτρική σταθερά ϵ_g και έναν τανυστή σχετικής μαγνητικής διαπερατότητας της μορφής (1.21) αν το μαγνητικό πεδίο διευθύνεται κατά τον άξονα z, καταλήγουμε στην κυματική εξίσωση για τη μαγνητική επαγωγή

$$\nabla \times \nabla \times [\mu_z \boldsymbol{\mu}_g^{-1} \mathbf{B}(\mathbf{r})] - q_g^2 \mathbf{B}(\mathbf{r}) = 0 \ , \tag{1.50}$$

όπου $q_g^2 = \omega^2 \epsilon_g \mu_z \epsilon_0 \mu_0 = \epsilon_g \mu_z \omega^2 / c^2$. Εφόσον $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$, στη βάση των διανυσματικών σφαιρικών κυμάτων γράφουμε

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{q}{\omega} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \Big[a_{Elm} \mathbf{F}_{Hlm}(\mathbf{r}) - a_{Hlm} \mathbf{F}_{Elm}(\mathbf{r}) \Big], \tag{1.51}$$

όπου a_{Elm}, a_{Hlm} είναι κατάλληλοι συντελεστές που έχουν διαστάσεις ηλεκτρικού πεδίου. Μπορεί να δειχθεί ότι

$$\mu_z \boldsymbol{\mu}_g^{-1} \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{q}{\omega} \left\{ \overline{\overline{w}}_{00} \mathbf{F}_{L00}(\mathbf{r}) + \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \Big[\overline{\overline{w}}_{lm} \mathbf{F}_{Llm}(\mathbf{r}) + \overline{\overline{d}}_{lm} \mathbf{F}_{Hlm}(\mathbf{r}) + \overline{\overline{c}}_{lm} \mathbf{F}_{Elm}(\mathbf{r}) \Big] \right\} , \tag{1.52}$$

όπου

$$\begin{aligned}
\overline{\overline{w}}_{00} &= \sqrt{\frac{2}{15}} \overline{\mu}_r' a_{H20} - \sqrt{\frac{2}{3}} \mu_\kappa' a_{E10} \\
\overline{\overline{w}}_{lm} &= \sum_{l'=1}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} (\tilde{\overline{f}}_{lm}^{l'm'} a_{El'm'} - \overline{\overline{f}}_{lm}^{l'm'} a_{Hl'm'}) \\
\overline{\overline{d}}_{lm} &= \sum_{l'=1}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} (\tilde{\overline{g}}_{lm}^{l'm'} a_{El'm'} - \overline{\overline{g}}_{lm}^{l'm'} a_{Hl'm'}) \\
\overline{\overline{c}}_{lm} &= \sum_{l'=1}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} (\tilde{\overline{e}}_{lm}^{l'm'} a_{El'm'} - \overline{\overline{e}}_{lm}^{l'm'} a_{Hl'm'}) \ ,
\end{aligned} \tag{1.53}$$

με $\overline{\mu}_r' = \mu_r' - 1, \mu_r' = \mu_r / (\mu_r^2 - \mu_\kappa^2), \mu_\kappa' = -\mu_\kappa / (\mu_r^2 - \mu_\kappa^2)$. Αναλυτικές εκφράσεις για τους συντελεστές $\tilde{\overline{g}}_{lm}^{l'm'}$, $\overline{\overline{g}}_{lm}^{l'm'}$, $\tilde{\overline{e}}_{lm}^{l'm'}$, $\overline{\overline{e}}_{lm}^{l'm'}$, $\tilde{\overline{f}}_{lm}^{l'm'}$, $\overline{\overline{f}}_{lm}^{l'm'}$ αποδεικνύονται στο Παράρτημα Ε΄. Αντικαθιστώντας τις (1.51) και (1.52) στην κυματική εξίσωση (1.50) και λαμβάνοντας υπόψη τις Εξ. (1.27) καταλήγουμε στη σχέση

$$\sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \left\{ \Big[q^2 \overline{\overline{d}}_{lm} - q_g^2 a_{Elm} \Big] \mathbf{F}_{Hlm}(\mathbf{r}) + \big[q^2 \overline{\overline{c}}_{lm} + q_g^2 a_{Hlm} \big] \mathbf{F}_{Elm}(\mathbf{r}) \right\} = 0, \tag{1.54}$$

η οποία οδηγεί στην εξίσωση ιδιοτιμών

$$\sum_{P'=H,E} \sum_{l'=1}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} A_{Plm;P'l'm'} a_{P'l'm'} = \frac{q_g^2}{q^2} a_{Plm} \ , \tag{1.55}$$

όπου $A_{Hlm;Hl'm'} = \bar{\bar{e}}_{lm}^{l'm'}$, $A_{Hlm;El'm'} = -\tilde{\tilde{e}}_{lm}^{l'm'}$, $A_{Elm;Hl'm'} = -\bar{\bar{g}}_{lm}^{l'm'}$, $A_{Elm;El'm'} = \tilde{\tilde{g}}_{lm}^{l'm'}$. Αφού η Εξ. (1.50) ικανοποιείται από την Εξ. (1.51) με τους συντελεστές του αναπτύγματος να δίνονται από κάθε $j = 1, 2, \ldots$ ιδιοδιάνυσμα $a_{Plm;j}$ του πίνακα A και διανυσματικά σφαιρικά κύματα κυματαριθμού q_j που ορίζεται από την αντίστοιχη ιδιοτιμή, η γενική λύση για τη μαγνητική επαγωγή μπορεί να γραφεί στη μορφή

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \sum_j b_j \frac{q_j}{\omega} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \left[a_{Elm;j} \mathbf{F}_{Hlm}(\mathbf{r}) - a_{Hlm;j} \mathbf{F}_{Elm}(\mathbf{r}) \right], \tag{1.56}$$

όπου οι συντελεστές ανάπτυξης b_j υπολογίζονται, εν γένει, από τις συνοριακές συνθήκες. Με τη μαγνητική επαγωγή να δίνεται από την Εξ. (1.56), χρησιμοποιώντας τις καταστατικές εξισώσεις, τις Εξ. (1.52) έως (1.55) και την εξίσωση Maxwell $\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega \mathbf{D}$ προκύπτει ότι τα πεδία $\mathbf{H}$ και $\mathbf{E}$ παίρνουν τη μορφή

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \sum_j b_j \frac{\omega \epsilon_g \epsilon_0}{q_j} \Bigg\{ & \frac{q_j^2}{q_g^2} \bar{\bar{w}}_{00;j} \mathbf{F}_{L00}(\mathbf{r}) \\ + \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} & \left[\frac{q_j^2}{q_g^2} \bar{\bar{w}}_{lm;j} \mathbf{F}_{Llm}(\mathbf{r}) + a_{Elm;j} \mathbf{F}_{Hlm}(\mathbf{r}) - a_{Hlm;j} \mathbf{F}_{Elm}(\mathbf{r}) \right] \Bigg\} \end{aligned} \tag{1.57}$$

και

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_j b_j \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \Big[a_{Hlm;j} \mathbf{F}_{Hlm}(\mathbf{r}) + a_{Elm;j} \mathbf{F}_{Elm}(\mathbf{r}) \Big],$$

αντίστοιχα, όπου $\bar{\bar{w}}_{lm;j} = \sum_{l'=1}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} \left(\tilde{\tilde{f}}_{lm}^{l'm'} a_{El'm';j} - \bar{\bar{f}}_{lm}^{l'm'} a_{Hl'm';j} \right)$ και $\bar{\bar{w}}_{00;j} = \sqrt{\frac{2}{15}} \overline{\mu}'_r a_{H20;j} - \sqrt{\frac{2}{3}} \mu'_\kappa a_{E10;j}$.

1.7 Η κυματική εξίσωση ως πρόβλημα ιδιοτιμών

Στην περίπτωση ενός απλού ισοτροπικού, εν γένει ανομοιογενούς, μέσου που δεν παρουσιάζει διασπορά [$\epsilon(\mathbf{r};\omega) = \epsilon(\mathbf{r})$, $\mu(\mathbf{r};\omega) = \mu(\mathbf{r})$] ούτε απώλειες [$\epsilon(\mathbf{r})$, $\mu(\mathbf{r}) \in \Re$], η κυματική εξίσωση για το χωρικό μέρος του ηλεκτρικού πεδίου μπορεί να γραφεί στη μορφή

$$c^2 \frac{1}{\sqrt{\epsilon(\mathbf{r})}} \nabla \times \frac{1}{\mu(\mathbf{r})} \nabla \times \frac{1}{\sqrt{\epsilon(\mathbf{r})}} \sqrt{\epsilon(\mathbf{r})}\, \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \omega^2 \sqrt{\epsilon(\mathbf{r})}\, \mathbf{E}(\mathbf{r}) \ . \tag{1.58}$$

Ορίζοντας

$$\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{r}) = c^2 \frac{1}{\sqrt{\epsilon(\mathbf{r})}} \nabla \times \frac{1}{\mu(\mathbf{r})} \nabla \times \frac{1}{\sqrt{\epsilon(\mathbf{r})}} \ , \tag{1.59}$$

η Εξ. (1.58) γράφεται

$$\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{r}) \sqrt{\epsilon(\mathbf{r})}\, \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \omega^2 \sqrt{\epsilon(\mathbf{r})}\, \mathbf{E}(\mathbf{r}) \ , \tag{1.60}$$

που δεν είναι παρά μια εξίσωση ιδιοτιμών του τελεστή $\widehat{\Lambda}$ με ιδιοδιανύσματα $\sqrt{\epsilon}\,\mathbf{E}$ και ιδιοτιμές ω^2. O $\widehat{\Lambda}$ είναι ένας γραμμικός τανυστικός (δεύτερης τάξης) διαφορικός τελεστής που δρα στο χώρο Hilbert των τετραγωνικά ολοκληρώσιμων διανυσματικών συναρτήσεων. Το εσωτερικό γινόμενο δύο οποιωνδήποτε τέτοιων συναρτήσεων, $\mathbf{v}$ και $\mathbf{w}$, ορίζεται ως

$$(\mathbf{v},\mathbf{w}) = \int_V d^3r\; \mathbf{v}^*(\mathbf{r})\cdot\mathbf{w}(\mathbf{r}) \; . \tag{1.61}$$

O $\widehat{\Lambda}$ είναι ερμιτιανός, δηλαδή

$$(\mathbf{v},\mathbf{\Lambda w}) = (\mathbf{\Lambda v},\mathbf{w}) \; . \tag{1.62}$$

Για την απόδειξη της Εξ. (1.62) αρκεί κανείς να χρησιμοποιήσει τον ορισμό του εσωτερικού γινομένου και να εκτελέσει τις ολοκληρώσεις κατά μέρη, μηδενίζοντας τους επιφανειακούς όρους με κατάλληλη επιλογή των συνοριακών συνθηκών. Εφόσον ο τελεστής $\widehat{\Lambda}$ είναι ερμιτιανός, οι ιδιοτιμές του θα είναι πραγματικές και οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις θα αποτελούν μια πλήρη και ορθοκανονική βάση. Αυτές οι δύο ιδιότητες εκφράζονται μέσω των εξισώσεων

$$\sum_\alpha |\mathcal{C}_0|^2 \sqrt{\epsilon(\mathbf{r})}\; E^*_{\alpha;i}(\mathbf{r})\sqrt{\epsilon(\mathbf{r}')}\; E_{\alpha;i'}(\mathbf{r}') = \delta_{ii'}\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right) \; , \tag{1.63}$$

$$\sum_i \int_V d^3r\, |\mathcal{C}_0|^2\, \epsilon(\mathbf{r}) E^*_{\alpha;i}(\mathbf{r}) E_{\alpha';i}(\mathbf{r}) = \delta_{\alpha\alpha'} \; , \tag{1.64}$$

όπου ο δείκτης α χαρακτηρίζει τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του $\widehat{\Lambda}$ και $\mathcal{C}_0$ είναι συντελεστής κανονικοποίησης.

Υιοθετώντας το συμβολισμό Dirac η εξίσωση ιδιοτιμών Εξ. (1.60) γράφεται

$$\widehat{\Lambda}\,|\alpha\rangle = \omega^2_\alpha\,|\alpha\rangle \; , \tag{1.65}$$

ενώ οι ιδιότητες πληρότητας και ορθοκανονικότητας παίρνουν τη μορφή

$$\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = \widehat{I} \tag{1.66}$$

και

$$\langle\alpha\,|\alpha'\rangle = \delta_{\alpha\alpha'} \; , \tag{1.67}$$

όπου $\widehat{I}$ είναι ο ταυτοτικός τελεστής. Χρησιμοποιώντας την αναπαράσταση $|i\mathbf{r}\rangle \equiv |i\rangle \otimes |\mathbf{r}\rangle$ (όπου i συνιστώσα διανύσματος και $\mathbf{r}$ διάνυσμα θέσης) για την προβολή των διανυσμάτων του χώρου Hilbert, έχουμε

$$\langle i\mathbf{r}\,|\alpha\rangle = |\mathcal{C}_0|\,\sqrt{\epsilon(\mathbf{r})}\; E_{\alpha;i}(\mathbf{r}) \tag{1.68}$$

και

$$\langle i\mathbf{r}\left|\widehat{\Lambda}\right| i'\mathbf{r}'\rangle = \Lambda_{ii'}(\mathbf{r})\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right) \; , \tag{1.69}$$

με την τελευταία να αντανακλά το γεγονός ότι ο $\widehat{\Lambda}$ είναι τοπικός τελεστής. Αξιοποιώντας την πληρότητα και ορθοκανονικότητα της αναπαράστασης $|i\mathbf{r}\rangle$,

$$\sum_i \int_V d^3r\,|i\mathbf{r}\rangle\langle i\mathbf{r}| = \widehat{I} \; , \tag{1.70}$$

$$\langle i\mathbf{r} \left| i'\mathbf{r}' \right\rangle = \delta_{ii'}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \ , \tag{1.71}$$

μπορεί να δειχθεί απευθείας ότι οι Εξ. (1.65), (1.66) και (1.67) δίνουν τις Εξ. (1.60), (1.63) και (1.64), αντίστοιχα.

Η επίλυση της διαφορικής κυματικής εξίσωσης του ΗΜ πεδίου στην περίπτωση περίπλοκων συνοριακών συνθηκών ή επιπλέον διαταραχής απλοποιείται σημαντικά χρησιμοποιώντας τη συνάρτηση Green. Σε τελεστική μορφή, η συνάρτηση Green που αντιστοιχεί στον τελεστή $\widehat{\Lambda}$, συναρτήσει μιας μιγαδικής μεταβλητής z, ορίζεται από την εξίσωση

$$\left(z-\widehat{\Lambda}\right)\widehat{G}\left(z\right)=\widehat{I} \ , \tag{1.72}$$

η οποία στην αναπαράσταση $|i\mathbf{r}\rangle$ παίρνει τη μορφή

$$\sum_i \left[z\delta_{i''i}-\Lambda_{i''i}(\mathbf{r})\right] G_{ii'}(\mathbf{r},\mathbf{r}';z) = \delta_{i''i'}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \ , \tag{1.73}$$

όπου $G_{ii'}(\mathbf{r},\mathbf{r}';z) \equiv \langle i\mathbf{r} \left| \widehat{G}(z) \right| i'\mathbf{r}'\rangle$.

Αν $|\alpha\rangle$ είναι μια πλήρης και ορθοκανονική βάση ιδιοσυναρτήσεων του $\widehat{\Lambda}$, και ω_α^2 οι αντίστοιχες ιδιοτιμές, μπορούμε να γράψουμε

$$\widehat{G}(z) = \sum_\alpha \frac{|\alpha\rangle\langle\alpha|}{z^2-\omega_\alpha^2} \ , \tag{1.74}$$

που είναι η λεγόμενη *φασματική αναπαράσταση* του τελεστή Green. Στην παραπάνω έκφραση σκοπίμως αντικαταστήσαμε το z με z^2 για να απλοποιήσουμε τις σχέσεις που προκύπτουν στη συνέχεια. Στην αναπαράσταση $|i\mathbf{r}\rangle$ η Εξ. (1.74) γράφεται

$$\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}';z) = \sum_\alpha \frac{|\mathcal{C}_0|^2 \sqrt{\epsilon(\mathbf{r})}\ \mathbf{E}_\alpha(\mathbf{r})\sqrt{\epsilon(\mathbf{r}')}\ \mathbf{E}^*_\alpha(\mathbf{r}')}{z^2-\omega_\alpha^2} \ , \tag{1.75}$$

όπου η παράθεση δύο διανυσμάτων υπονοεί τανυστικό γινόμενο, δηλαδή $(\mathbf{ab})_{ij}=a_ib_j$. Από την Εξ. (1.75) είναι φανερό ότι η συνάρτηση Green είναι αναλυτική στο μιγαδικό επίπεδο z, εκτός από εκείνα τα σημεία του θετικού άξονα των πραγματικών αριθμών που ταυτίζονται με τις ιδιοτιμές του $\widehat{\Lambda}$. Σημειώνεται ότι προκειμένου να διασφαλιστεί η αρχή της αιτιότητας θα πρέπει η αποφυγή των πόλων της συνάρτησης Green να γίνει θεωρώντας ότι η συχνότητα περιέχει ένα απειροστό φανταστικό μέρος ($\omega \to \omega + i\epsilon$). Η διαδικασία αυτή δεν θα δηλώνεται ρητά αλλά θα υπονοείται στο εξής.

1.8 Η συνάρτηση Green απλού ισοτροπικού μέσου σε αναπαράσταση επιπέδων κυμάτων

Θα υπολογίσουμε τη συνάρτηση Green για ένα απλό ισοτροπικό ομοιογενές μέσο, σχετικής διηλεκτρικής σταθεράς ϵ και μαγνητικής διαπερατότητας μ. Σε αυτή την περίπτωση η Εξ. (1.58) γράφεται

$$\frac{c^2}{\epsilon\mu}\nabla\times\nabla\times\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \omega^2\mathbf{E}(\mathbf{r}) \ . \tag{1.76}$$

Θα βασιστούμε στη φασματική αναπαράσταση, Εξ. (1.75), αφού πρώτα προσδιορίσουμε το σύνολο των ιδιοδιανυσμάτων $\sqrt{\epsilon}\,\mathbf{E}_\alpha$, καθώς και το δείκτη α των ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων στην εξίσωση (1.76). Θεωρούμε ως ιδιοδιανύσματα επίπεδα κύματα, εγκάρσια και διαμήκη, τα οποία συνιστούν μια πλήρη και ορθοκανονική βάση. Ο δείκτης α, που χαρακτηρίζει τις ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις, υποδηλώνει εδώ την πόλωση $\mathrm{p} = 0, 1, 2$ του ΗΜ κύματος και το κυματάνυσμά του, $\mathbf{q}$. Τονίζουμε πως τα επίπεδα κύματα δεν χαρακτηρίζονται από την τιμή της συχνότητας: για δεδομένη τιμή του $\mathbf{q} = q\,\widehat{\mathbf{e}}_0(\mathbf{q})$, τα διαμήκη κύματα ($\mathrm{p} = 0$) αντιστοιχούν σε ιδιοσυχνότητα μηδέν και τα εγκάρσια ($\mathrm{p} = 1, 2$, για πόλωση TM και TE, αντίστοιχα) σε ιδιοσυχνότητα $cq/\sqrt{\epsilon\mu}$. Γράφουμε τις ιδιοσυναρτήσεις στην αδιαστατοποιημένη μορφή

$$\mathcal{C}_0\sqrt{\epsilon V}\,\mathbf{E}_{\mathbf{q}\mathrm{p}}(\mathbf{r}) = \widehat{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}}(\mathbf{q})\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})\ , \tag{1.77}$$

όπου V ο όγκος του συστήματος και $\mathcal{C}_0$ σταθερά κατάλληλων διαστάσεων ώστε το $[\mathcal{C}_0\sqrt{\epsilon V}]^{-1}$ να εκφράζει το μέτρο του επιπέδου κύματος. Οι σχέσεις πληρότητας και ορθογωνιότητας πρέπει να τροποποιηθούν ώστε να συμπεριλάβουν το συνεχές των ιδιοτιμών καθώς και τον εκφυλισμό (κύματα που έχουν το ίδιο q, αλλά διαφορετικά $\widehat{\mathbf{q}}$ και p). Η άθροιση σε διακριτή μεταβλητή, όπως υπονοείται στις εξισώσεις (1.63) και (1.64), μπορεί να μετατραπεί σε ολοκλήρωμα στη συνεχή μεταβλητή $\mathbf{q}$ με βάση την αντιστοιχία $\sum_{\mathbf{q}} \to [V/(2\pi)^3]\int d^3q$ και άθροιση στη διακριτή μεταβλητή p. Έτσι οι Εξ. (1.63) και (1.64) παίρνουν τη μορφή

$$\frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3q\,|\mathcal{C}_0|^2\,\epsilon\sum_{\mathrm{p}} E^*_{\mathbf{q}\mathrm{p},i}(\mathbf{r})E_{\mathbf{q}\mathrm{p},i'}(\mathbf{r}') = \delta_{ii'}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{1.78}$$

και

$$\sum_i\int d^3r\,|\mathcal{C}_0|^2\,\epsilon E^*_{\mathbf{q}\mathrm{p},i}(\mathbf{r})E_{\mathbf{q}'\mathrm{p}',i}(\mathbf{r}) = \frac{(2\pi)^3}{V}\delta_{\mathrm{pp}'}\delta(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\ , \tag{1.79}$$

αντίστοιχα. Οι παραπάνω σχέσεις είναι πολύ εύκολο να αποδειχθούν για τα επίπεδα κύματα αν λάβει κανείς υπόψη τις αναπαραστάσεις $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = (2\pi)^{-3}\int d^3q\exp(i\mathbf{q}\cdot[\mathbf{r}-\mathbf{r}'])$, ή, ισοδύναμα, $\delta(\mathbf{q}-\mathbf{q}') = (2\pi)^{-3}\int d^3r\exp(i[\mathbf{q}-\mathbf{q}']\cdot\mathbf{r})$, της συνάρτησης δ του Dirac.

Από την Εξ. (1.75), μέσω της Εξ. (1.77), προκύπτει η παρακάτω έκφραση για τη συνάρτηση Green στην αναπαράσταση επίπεδων κυμάτων

$$\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega) = \int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\sum_{\mathrm{p}=0}^{2}\widehat{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}}(\mathbf{q})\widehat{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}}(\mathbf{q})\frac{\exp(i\mathbf{q}\cdot[\mathbf{r}-\mathbf{r}'])}{\omega^2-\omega^2_{\mathrm{p}\mathbf{q}}}\ . \tag{1.80}$$

Όμως ισχύει $\sum_{\mathrm{p}=0}^{2}\widehat{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}}(\mathbf{q})\widehat{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}}(\mathbf{q}) = \mathbf{I}$, όπου $\mathbf{I}$ ο μοναδιαίος πίνακας 3×3, οπότε $\sum_{\mathrm{p}=1}^{2}\widehat{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}}(\mathbf{q})\widehat{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}}(\mathbf{q}) = \mathbf{I}-\widehat{\mathbf{q}}\widehat{\mathbf{q}}$. Έτσι προκύπτει

$$\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega) = \frac{1}{\omega^2}\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{\mathbf{qq}-\mathbf{I}\kappa^2}{q^2-\kappa^2}\exp(i\mathbf{q}\cdot[\mathbf{r}-\mathbf{r}'])\ , \tag{1.81}$$

όπου $\kappa = \omega\sqrt{\epsilon\mu}/c$.

Είναι χρήσιμο να επεξεργαστούμε την έκφραση της συνάρτησης Green στην περίπτωση που θεωρούμε ότι υπάρχει μια προτιμητέα διεύθυνση στο σύστημα, π.χ. ο άξονας ανάπτυξης z

των περιοδικών δομών στο πλαίσιο της μεθόδου στρωματικής πολλαπλής σκέδασης. Σε αυτή την περίπτωση γράφουμε $\mathbf{q} = \mathbf{q}_{\parallel} + q_z\widehat{\mathbf{z}}$, οπότε η Εξ. (1.81) γράφεται

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega) &= \frac{\widehat{\mathbf{z}}\widehat{\mathbf{z}}}{\omega^2}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + \frac{1}{\omega^2}\int \frac{d^2q_{\parallel}}{(2\pi)^2}\exp(i\mathbf{q}_{\parallel}\cdot[\mathbf{r}_{\parallel}-\mathbf{r}'_{\parallel}]) \\ &\times \left\{ \left[\mathbf{q}_{\parallel}\mathbf{q}_{\parallel} - \mathbf{I}\kappa^2 + \left(\kappa^2 - q_{\parallel}^2\right)\widehat{\mathbf{z}}\widehat{\mathbf{z}}\right] \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_z}{2\pi}\frac{\exp(iq_z[z-z'])}{q_{\parallel}^2+q_z^2-\kappa^2} \right. \\ &+ \left. \left(\mathbf{q}_{\parallel}\widehat{\mathbf{z}} + \widehat{\mathbf{z}}\mathbf{q}_{\parallel}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq_z}{2\pi}\frac{q_z\exp(iq_z[z-z'])}{q_{\parallel}^2+q_z^2-\kappa^2} \right\} . \end{aligned} \tag{1.82}$$

Υπολογίζοντας με τη βοήθεια του λήμματος Jordan [8] τα δύο ολοκληρώματα ως προς q_z (βλ. επίσης Παράρτημα ϛ′), βρίσκουμε

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega) &= \frac{\widehat{\mathbf{z}}\widehat{\mathbf{z}}}{\omega^2}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + \frac{i}{2\omega^2}\int \frac{d^2q_{\parallel}}{(2\pi)^2}\frac{\exp(i\mathbf{q}_{\parallel}\cdot[\mathbf{r}_{\parallel}-\mathbf{r}'_{\parallel}] + i\sqrt{\kappa^2-q_{\parallel}^2}\,|z-z'|)}{\sqrt{\kappa^2-q_{\parallel}^2}} \\ &\times \left[\mathbf{q}_{\parallel}\mathbf{q}_{\parallel} + \left(\kappa^2-q_{\parallel}^2\right)\widehat{\mathbf{z}}\widehat{\mathbf{z}} + \mathrm{sgn}(z-z')\sqrt{\kappa^2-q_{\parallel}^2}\left(\mathbf{q}_{\parallel}\widehat{\mathbf{z}}+\widehat{\mathbf{z}}\mathbf{q}_{\parallel}\right) - \kappa^2\mathbf{I}\right] . \end{aligned} \tag{1.83}$$

Αξίζει να σημειωθεί ότι, για $z = z'$, στην Εξ. (1.83) υπεισέρχεται το $\int_{-\infty}^{+\infty} dq_z q_z/(q_{\parallel}^2+q_z^2-\kappa^2)$ το οποίο οριακά ισούται με μηδέν και επομένως η Εξ. (1.83) ισχύει και σε αυτή την περίπτωση [$\mathrm{sgn}(z-z') = 0$]. Η συνάρτηση Green για την περίπτωση $z \neq z'$, που ενδιαφέρει συνήθως, γράφεται στην πιο συνεπτυγμένη μορφή

$$\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega) = \frac{i}{2\omega^2}\int \frac{d^2q_{\parallel}}{(2\pi)^2}\frac{\exp(i\mathbf{q}^{\pm}\cdot[\mathbf{r}-\mathbf{r}'])}{\sqrt{\kappa^2-q_{\parallel}^2}}\left[\mathbf{q}^{\pm}\mathbf{q}^{\pm} - \kappa^2\mathbf{I}\right] , \tag{1.84}$$

όπου το $\mathbf{q}^{\pm} = \mathbf{q}_{\parallel} \pm \sqrt{\kappa^2 - q_{\parallel}^2}\,\widehat{\mathbf{z}}$ αντιστοιχεί σε $z \gtrless z'$.

1.9 Η συνάρτηση Green απλού ισοτροπικού μέσου σε αναπαράσταση σφαιρικών κυμάτων

Θα εκφράσουμε τώρα τη συνάρτηση Green στη βάση των σφαιρικών ιδιοσυναρτήσεων της Εξ. (1.76), η οποία είναι χρήσιμη στην περίπτωση που ενδιαφερόμαστε να εξετάσουμε δομές αποτελούμενες από μη αλληλεπικαλυπτόμενους σφαιρικούς σκεδαστές. Για δεδομένο κυματάνυσμα $\mathbf{q}$ οι διαμήκεις σφαιρικές ιδιοσυναρτήσεις με αντίστοιχη ιδιοσυχνότητα μηδέν είναι

$$\mathcal{C}_0\sqrt{\epsilon V}\,\mathbf{E}_{Llmq}(\mathbf{r}) = \frac{1}{q}\nabla[f_l(qr)Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})] , \tag{1.85}$$

με f_l έναν οποιονδήποτε γραμμικό συνδυασμό των j_l και h_l^+. Οι εγκάρσιες σφαιρικές ιδιοσυναρτήσεις με αντίστοιχη ιδιοσυχνότητα $cq/\sqrt{\epsilon\mu}$ είναι

$$\mathcal{C}_0\sqrt{\epsilon V}\,\mathbf{E}_{Hlmq}(\mathbf{r}) = f_l(qr)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) \tag{1.86}$$

και

$$\mathcal{C}_0\sqrt{\epsilon V}\ \mathbf{E}_{Elmq}(\mathbf{r}) = \frac{i}{q}\nabla\times\left[f_l(qr)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\right]\ . \tag{1.87}$$

Και πάλι, όταν οι σφαιρικές ιδιοσυναρτήσεις γράφονται στην παραπάνω μορφή θα αναφερόμαστε σε αυτές ως αδιάστατες ιδιοσυναρτήσεις, κατ΄ αναλογία με τις Εξ. (1.77).

Οι ιδιοσυναρτήσεις στην αναπαράσταση επίπεδων κυμάτων συνδέονται με αυτές στην αναπαράσταση σφαιρικών κυμάτων ως εξής

$$\mathbf{E}_{\mathbf{q}\mathrm{p}}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} a^{\widehat{\mathbf{q}}\mathrm{p}}_{Llmq}\mathbf{E}_{Llmq}(\mathbf{r}) + \sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\left[a^{\widehat{\mathbf{q}}\mathrm{p}}_{Hlmq}\mathbf{E}_{Hlmq}(\mathbf{r}) + a^{\widehat{\mathbf{q}}\mathrm{p}}_{Elmq}\mathbf{E}_{Elmq}(\mathbf{r})\right]\ . \tag{1.88}$$

Επειδή ένα επίπεδο κύμα είναι παντού πεπερασμένο, τα $\mathbf{E}_{Plmq}(\mathbf{r})$ στην Εξ. (1.88) δίνονται από τις Εξ. (1.85), (1.87), και (1.86) με $f_l = j_l$. Οι μη μηδενικοί συντελεστές στην Εξ. (1.88) δίνονται από τις (βλ. Εδάφιο 1.3 και Παράρτημα Β΄.27).

$$\begin{aligned} a^{\widehat{\mathbf{q}}0}_{Llm} &= 4\pi i^{l-1}Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{q}}) \\ a^{\widehat{\mathbf{q}}1}_{Hlm} &= -a^{\widehat{\mathbf{q}}2}_{Elm} = 4\pi i^l X^*_{lm;\theta}(\widehat{\mathbf{q}}) \\ a^{\widehat{\mathbf{q}}2}_{Hlm} &= a^{\widehat{\mathbf{q}}1}_{Elm} = 4\pi i^l X^*_{lm;\phi}(\widehat{\mathbf{q}})\ , \end{aligned} \tag{1.89}$$

με τις γωνιακές συνιστώσες των διανυσματικών σφαιρικών αρμονικών να προσδιορίζονται από τις Εξ. (Β΄.25) και (Β΄.27).

Θα εκφράσουμε τώρα τη συνάρτηση Green συναρτήσει των σφαιρικών κυμάτων ξεκινώντας από την Εξ. (1.80). Αναπτύσσουμε τα επίπεδα κύματα σε σφαιρικά μέσω των Εξ. (1.88) και (1.89) και ολοκληρώνουμε σε όλες τις στερεές γωνίες $\Omega_{\widehat{\mathbf{q}}}$, χρησιμοποιώντας τις αναλυτικές εκφράσεις για τα $\mathcal{C}_0\sqrt{\epsilon V}\ \mathbf{E}_{Plmq}$ [Εξ. (1.85)-(1.86)] και τις ιδιότητες ορθογωνιότητας (Β΄.9), (Β΄.37), και (Β΄.38), οπότε παίρνουμε

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega) &= \frac{2}{\pi\omega^2}\int_0^{\infty}dq\left\{\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\nabla\left[j_l(qr)Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\right]\nabla'\left[j_l(qr')Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}')\right]\right. \\ &+ \frac{\kappa^2}{\kappa^2-q^2}\sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\left\{\nabla\times\left[j_l(qr)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\right]\nabla'\times\left[j_l(qr')\mathbf{X}^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}')\right]\right. \\ &+ \left.\left. q^2 j_l(qr)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})j_l(qr')\mathbf{X}^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}')\right\}\right\}\ . \end{aligned} \tag{1.90}$$

Σημειώνουμε ότι, προκειμένου να λάβουμε σωστά υπόψη μας τους απειρισμούς που υπεισέρχονται στον υπολογισμό της συνάρτησης Green, θα πρέπει να αναπτύξουμε τις υπό ολοκλήρωση ποσότητες ως έχουν και να μην εναλλάξουμε την παραγώγιση με την ολοκλήρωση. Οι δύο πρώτοι όροι της Εξ. (1.90) αναπτύσσονται ως εξής (βλ. παράρτημα Β΄)

$$\begin{aligned} \nabla\left[j_l(qr)Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\right]\nabla'\left[j_l(qr')Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}')\right] &= q^2 j_l'(qr)j_l'(qr')Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\,\widehat{\mathbf{r}}\,Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}')\,\widehat{\mathbf{r}}' \\ &+ qj_l'(qr)j_l(qr')Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\,\widehat{\mathbf{r}}\,\nabla'Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}') \\ &+ qj_l(qr)j_l'(qr')\nabla Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}')\,\widehat{\mathbf{r}}' \end{aligned}$$

$$+ \quad j_l(qr)j_l(qr')\nabla Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\nabla' Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}') \qquad (1.91)$$

και

$$\begin{aligned}
\nabla \times [j_l(qr)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})]\, \nabla' \times \left[j_l(qr')\mathbf{X}^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}')\right] &= \frac{l\,(l+1)}{rr'} j_l(qr)j_l(qr')Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\,\widehat{\mathbf{r}}\,Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}')\,\widehat{\mathbf{r}}' \\
&+ \frac{1}{r} j_l(qr)\left[qr' j_l(qr')\right]' Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\,\widehat{\mathbf{r}}\,\nabla' Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}') \\
&+ [qr j_l(qr)]' \frac{1}{r'} j_l(qr')\nabla Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}')\,\widehat{\mathbf{r}}' \\
&+ \frac{[qr j_l(qr)]'\,[qr' j_l(qr')]'}{l\,(l+1)}\nabla Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\nabla' Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}')\ ,
\end{aligned} \qquad (1.92)$$

όπου ο τόνος συμβολίζει παραγώγιση ως προς το όρισμα της αντίστοιχης σφαιρικής συνάρτησης Bessel ή Hankel. Αντικαθιστώντας τις Εξ. (1.91) και (1.92) στην (1.90) προκύπτει

$$\begin{aligned}
\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega) &= \frac{2}{\pi\omega^2}\int_0^\infty dq \left\{ \sum_{l=0}^{\infty} q^2 j_{l+1}(qr)j_{l+1}(qr') \sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\,\widehat{\mathbf{r}}\,Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}')\,\widehat{\mathbf{r}}' \right. \\
&+ \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\partial [q j_l(qr)j_l(qr')]}{\partial q} \sum_{m=-l}^{l} \left[\frac{l}{rr'} Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\,\widehat{\mathbf{r}}\,Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}')\,\widehat{\mathbf{r}}' + \frac{1}{r} Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\,\widehat{\mathbf{r}}\,\nabla' Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}') \right. \\
&+ \left. \frac{1}{r'}\nabla Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}')\,\widehat{\mathbf{r}}' \right] + \frac{q^2}{\kappa^2 - q^2} \sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} \left\{ \frac{l\,(l+1)}{rr'} j_l(qr)j_l(qr')Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\,\widehat{\mathbf{r}} \right. \\
&\times Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}')\,\widehat{\mathbf{r}}' + [qr j_l(qr)]' \frac{1}{r'} j_l(qr')\nabla Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}')\,\widehat{\mathbf{r}}' + \frac{[qr j_l(qr)]'[qr' j_l(qr')]'}{l\,(l+1)} \\
&\times \left. \nabla Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\nabla' Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}') \right\} + \sum_{l=1}^{\infty} \left\{ j_l(qr)j_l(qr') + \frac{\kappa^2}{\kappa^2 - q^2}\frac{[qr j_l(qr)]'[qr' j_l(qr')]'}{l\,(l+1)} \right\} \\
&\times \left. \sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\,\widehat{\mathbf{r}}\,Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}')\,\widehat{\mathbf{r}}' \right\}\ .
\end{aligned} \qquad (1.93)$$

Η ολοκλήρωση στο πρώτο άπειρο άθροισμα μπορεί να γίνει με χρήση της ταυτότητας [1]

$$\int_0^\infty dq q^2 j_l(qr)j_l(qr') = \frac{\pi}{2r^2}\delta(r - r')\ . \qquad (1.94)$$

Για το δεύτερο άθροισμα παρατηρούμε ότι η υπό ολοκλήρωση συνάρτηση γράφεται σαν παράγωγος μιας συνάρτησης η οποία μηδενίζεται στα όρια ολοκλήρωσης. Η ολοκλήρωση για τα υπόλοιπα άπειρα αθροίσματα μπορεί να γίνει με χρήση των παρακάτω ταυτοτήτων

$$\int_0^\infty dq j_l(qr)j_l(qr') = \frac{\pi}{2\,(2l+1)}\frac{r^l_<}{r^{l+1}_>}\ , \qquad (1.95)$$

$$\int_0^\infty dq q^2 \frac{j_l(qr) j_l(qr')}{\kappa^2 - q^2} = -i \frac{\pi\kappa}{2} j_l(\kappa r_<) h_l^+(\kappa r_>) \ , \tag{1.96}$$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dq \kappa^2 \frac{[qr j_l(qr)]' [qr' j_l(qr')]'}{\kappa^2 - q^2} &= -\frac{\pi l \,(l+1)}{2\,(2l+1)} \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} - \\ &- i \frac{\pi\kappa}{2} \left[qr_< j_l(qr_<)\right]' \left[qr_> h_l^+(qr_>)\right]' \ , \end{aligned} \tag{1.97}$$

με $r_< = \min(r, r')$, $r_> = \max(r, r')$, όπως μπορούμε να δείξουμε με μιγαδική ολοκλήρωση (μέσω του λήμματος Jordan), και

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dq q^2 \frac{j_l(qr) \left[qr' j_l(qr')\right]'}{\kappa^2 - q^2} &= -i \frac{\pi\kappa}{2} \Big\{ j_l(\kappa r) \left[\kappa r' h_l^+(\kappa r')\right]' \Theta(r' - r) \\ &+ h_l^+(\kappa r) \left[\kappa r' j_l(\kappa r')\right]' \Theta(r - r') \Big\} \ , \end{aligned} \tag{1.98}$$

όπου η $\Theta(x)$ είναι συνάρτηση μοναδιαίου βήματος,

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0 \, , & \text{για } x < 0 \\ \frac{1}{2} \, , & \text{για } x = 0 \\ 1 \, , & \text{για } x > 0 \end{cases} \ . \tag{1.99}$$

Με βάση τα παραπάνω, το ανάπτυγμα της συνάρτησης Green στη βάση διανυσματικών σφαιρικών κυμάτων παίρνει τη μορφή

$$\begin{aligned} &\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \frac{-i}{\omega^2} \left(\frac{\omega^2 \epsilon \mu}{c^2} \right)^{3/2} \\ &\sum_{P=H,E} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \left[\mathbf{H}_{Plm}(\mathbf{r}) \overline{\mathbf{J}}_{Plm}(\mathbf{r}') \Theta(r - r') + \mathbf{J}_{Plm}(\mathbf{r}) \overline{\mathbf{H}}_{Plm}(\mathbf{r}') \Theta(r' - r) \right] + \frac{\widehat{\mathbf{r}}\widehat{\mathbf{r}}}{\omega^2} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \ , \end{aligned} \tag{1.100}$$

όπου με $\mathbf{J}_{Plm}$ ($\mathbf{H}_{Plm}$) συμβολίζουμε ομαλές (μη ομαλές) διανυσματικές κυματοσυναρτήσεις, που δίνονται από τις Εξ. (1.25) και (1.26) με $f_l = j_l$ (h_j^+), αντίστοιχα, και θυμίζουμε ότι η παύλα πάνω από μια διανυσματική κυματοσυνάρτηση δηλώνει μιγαδική συζυγία μόνο στο γωνιακό της μέρος. Λόγω της σχέσης $\sum_m Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) Y_{lm}^*(\widehat{\mathbf{r}}') = \sum_m Y_{lm}^*(\widehat{\mathbf{r}}) Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}')$, η μιγαδική συζυγία στην Εξ. (1.90) μπορεί να εφαρμοστεί είτε στην $Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})$, είτε στην $Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}')$. Συνεπώς, στην Εξ. (1.100) η παύλα μπορεί να μπει είτε στη διανυσματική σφαιρική συνάρτηση του $\mathbf{r}$, είτε σε αυτή του $\mathbf{r}'$, γεγονός που οδηγεί στην ερμιτιανότητα του τελεστή Green. Τέλος, σημειώνουμε ότι επειδή στην Εξ. (1.76) τα ϵ και μ μπορούν να μεταφερθούν στο δεύτερο μέλος και να ενσωματωθούν στην ιδιοτιμή, έχουμε ένα ερμιτιανό πρόβλημα και για μιγαδικές τιμές των σταθερών ϵ και μ, οπότε η έκφραση (1.100) ισχύει και σε αυτές τις περιπτώσεις.

Κεφάλαιο 2

Σκέδαση από μεμονωμένο σκεδαστή

Στην παρούσα διατριβή θα μας απασχολήσουν σφαιρικοί σκεδαστές από απλό ισοτροπικό, διισοτροπικό και γυροτροπικό υλικό, καθώς και μη σφαιρικοί ομοιογενείς, ισοτροπικοί σκεδαστές. Το πρόβλημα της σκέδασης ΗΜ ακτινοβολίας από μεμονωμένα σωματίδια ανάγεται ουσιαστικά στον υπολογισμό του πίνακα σκέδασης T, ο οποίος συνδέει το πλάτος του σκεδαζόμενου με αυτό του προσπίπτοντος κύματος. Για ομοιογενείς σφαιρικούς σκεδαστές από απλό ισοτροπικό υλικό το πρόβλημα έχει λυθεί αναλυτικά από τους Mie [10] και Debye [11]. Για πολυστρωματικούς τέτοιους σκεδαστές μπορούν και πάλι να βρεθούν αναλυτικές λύσεις σε κλειστή μορφή, οι οποίες όμως είναι πολύπλοκες, οπότε είναι προτιμότερο να καταφύγει κανείς σε επαναληπτικές μεθόδους [12–16]. Αντίστοιχες λύσεις μπορούν να βρεθούν αν το υλικό του σκεδαστή είναι διισοτροπικό. Στην περίπτωση αυτή όμως ο πίνακας T δεν είναι διαγώνιος ως προς την πόλωση P, γεγονός που εκφράζει την ανάμιξη των καταστάσεων ηλεκτρικής και μαγνητικής πόλωσης κατά τη σκέδαση λόγω της χειρομορφίας [17]. Στην περίπτωση μιας γυροτροπικής σφαίρας το πρόβλημα γίνεται πιο περίπλοκο λόγω του ότι, σε δεδομένη συχνότητα, η πολυπολική ανάπτυξη του ΗΜ πεδίου στο εσωτερικό της σφαίρας περιλαμβάνει διανυσματικές σφαιρικές κυματοσυναρτήσεις με διαφορετικούς κυματαριθμούς [18–20]. Τέλος, στην περίπτωση μη σφαιρικών σωματιδίων ο πίνακας σκέδασης μπορεί αν υπολογιστεί μόνο αριθμητικά, π.χ. με τη μέθοδο των εκτεταμένων συνοριακών συνθηκών [21, 22].

2.1 Πίνακας σκέδασης σφαιρικού σωματιδίου από απλό ισοτροπικό υλικό

Έστω ένα απλό ισοτροπικό ομοιογενές σωματίδιο, με κέντρο στην αρχή του συστήματος συντεταγμένων, του οποίου η σχετική διηλεκτρική συνάρτηση, ϵ_1, και η μαγνητική διαπερατότητα, μ_1, εν γένει μιγαδικές συναρτήσεις της γωνιακής συχνότητας ω, είναι διαφορετικές από αυτές του περιβάλλοντος μέσου, ϵ_h και μ_h, αντίστοιχα. Ένα επίπεδο μονοχρωματικό αρμονικό ΗΜ κύμα που προσπίπτει στο σωματίδιο αναπτύσσεται σε εγκάρσια διανυσματικά σφαιρικά κύματα που δίνονται από τις Εξ. (1.25) και (1.26), με $f_l = j_l$ αφού είναι παντού πεπερασμένο στο χώρο, ως εξής

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) &= \sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\left[a^0_{Hlm} j_l(q_h r)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) + \frac{i}{q_h} a^0_{Elm} \nabla \times j_l(q_h r)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\right] , \\
\mathbf{H}_0(\mathbf{r}) &= Z_h^{-1}\sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\left[a^0_{Elm} j_l(q_h r)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) - \frac{i}{q_h} a^0_{Hlm} \nabla \times j_l(q_h r)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\right]
\end{aligned} \tag{2.1}$$

όπου $q_h = \omega\sqrt{\epsilon_h \mu_h}/c$, $Z_h = \sqrt{\mu_0\mu_h/(\epsilon_0\epsilon_h)}$, και a^0_{Hlm}, a^0_{Elm} συντελεστές που έχουν διαστάσεις ηλεκτρικού πεδίου. Αντίστοιχα, το πολυπολικό ανάπτυγμα του σκεδαζόμενου κύματος περιλαμβάνει εγκάρσια σφαιρικά κύματα με $f_l = h_l^+$, επειδή αυτά είναι που έχουν ασυμπτωτική μορφή εξερχόμενων σφαιρικών κυμάτων: $h_l^+(x) \approx (-i)^l \exp(ix)/ix$ για $x \to \infty$. Έτσι γράφουμε

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}_{\rm sc}(\mathbf{r}) &= \sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\left[a^+_{Hlm} h_l^+(q_h r)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) + \frac{i}{q_h} a^+_{Elm} \nabla \times h_l^+(q_h r)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\right] \\
\mathbf{H}_{\rm sc}(\mathbf{r}) &= Z_h^{-1}\sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\left[a^+_{Elm} h_l^+(q_h r)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) - \frac{i}{q_h} a^+_{Hlm} \nabla \times h_l^+(q_h r)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\right] .
\end{aligned} \tag{2.2}$$

Το πεδίο στο εσωτερικό του σωματιδίου θα περιλαμβάνει μόνο σφαιρικά κύματα που έχουν ομαλή συμπεριφορά στην αρχή των αξόνων, δηλαδή

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}_{\rm in}(\mathbf{r}) &= \sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\left[a^{\rm in}_{Hlm} j_l(q_1 r)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) + \frac{i}{q_1} a^{\rm in}_{Elm} \nabla \times j_l(q_1 r)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\right] , \\
\mathbf{H}_{\rm in}(\mathbf{r}) &= Z_1^{-1}\sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\left[a^{\rm in}_{Elm} j_l(q_1 r)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) - \frac{i}{q_1} a^{\rm in}_{Hlm} \nabla \times j_l(q_1 r)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\right] ,
\end{aligned} \tag{2.3}$$

όπου $q_1 = \omega\sqrt{\epsilon_1\mu_1}/c$ και $Z_1 = \sqrt{\mu_0\mu_1/(\epsilon_0\epsilon_1)}$. Οι συντελεστές a^+_{Plm} του σκεδαζόμενου κύματος, $P = H, E$, εξαρτώνται γραμμικά από αυτούς του προσπίπτοντος μέσω του πίνακα σκέδασης T,

$$a^+_{Plm} = \sum_{P'l'm'} T_{Plm;P'l'm'} a^0_{P'l'm'} , \tag{2.4}$$

ο οποίος στη γενική περίπτωση είναι μη διαγώνιος. Για σκεδαστές σφαιρικής συμμετρίας όμως ο πίνακας T είναι διαγώνιος ως προς P και l και ανεξάρτητος του m. Πράγματι, για μια ομοιογενή και ισοτροπική σφαίρα ακτίνας S, εφαρμόζοντας τις συνοριακές συνθήκες συνέχειας των εφαπτομενικών συνιστωσών των πεδίων στη διαχωριστική επιφάνεια $r = S$

$$\begin{aligned}
\mathbf{X}^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{E}_{\rm in}(\mathbf{r}) &= \mathbf{X}^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{E}_{\rm out}(\mathbf{r}) \\
[\widehat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{E}_{\rm in}(\mathbf{r}) &= [\widehat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{E}_{\rm out}(\mathbf{r}) \\
\mathbf{X}^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{H}_{\rm in}(\mathbf{r}) &= \mathbf{X}^*_{lm} \cdot \mathbf{H}_{\rm out}(\mathbf{r}) \\
[\widehat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{H}_{\rm in}(\mathbf{r}) &= [\widehat{\mathbf{r}} \times \mathbf{X}^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{H}_{\rm out}(\mathbf{r}) ,
\end{aligned} \tag{2.5}$$

με $\mathbf{E}_{\rm out}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_{\rm sc}(\mathbf{r})$ και $\mathbf{H}_{\rm out}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}_0(\mathbf{r}) + \mathbf{H}_{\rm sc}(\mathbf{r})$, καταλήγουμε στη σχέση

$$a^{+}_{Plm} = T_{Pl}\; a^{0}_{Plm}\ , \tag{2.6}$$

όπου

$$\begin{aligned} T_{Hl} &= -\frac{j_l(q_1S)\,[xj_l(x)]'_{q_hS}\,\mu_1 - j_l(q_hS)\,[xj_l(x)]'_{q_1S}\,\mu_h}{j_l(q_1S)\,\left[xh^+_l(x)\right]'_{q_hS}\,\mu_1 - h^+_l(q_hS)\,[xj_l(x)]'_{q_1S}\,\mu_h} \\ T_{El} &= -\frac{j_l(q_1S)\,[xj_l(x)]'_{q_hS}\,\epsilon_1 - j_l(q_hS)\,[xj_l(x)]'_{q_1S}\,\epsilon_h}{j_l(q_1S)\,\left[xh^+_l(x)\right]'_{q_hS}\,\epsilon_1 - h^+_l(q_hS)\,[xj_l(x)]'_{q_1S}\,\epsilon_h}\ . \end{aligned} \tag{2.7}$$

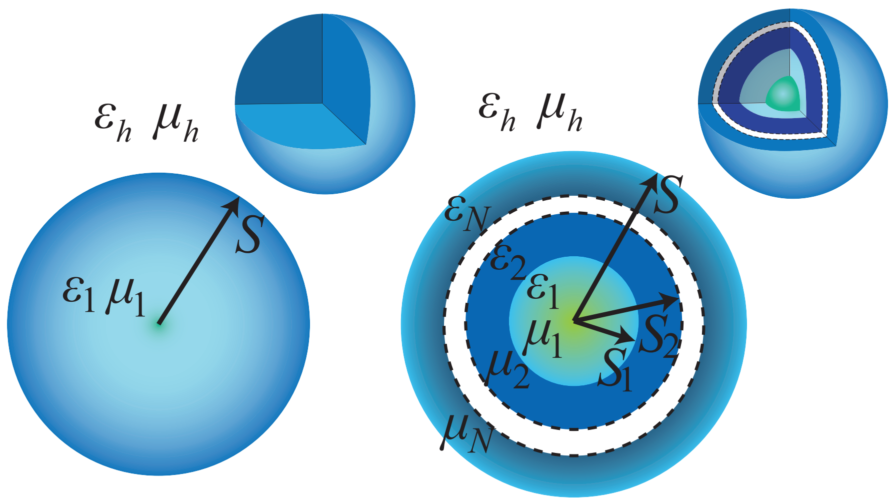
Αντίστοιχα παίρνουμε

$$a^{\rm in}_{Plm} = R_{Pl}\; a^{0}_{Plm}\ , \tag{2.8}$$

όπου

$$\begin{aligned} R_{Hl} &= \frac{i\mu_1/(q_hS)}{j_l(q_1S)\,\left[xh^+_l(x)\right]'_{q_hS}\,\mu_1 - h^+_l(q_hS)\,[xj_l(x)]'_{q_1S}\,\mu_h} \\ R_{El} &= \frac{i\epsilon_1\mu_1/(\mu_hq_1S)}{j_l(q_1S)\,\left[xh^+_l(x)\right]'_{q_hS}\,\epsilon_1 - h^+_l(q_hS)\,[xj_l(x)]'_{q_1S}\,\epsilon_h}\ . \end{aligned} \tag{2.9}$$

Με τη βοήθεια των Εξ. (2.6) έως (2.10) για δεδομένο προσπίπτον κύμα (δηλαδή a^0_{Plm}), μπορεί κανείς να υπολογίσει τους συντελεστές του πολυπολικού αναπτύγματος του ΗΜ πεδίου, άρα και το πεδίο, σε όλο το χώρο.



Σχήμα 2.1: Ομοιογενής και πολυστρωματική σφαίρα.

Για μια πολυστρωματική σφαίρα αποτελούμενη από $n = 1, 2, \ldots, N$ ομόκεντρους σφαιρικούς φλοιούς, καθένας εκ των οποίων έχει ακτίνα S_n $(S_N \equiv S)$ και περιγράφεται από (σχετική) διηλεκτρική συνάρτηση ϵ_n και μαγνητική διαπερατότητα μ_n (βλ. Σχ. 2.1), μπορούμε να εφαρμόσουμε τις συνοριακές συνθήκες συνέχειας των πεδίων, Εξ. (2.5), στις διαδοχικές διαχωριστικές επιφάνειες. Τότε προκύπτει ότι τα στοιχεία του πίνακα σκέδασης για μια σφαίρα με τους n πρώτους φλοιούς σε περιβάλλον (σχετικής) διηλεκτρικής συνάρτησης ϵ_{n+1} και μαγνητικής διαπερατότητας μ_{n+1}, $T^{(n)}_{Pl}$, συνδέονται με αυτά μιας σφαίρας με τους $n-1$ πρώτους φλοιούς σε περιβάλλον (σχετικής) διηλεκτρικής συνάρτησης ϵ_n και μαγνητικής διαπερατότητας μ_n, $T^{(n-1)}_{Pl}$, μέσω της σχέσης:

$$T^{(n)}_{Pl} = -\frac{\mathrm{A}^{(n,n+1)}_{Pl} + T^{(n-1)}_{Pl}\ \mathrm{B}^{(n,n+1)}_{Pl}}{\Gamma^{(n,n+1)}_{Pl} + T^{(n-1)}_{Pl}\ \Delta^{(n,n+1)}_{Pl}}\ , \quad P = H, E\ , \tag{2.10}$$

όπου

$$\begin{aligned}
\mathrm{A}^{(n,n+1)}_{Hl} &= j_l(q_nS)\,[xj_l(x)]'_{q_{n+1}S}\,\mu_n - j_l(q_{n+1}S)\,[xj_l(x)]'_{q_nS}\,\mu_{n+1} \\
\mathrm{B}^{(n,n+1)}_{Hl} &= h^+_l(q_nS)\,[xj_l(x)]'_{q_{n+1}S}\,\mu_n - j_l(q_{n+1}S)\,\left[xh^+_l(x)\right]'_{q_nS}\,\mu_{n+1} \\
\Gamma^{(n,n+1)}_{Hl} &= j_l(q_nS)\,\left[xh^+_l(x)\right]'_{q_{n+1}S}\,\mu_n - h^+_l(q_{n+1}S)\,[xj_l(x)]'_{q_nS}\,\mu_{n+1} \\
\Delta^{(n,n+1)}_{Hl} &= h^+_l(q_nS)\,\left[xh^+_l(x)\right]'_{q_{n+1}S}\,\mu_n - h^+_l(q_{n+1}S)\,\left[xh^+_l(x)\right]'_{q_nS}\,\mu_{n+1}\ .
\end{aligned} \tag{2.11}$$

Ακριβώς ίδια είναι και η έκφραση για τα στοιχεία $T^{(n)}_{El}$, όπου βέβαια ο δείκτης της πόλωσης είναι E αντί για H και στη θέση των μ_n, μ_{n+1} μπαίνουν, αντίστοιχα, ϵ_n, ϵ_{n+1}. Στο τέλος της επαναληπτικής διαδικασίας, για $n = N$ και $\epsilon_{N+1} = \epsilon_h$, $\mu_{N+1} = \mu_h$, υπολογίζονται τα στοιχεία του ολικού πίνακα σκέδασης της πολυστρωματικής σφαίρας, $T_{Pl} \equiv T^{(N)}_{Pl}$.

2.2 Πίνακας σκέδασης σφαιρικού δισοτροπικού σωματιδίου

Έστω μια ομοιογενής σφαίρα ακτίνας S από δισοτροπικό υλικό, που χαρακτηρίζεται από ΗΜ συντελεστές ϵ_c, μ_c και β_c, εμβαπτισμένη σε ένα απλό ισοτροπικό μέσο με συντελεστές ϵ_h και μ_h. Η σφαίρα ακτινοβολείται με ένα επίπεδο μονοχρωματικό αρμονικό ΗΜ κύμα. Αναπτύσσοντας τα πεδία Beltrami στο εσωτερικό της σφαίρας σε συγκλίνοντα στο μηδέν σφαιρικά διανυσματικά κύματα LCP και RCP με συντελεστές ανάπτυξης a^c_{Llm} και a^c_{Rlm}, αντίστοιχα, παίρνουμε το πεδίο στο εσωτερικό με χρήση της Εξ. (1.38)

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}_{\rm in}(\mathbf{r}) &= \sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\Big\{a^c_{Llm}\Big[j_l(q_Lr)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) + \frac{1}{q_L}\nabla\times j_l(q_Lr)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}})\Big] \\
&- iZ_ca^c_{Rlm}\Big[j_l(q_Rr)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) - \frac{1}{q_R}\nabla\times j_l(q_Rr)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}})\Big]\Big\}
\end{aligned} \tag{2.12}$$

$$\mathbf{H}_{\rm in}(\mathbf{r}) = -iZ_c^{-1}\sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\Big\{a^c_{Llm}\Big[j_l(q_Lr)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) + \frac{1}{q_L}\nabla\times j_l(q_Lr)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}})\Big]$$

$$+ \quad iZ_c a^c_{Rlm}\Big[j_l(q_R r)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) - \frac{1}{q_R}\nabla\times j_l(q_R r)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}})\Big]\Big\} .$$

Στο εξωτερικό της σφαίρας, το ΗΜ πεδίο είναι το άθροισμα του προσπίπτοντος και του σκεδαζόμενου που δίνονται από τις Εξ. (2.1) και (2.2). Επομένως έχουμε

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_{\rm out}(\mathbf{r}) &= \sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\Big[a^0_{Hlm}j_l(q_h r)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) + \frac{i}{q_h}a^0_{Elm}\nabla\times j_l(q_h r)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}})\\ &+ a^+_{Hlm}h^+_l(q_h r)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) + \frac{i}{q_h}a^+_{Elm}\nabla\times h^+_l(q_h r)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}})\Big] \qquad (2.13)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{H}_{\rm out}(r) &= Z_h^{-1}\sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\Big[a^0_{Elm}j_l(q_h r)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) - \frac{i}{q_h}a^0_{Hlm}\nabla\times j_l(q_h r)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}})\\ &+ a^+_{Elm}h^+_l(q_h r)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) - \frac{i}{q_h}a^+_{Hlm}\nabla\times h^+_l(q_h r)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}})\Big] .\end{aligned}$$

Εφαρμόζοντας τις συνοριακές συνθήκες, (2.5), μπορεί κανείς να συνδέσει τους συντελεστές ανάπτυξης του σκεδαζόμενου πεδίου με αυτούς του προσπίπτοντος με την εξίσωση

$$a^+_{Plm} = \sum_{P'=H,E} T_{PP';l}\; a^0_{P'lm} , \qquad P = H, E. \qquad (2.14)$$

Αναλυτικές εκφράσεις για τα στοιχεία του πίνακα T, ο οποίος είναι διαγώνιος ως προς l και ανεξάρτητος του m εξαιτίας της σφαιρικής συμμετρίας, μπορούν να γραφούν ως ακολούθως

$$\begin{aligned}T_{HH;l} &= -\frac{U_{Ll}A_{Rl} + U_{Rl}A_{Ll}}{V_{Ll}U_{Rl} + V_{Rl}U_{Ll}}\\ T_{EE;l} &= -\frac{V_{Ll}B_{Rl} + V_{Rl}B_{Ll}}{V_{Ll}U_{Rl} + V_{Rl}U_{Ll}}\\ T_{HE;l} &= -T_{EH;l} = i\frac{V_{Ll}A_{Rl} - V_{Rl}A_{Ll}}{V_{Ll}U_{Rl} + V_{Rl}U_{Ll}} ,\end{aligned} \qquad (2.15)$$

όπου

$$\begin{aligned}U_{L(R);l} &= \sqrt{\epsilon_h\mu_c}[xh^+_l(x)]_{q_hS}[xj_l(x)]'_{q_{L(R)}S} - \sqrt{\epsilon_c\mu_h}[xj_l(x)]_{q_{L(R)}S}[xh^+_l(x)]'_{q_hS}\\ V_{L(R);l} &= \sqrt{\epsilon_c\mu_h}[xh^+_l(x)]_{q_hS}[xj_l(x)]'_{q_{L(R)}S} - \sqrt{\epsilon_h\mu_c}[xj_l(x)]_{q_{L(R)}S}[xh^+_l(x)]'_{q_hS}\\ A_{L(R);l} &= \sqrt{\epsilon_c\mu_h}[xj_l(x)]_{q_hS}[xj_l(x)]'_{q_{L(R)}S} - \sqrt{\epsilon_h\mu_c}[xj_l(x)]_{q_{L(R)}S}[xj_l(x)]'_{q_hS}\\ B_{L(R);l} &= \sqrt{\epsilon_h\mu_c}[xj_l(x)]_{q_hS}[xj_l(x)]'_{q_{L(R)}S} - \sqrt{\epsilon_c\mu_h}[xj_l(x)]_{q_{L(R)}S}[xj_l(x)]'_{q_hS} .\end{aligned} \qquad (2.16)$$

Στη δεδομένη αναπαράσταση, όπως μπορεί κανείς να δει, ο πίνακας T δεν είναι διαγώνιος ως προς P, γεγονός το οποίο αντανακλά την ανάμιξη των καταστάσεων πόλωσης, H και E, στη διαδικασία της σκέδασης εξαιτίας της χειρομορφίας. Για δεδομένο l, οι ιδιοτιμές του πίνακα T είναι $\lambda_{l,\pm} = \big[\ (T_{HH;l} + T_{EE;l}) \pm \sqrt{(T_{HH;l} - T_{EE;l} - 2T_{HE;l})(T_{HH;l} - T_{EE;l} + 2T_{HE;l})}\ \big]/2$.

Ας θεωρήσουμε τώρα ένα σφαιρικό σωματίδιο, ακτίνας S που αποτελείται από ένα σφαιρικό πυρήνα δισοτροπικού υλικού, ακτίνας S_c, και ένα φλοιό από απλό ισοτροπικό υλικό, πάχους D ($S = S_c + D$), σε περιβάλλον (σχετικής) διηλεκτρικής σταθεράς ϵ_h και μαγνητικής διαπερατότητας μ_h. Η οπτική απόκριση του φλοιού περιγράφεται από (σχετική) διηλεκτρική σταθερά ϵ_p και μαγνητική διαπερατότητα μ_p. Το σύνθετο αυτό σωματίδιο ακτινοβολείται με ένα επίπεδο μονοχρωματικό αρμονικό ΗΜ κύμα.

Σε ένα απλό ισοτροπικό ομοιογενές μέσο που δεν περιλαμβάνει την αρχή των συντεταγμένων, όπως ο περιβάλλων χώρος και ο φλοιός, το πεδίο μπορεί να αναπτυχθεί, εν γένει, σε εγκάρσιες διανυσματικές σφαιρικές κυματοσυναρτήσεις, που δίδονται από τις Εξ. (1.25) και (1.26) και συγκλίνουν ($f_l = j_l$) καθώς και τέτοιες που αποκλίνουν ($f_l = h_l^+$) στο μηδέν. Αντίθετα, στην περιοχή του οπτικά ενεργού πυρήνα, εφόσον το πεδίο πρέπει να είναι πεπερασμένο στο κέντρο, στα πολυπολικά αναπτύγματα υπεισέρχονται μόνο διανυσματικά σφαιρικά κύματα LCP και RCP (βλ. Εδάφιο 1.4) που συγκλίνουν στο μηδέν. Στην περιοχή του φλοιού, οι συντελεστές των μη ομαλών διανυσματικών σφαιρικών κυμάτων σχετίζονται με αυτούς των ομαλών μέσω του πίνακα $T^{(c)}$, ο οποίος περιγράφει σκέδαση από τον πυρήνα, εμβαπτισμένο στο υλικό του φλοιού που θεωρούμε ότι εκτείνεται στο άπειρο, και δίνεται από τις Εξ. (2.15) και (2.16) θέτοντας ϵ_p, μ_p, και $q_p = \omega\sqrt{\epsilon_p\mu_p}/c$ στη θέση των ϵ_h, μ_h, και q_h, αντίστοιχα. Ομοίως, οι συντελεστές των ομαλών διανυσματικών σφαιρικών κυμάτων στο ανάπτυγμα του ΗΜ πεδίου στο φλοιό εξαρτώνται γραμμικά από τους αντίστοιχους συντελεστές στο περιβάλλον μέσο με κατάλληλους συντελεστές $C_{PP';l}$, $P, P' = H, E$. Επιβάλλοντας τις συνοριακές συνθήκες συνέχειας των εφαπτομενικών συνιστωσών του πεδίου στην εσωτερική και την εξωτερική επιφάνεια του φλοιού, καταλήγουμε σε δύο γραμμικά συστήματα διαστάσεων 4×4 για κάθε τιμή του $l = 1, 2, \ldots$. Η λύση αυτών των συστημάτων δίνει τα στοιχεία $C_{PP';l}$ και $T_{PP';l}$, με τα δεύτερα να ορίζουν τον πίνακα σκέδασης T του σύνθετου σωματιδίου που συνδέει τους συντελεστές του αναπτύγματος του σκεδαζόμενου κύματος (μη ομαλά διανυσματικά σφαιρικά κύματα) με αυτούς του προσπίπτοντος (ομαλά διανυσματικά κύματα). Τα γραμμικά συστήματα στα οποία καταλήγουμε μπορούν να γραφούν στη μορφή

$$\begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & 0 \\ d_{21} & d_{22} & 0 & d_{24} \\ d_{31} & d_{32} & 0 & d_{34} \\ d_{41} & d_{42} & d_{43} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{HH;l} & C_{HE;l} \\ C_{EH;l} & C_{EE;l} \\ T_{HH;l} & T_{HE;l} \\ T_{EH;l} & T_{EE;l} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & -a_2 \\ 0 & a_1 \\ a_2 & 0 \end{pmatrix}, \tag{2.17}$$

όπου

$$
\begin{aligned}
d_{11} &= j_l(q_pS) + T^{(c)}_{HH;l} h^+_l(q_pS) \\
d_{12} &= T^{(c)}_{HE;l} h^+_l(q_pS) \\
d_{13} &= d_{34} = -h^+_l(q_hS) \\
d_{21} &= d_{42} = iT^{(c)}_{EH;l}[xh^+_l(x)]'_{q_pS}/(q_pS) \\
d_{22} &= i\left\{[xj_l(x)]'_{q_pS}/(q_pS) + T^{(c)}_{EE;l}[xh^+_l(x)]'_{q_pS}/(q_pS)\right\} \\
d_{24} &= -d_{43} = -i[xh^+_l(x)]'_{q_hS}/(q_hS) \\
d_{31} &= \sqrt{\epsilon_p\mu_h/\epsilon_h\mu_p}\, T^{(c)}_{EH;l} h^+_l(q_pS) \\
d_{32} &= \sqrt{\epsilon_p\mu_h/\epsilon_h\mu_p}\, [T^{(c)}_{EE;l} h^+_l(q_pS) + j_l(q_pS)] \\
d_{41} &= -i\left\{[xj_l(x)]_{q_pS}/(q_pS) + T^{(c)}_{HH;l}[xh^+_l(x)]'_{q_pS}/(q_pS)\right\}
\end{aligned}
$$

και $a_1 = j_l(q_hS)$, $a_2 = -i[xj_l(x)]'_{q_hS}/(q_hS)$.

2.3 Πίνακας σκέδασης σφαιρικού γυροηλεκτρικού σωματιδίου

Θεωρούμε μια γυροηλεκτρική ομοιογενή σφαίρα ακτίνας S, που χαρακτηρίζεται από διηλεκτρικό τανυστή $\boldsymbol{\epsilon}_g$ και σχετική μαγνητική διαπερατότητα μ_g, με κέντρο την αρχή του συστήματος συντεταγμένων, σε ομοιογενές περιβάλλον μέσο με ΗΜ παραμέτρους ϵ_h και μ_h. Η σφαίρα ακτινοβολείται με ένα επίπεδο μονοχρωματικό αρμονικό ΗΜ κύμα. Σύμφωνα με τα αναπτύγματα (1.49), το πεδίο στο εσωτερικό της σφαίρας γράφεται

$$
\begin{aligned}
\mathbf{E}_{\rm in}(\mathbf{r}) = \sum_j b_j \Bigg\{ & \frac{q_j^2}{q_g^2}\overline{w}_{00;j}\frac{1}{q_j}\nabla\left[j_0(q_jr)Y_{00}(\hat{\mathbf{r}})\right] \\
&+ \sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\left[\frac{q_j^2}{q_g^2}\overline{w}_{lm;j}\frac{1}{q_j}\nabla\left[j_l(q_jr)Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}})\right] + a_{Hlm;j}j_l(q_jr)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) + a_{Elm;j}\frac{i}{q_j}\nabla\times j_l(q_jr)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}})\right]\Bigg\}
\end{aligned}
$$

$$
\mathbf{H}_{\rm in}(\mathbf{r}) = \sum_j b_j \frac{q_j}{\omega\mu_0\mu_g}\sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\left[a_{Elm;j}j_l(q_jr)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) - a_{Hlm;j}\frac{i}{q_j}\nabla\times j_l(q_jr)\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}})\right]. \tag{2.18}
$$

Στον περιβάλλοντα χώρο το ΗΜ πεδίο, είναι το άθροισμα του προσπίπτοντος και του σκεδαζόμενου κύματος και δίδεται από τις Εξ. (2.13). Επιβάλλοντας τις συνοριακές συνθήκες (2.5) στην επιφάνεια της σφαίρας καταλήγουμε στο σύστημα των εξισώσεων

$$
\begin{aligned}
a^0_{Hlm} &= -\frac{h^+_l(q_hS)}{j_l(q_hS)}a^+_{Hlm} + \sum_j \frac{j_l(q_jS)}{j_l(q_hS)}a_{Hlm;j}b_j \\
a^0_{Elm} &= -\frac{h^+_l(q_hS)}{j_l(q_hS)}a^+_{Elm} + \sum_j \frac{\mu_h q_j j_l(q_jS)}{\mu_g q_h j_l(q_hS)}a_{Elm;j}b_j \\
a^0_{Hlm} &= -\frac{[xh^+_l(x)]'_{q_hS}}{[xj_l(x)]'_{q_hS}}a^+_{Hlm} + \sum_j \frac{\mu_h[xj_l(x)]'_{q_jS}}{\mu_g[xj_l(x)]'_{q_hS}}a_{Hlm;j}b_j \\
a^0_{Elm} &= -\frac{[xh^+_l(x)]'_{q_hS}}{[xj_l(x)]'_{q_hS}}a^+_{Elm} + \sum_j \left\{\frac{q_h[xj_l(x)]'_{q_jS}}{q_j[xj_l(x)]'_{q_hS}}a_{Elm;j} - \frac{\sqrt{l(l+1)}q_jq_hj_l(q_jS)}{q_g^2[xj_l(x)]'_{q_hS}}\overline{w}_{lm;j}\right\}b_j \ ,
\end{aligned}
\tag{2.19}
$$

το οποίο μπορεί να γραφεί με μορφή πινάκων ως εξής

$$
\begin{aligned}
\mathbf{a^0} &= \mathbf{\Lambda a^+} + \mathbf{Ub} \\
\mathbf{a^0} &= \mathbf{\Lambda' a^+} + \mathbf{Vb} \ ,
\end{aligned}
\tag{2.20}
$$

όπου

$$
\begin{aligned}
&\Lambda_{Plm;P'l'm'} = -\frac{h^+_l(q_hS)}{j_l(q_hS)}\delta_{PP'}\delta_{ll'}\delta_{mm'} \ , \ \Lambda'_{Plm;P'l'm'} = -\frac{[xh^+_l(x)]'_{q_hS}}{[xj_l(x)]'_{q_hS}}\delta_{PP'}\delta_{ll'}\delta_{mm'} \\
&U_{Hlm;j} = \frac{j_l(q_jS)}{j_l(q_hS)}a_{Hlm;j} \ , \ U_{Elm;j} = \frac{\mu_h q_j j_l(q_jS)}{\mu_g q_h j_l(q_hS)}a_{Elm;j} \\
&V_{Hlm;j} = \frac{\mu_h[xj_l(x)]'_{q_jS}}{\mu_g[xj_l(x)]'_{q_hS}}a_{Hlm;j} \ , V_{Elm;j} = \frac{q_h[xj_l(x)]'_{q_jS}}{q_j[xj_l(x)]'_{q_hS}}a_{Elm;j} - \frac{\sqrt{l(l+1)}q_jq_hj_l(q_jS)}{q_g^2[xj_l(x)]'_{q_hS}}\overline{w}_{lm;j}.
\end{aligned}
\tag{2.21}
$$

Επιλύοντας τις Εξ. (2.20) έχουμε

$$\mathbf{b} = \mathbf{Ra}^0 \tag{2.22}$$

$$\mathbf{a}^+ = \mathbf{Ta}^0, \tag{2.23}$$

όπου $\mathbf{R} = (\mathbf{U} + \mathbf{\Lambda Z})^{-1}$, $\mathbf{Z} = (\mathbf{\Lambda} - \mathbf{\Lambda'})^{-1}(\mathbf{V} - \mathbf{U})$, $\mathbf{T} = \mathbf{ZR}$.

Η Εξ. (2.23) ορίζει τον πίνακα σκέδασης T του σωματιδίου, ο οποίος έχει μορφή διαγώνια κατά τμήματα: $T_{Plm;P'l'm'} = T^{(m)}_{Pl;P'l'}\delta_{mm'}$. Επιπλέον, $T^{(m)}_{Pl;P'l'} = 0$ εάν τα μαγνητικά (H)/ ηλεκτρικά (E) πολύπολα που αντιστοιχούν στα Pl και $P'l'$ δεν έχουν την ίδια αρτιότητα, δεν είναι δηλαδή και τα δύο άρτια ή περιττά[1]. Αυτό συνεπάγεται ότι ο πίνακας T σε δεδομένο υπόχωρο m ανάγεται περαιτέρω σε δύο υποπίνακες. Αυτές οι ιδιότητες συμμετρίας όμως δεν ισχύουν σε οποιοδήποτε σύστημα συντεταγμένων. Αν α, β, γ είναι οι γωνίες Euler που μετασχηματίζουν ένα αυθαίρετο σύστημα συντεταγμένων στο συγκεκριμένο σύστημα συντεταγμένων όπου ο διηλεκτρικός τανυστής έχει τη μορφή της Εξ. (1.20), ο πίνακας T δίδεται

[1]Άρτιο (περιττό) είναι ένα μαγνητικό πολύπολο αν l άρτιο (περιττό) και ένα ηλεκτρικό πολύπολο αν l περιττό (άρτιο).

από τη σχέση

$$T_{Plm;P'l'm'} = \sum_{m''} D^{(l)}_{mm''}(\alpha,\beta,\gamma) T^{(m'')}_{Pl;P'l'} D^{(l')}_{m''m'}(-\gamma,-\beta,-\alpha), \tag{2.24}$$

όπου $D^{(l)}_{mm_1}(\alpha,\beta,\gamma) = \exp(-im\alpha) d^{(l)}_{mm_1}(\beta) \exp(-im_1\gamma)$, όπου η $d^{(l)}_{mm_1}$ είναι η συνάρτηση Wigner [23]

$$\begin{aligned} d^{(l)}_{mm_1}(\beta) &= \sqrt{(l+m)!\,(l-m)!\,(l+m_1)!\,(l-m_1)!} \\ &\times \sum_k (-1)^k \frac{[\cos(\beta/2)]^{2l-2k+m-m_1}\,[\sin(\beta/2)]^{2k-m+m_1}}{k!\,(l+m-k)!\,(l-m_1-k)!\,(m_1-m+k)!}\,, \end{aligned} \tag{2.25}$$

με τα l, m και m_1 να είναι ακέραιοι και η άθροιση γίνεται στις τιμές του k που οδηγούν σε μη αρνητικούς παράγοντες.

2.4 Πίνακας σκέδασης σφαιρικού γυρομαγνητικού σωματιδίου

Θεωρούμε μια γυρομαγνητική ομοιογενή σφαίρα ακτίνας S, που χαρακτηρίζεται από τανυστή μαγνητικής διαπερατότητας $\boldsymbol{\mu}_g$ και σχετική διηλεκτρική σταθερά ϵ_g, με κέντρο την αρχή του συστήματος συντεταγμένων, σε ομοιογενές περιβάλλον μέσο με ΗΜ παραμέτρους ϵ_h και μ_h. Η σφαίρα ακτινοβολείται με ένα επίπεδο μονοχρωματικό αρμονικό ΗΜ κύμα. Σύμφωνα με τα αναπτύγματα (1.57), το πεδίο στο εσωτερικό της σφαίρας γράφεται

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\rm in}(\mathbf{r}) &= \sum_j b_j \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \left[a_{Hlm;j} j_l(q_j r) \mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) + a_{Elm;j} \frac{i}{q_j} \nabla \times j_l(q_j r) \mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \\ \mathbf{H}_{\rm in}(\mathbf{r}) &= \sum_j b_j \frac{\omega \epsilon_g \epsilon_0}{q_j} \Bigg\{ \frac{q_j^2}{q_g^2} \overline{\overline{w}}_{00;j} \frac{1}{q_j} \nabla \left[j_0(q_j r) Y_{00}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \\ &+ \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \left[\frac{q_j^2}{q_g^2} \overline{\overline{w}}_{lm;j} \frac{1}{q_j} \nabla \left[j_l(q_j r) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \right] + a_{Elm;j} j_l(q_j r) \mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) - a_{Hlm;j} \frac{i}{q_j} \nabla \times j_l(q_j r) \mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \right] \Bigg\}. \end{aligned} \tag{2.26}$$

Στον περιβάλλοντα χώρο, το πολυπολικό ανάπτυγμα του ΗΜ πεδίου δίδεται από την Εξ. (2.13). Επιβάλλοντας τις συνοριακές συνθήκες (2.5) στην επιφάνεια της σφαίρας καταλήγουμε στο σύστημα των εξισώσεων

$$\begin{aligned} a^0_{Hlm} &= -\frac{h_l^+(q_h S)}{j_l(q_h S)} a^+_{Hlm} + \sum_j \frac{j_l(q_j S)}{j_l(q_h S)} a_{Hlm;j} b_j \\ a^0_{Elm} &= -\frac{h_l^+(q_h S)}{j_l(q_h S)} a^+_{Elm} + \sum_j \frac{\mu_h q_g^2 j_l(q_j S)}{\mu_z q_h q_j j_l(q_h S)} a_{Elm;j} b_j \\ a^0_{Hlm} &= -\frac{[x h_l^+(x)]'_{q_h S}}{[x j_l(x)]'_{q_h S}} a^+_{Hlm} + \sum_j \left\{ \frac{\mu_h q_g^2 [x j_l(x)]'_{q_j S}}{\mu_z q_j^2 [x j_l(x)]'_{q_h S}} a_{Hlm;j} + \frac{\sqrt{l(l+1)} \mu_h j_l(q_j S)}{\mu_z [x j_l(x)]'_{q_h S}} \overline{\overline{w}}_{lm;j} \right\} b_j \\ a^0_{Elm} &= -\frac{[x h_l^+(x)]'_{q_h S}}{[x j_l(x)]'_{q_h S}} a^+_{Elm} + \sum_j \frac{q_h [x j_l(x)]'_{q_j S}}{q_j [x j_l(x)]'_{q_h S}} a_{Elm;j} b_j \ . \end{aligned} \tag{2.27}$$

Το σύστημα αυτό μπορεί να γραφεί στη μορφή της Εξ. (2.20) όπου τώρα

$$
\begin{aligned}
&\Lambda_{Plm;P'l'm'} = -\frac{h_l^+(q_hS)}{j_l(q_hS)}\delta_{PP'}\delta_{ll'}\delta_{mm'}\ ,\ \ \Lambda'_{Plm;P'l'm'} = -\frac{[xh_l^+(x)]'_{q_hS}}{[xj_l(x)]'_{q_hS}}\delta_{PP'}\delta_{ll'}\delta_{mm'}\\
&U_{Hlm;j} = \frac{j_l(q_jS)}{j_l(q_hS)}a_{Hlm;j}\ ,\ \ U_{Elm;j} = \frac{\mu_h q_g^2 j_l(q_jS)}{\mu_z q_h q_j j_l(q_hS)}a_{Elm;j} \qquad (2.28)\\
&V_{Hlm;j} = \frac{\mu_h q_g^2 [xj_l(x)]'_{q_jS}}{\mu_z q_j^2 [xj_l(x)]'_{q_hS}}a_{Hlm;j} + \frac{\sqrt{l(l+1)}\mu_h j_l(q_jS)}{\mu_z [xj_l(x)]'_{q_hS}}\overline{\overline{w}}_{lm;j}\ ,\ \ V_{Elm;j} = \frac{q_h [xj_l(x)]'_{q_jS}}{q_j [xj_l(x)]'_{q_hS}}a_{Elm;j}\ ,
\end{aligned}
$$

και η λύση του δίνεται από τις Εξ. (2.22) και (2.23) που ορίζουν τον πίνακα σκέδασης T, ο οποίος έχει τις ίδιες ιδιότητες συμμετρίας όπως στην περίπτωση της γυροηλεκτρικής σφαίρας.

2.5 Η μέθοδος εκτεταμένων συνοριακών συνθηκών για απλό ισοτροπικό μη σφαιρικό σκεδαστή

Στην περίπτωση μη σφαιρικών σκεδαστών, στο πλαίσιο της παρούσας διατριβής, ο πίνακας σκέδασης υπολογίζεται αριθμητικά με τη *μέθοδο εκτεταμένων συνοριακών συνθηκών* [23]. Θεωρούμε ένα ομοιογενές μη σφαιρικό σωματίδιο από απλό ισοτροπικό υλικό (σχετικής) διηλεκτρικής συνάρτησης ϵ_1 και μαγνητικής διαπερατότητας μ_1 σε ομοιογενές περιβάλλον μέσο με ΗΜ παραμέτρους ϵ_h και μ_h. Για ένα μη σφαιρικό σκεδαστή όγκου $V_{\rm in}$ και επιφάνειας A, αν εφαρμόσουμε την Εξ. (Α΄.18) για τον όγκο $V = V_{\rm out}$ εκτός του σωματιδίου (βλ. Σχ. 2.2) για το ολικό ηλεκτρικό πεδίο στην ίδια περιοχή, με $\mathbf{a} = \mathbf{E}_{\rm out}(\mathbf{r})$ $[= \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_{\rm sc}(\mathbf{r})]$ και $\mathbf{B} = \mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)$, όπου $\mathbf{G}$ η συνάρτηση Green στη βάση σφαιρικών κυμάτων, Εξ. (1.100), καταλήγουμε στη σχέση

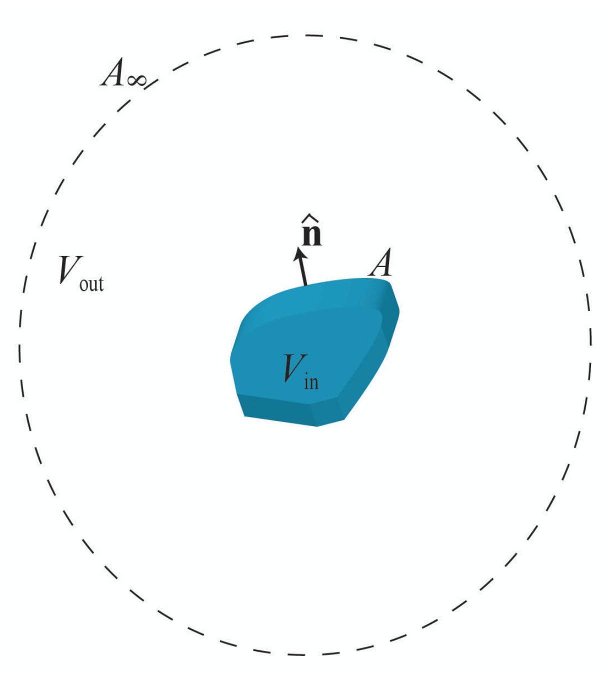
$$
\begin{aligned}
&\int_{V_{\rm out}} d^3r\left\{\mathbf{E}_{\rm out}(\mathbf{r})\cdot\left[\nabla\times\nabla\times\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)\right] - \left[\nabla\times\nabla\times\mathbf{E}_{\rm out}(\mathbf{r})\right]\cdot\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)\right\}\\
=\ &\left(-\int_{A_\infty} + \int_A\right) d^2r\left\{\left[\widehat{\mathbf{n}}\times\nabla\times\mathbf{E}_{\rm out}(\mathbf{r})\right]\cdot\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)\right.\\
&\left.+\left[\widehat{\mathbf{n}}\times\mathbf{E}_{\rm out}(\mathbf{r})\right]\cdot\left[\nabla\times\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)\right]\right\}\ , \qquad (2.29)
\end{aligned}
$$

όπου ο χώρος $V_{\rm out}$ εκτός του σωματιδίου οριοθετείται από την επιφάνεια του σωματιδίου, A, και την επιφάνεια στο άπειρο, A_∞, και $\widehat{\mathbf{n}}$ το μοναδιαίο διάνυσμα κάθετο τοπικά στην επιφάνεια με κατεύθυνση προς τα έξω (σε σχέση με το σωματίδιο). Για το ολοκλήρωμα στο άπειρο ισχύει $\mathbf{E}_{\rm out}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r})$, εφόσον το εξερχόμενο κύμα μηδενίζεται στο άπειρο. Εφαρμόζοντας την Εξ. (Α΄.18) σε όλο τον χώρο, για $\mathbf{a} = \mathbf{E}_0(\mathbf{r})$ και $\mathbf{B} = \mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)$, προκύπτει

$$
\frac{\epsilon_h\mu_h}{c^2}\mathbf{E}_0(\mathbf{r}') = \int_{A_\infty} d^2r\left\{\left[\widehat{\mathbf{n}}\times\nabla\times\mathbf{E}_0(\mathbf{r})\right]\cdot\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega) + \left[\widehat{\mathbf{n}}\times\mathbf{E}_0(\mathbf{r})\right]\cdot\left[\nabla\times\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)\right]\right\}\ , \qquad (2.30)
$$

όπου εφαρμόσαμε επιπλέον τις Εξ. (1.73) και (1.76). Έτσι, από την Εξ. (2.29) καταλήγουμε στη σχέση

$$
\left.\begin{array}{r}\mathbf{E}_{\rm out}(\mathbf{r}')\ ,\ \ \mathbf{r}'\in V_{\rm out}\\ 0\ ,\ \ \mathbf{r}'\in V_{\rm in}\end{array}\right\} = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}') + \int_A d^2r\left\{i\omega\mu_0\mu_h\left[\widehat{\mathbf{n}}\times\mathbf{H}_{\rm out}(\mathbf{r})\right]\cdot\frac{\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)c^2}{-\epsilon_h\mu_h}\right.
$$



Σχήμα 2.2: Σχηματική παράσταση σκεδαστή αυθαίρετου σχήματος όγκου V_{in} που περικλείει κλειστή επιφάνεια A και οριοθέτηση του εξωτερικού χώρου, όγκου V_{out} από κλειστή επιφάνεια A_∞ ασυμπτωτικά στο άπειρο.

$$+ \quad [\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E}_{\text{out}}(\mathbf{r})] \cdot \left[\nabla \times \frac{\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) c^2}{-\epsilon_h \mu_h} \right] \Bigg\} \; , \tag{2.31}$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την εξίσωση $\nabla \times \mathbf{E}_{\text{out}} = i\omega\mu_0\mu_h \mathbf{H}_{\text{out}}$. Λόγω συνέχειας των εφαπτομενικών συνιστωσών του ΗΜ πεδίου στην επιφάνεια του σωματιδίου ισχύει

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{H}_{\text{out}}(\mathbf{r}) &= \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{H}_{\text{in}}(\mathbf{r}) \\ \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E}_{\text{out}}(\mathbf{r}) &= \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) \; . \end{aligned} \tag{2.32}$$

Από την Εξ. (2.31) μέσω των (2.32), (1.100) και της ταυτότητας (Α΄.1) προκύπτει

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_0(\mathbf{r}') \;=\; & -\sum_{Plm} \mathbf{J}_{Plm}(\mathbf{r}') i q_h \int_A d^2 r \, \hat{\mathbf{n}} \cdot \left\{ \frac{\mu_h}{\mu_1} [\nabla \times \mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r})] \times \overline{\mathbf{H}}_{Plm}(\mathbf{r}) \right. \\ & \left. + \mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) \times \left[\nabla \times \overline{\mathbf{H}}_{Plm}(\mathbf{r}) \right] \right\} \; , \quad \text{για } \mathbf{r}' \in V_{\text{int}} \end{aligned} \tag{2.33}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\text{sc}}(\mathbf{r}') \;=\; & \sum_{Plm} \mathbf{H}_{Plm}(\mathbf{r}') i q_h \int_A d^2 r \, \hat{\mathbf{n}} \cdot \left\{ \frac{\mu_h}{\mu_1} [\nabla \times \mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r})] \times \overline{\mathbf{J}}_{Plm}(\mathbf{r}) \right. \\ & \left. + \mathbf{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}) \times \left[\nabla \times \overline{\mathbf{J}}_{Plm}(\mathbf{r}) \right] \right\} \; , \quad \text{για } \mathbf{r}' \in V_{\text{ext}} \; , \end{aligned} \tag{2.34}$$

Οι Εξ. (2.33) και (2.34) αποτελούν τη μέθοδο εκτεταμένων συνοριακών συνθηκών. Ουσιαστικά η μέθοδος αυτή έγκειται στην αναλυτική επέκταση του προσπίπτοντος πεδίου εντός του σκεδαστή. Αρχικά υπολογίζεται το πεδίο εντός του σκεδαστή σαν συνάρτηση του εξωτερικά προσπίπτοντος αντιστρέφοντας την Εξ. (2.33), και στη συνέχεια υπολογίζεται το σκεδαζόμενο κύμα συναρτήσει του πεδίου μέσα στον σκεδαστή μέσω της Εξ. (2.34). Συγκρίνοντας τις (2.33) και (2.34) με τις (2.1) και (2.2), και χρησιμοποιώντας την Εξ. (2.3), προκύπτουν οι εξισώσεις για τα πλάτη των κυμάτων

$$a^0_{Plm} = -\sum_{P'l'm'} Q^0_{Plm;P'l'm'} a^{\mathrm{in}}_{P'l'm'} \tag{2.35}$$

και

$$a^+_{Plm} = \sum_{P'l'm'} Q^+_{Plm;P'l'm'} a^{\mathrm{in}}_{P'l'm'} \ , \tag{2.36}$$

όπου

$$Q^0_{Plm;P'l'm'} = iq_h \int_A d^2r\ \widehat{\mathbf{n}}\cdot\left\{\mathbf{J}^1_{P'l'm'}(\mathbf{r}) \times \left[\nabla \times \overline{\mathbf{H}}_{Plm}(\mathbf{r})\right] - \frac{\mu_h}{\mu_1}\overline{\mathbf{H}}_{Plm}(\mathbf{r}) \times \left[\nabla \times \mathbf{J}^1_{P'l'm'}(\mathbf{r})\right]\right\} \tag{2.37}$$

και

$$Q^+_{Plm;P'l'm'} = iq_h \int_A d^2r\ \widehat{\mathbf{n}}\cdot\left\{\mathbf{J}^1_{P'l'm'}(\mathbf{r}) \times \left[\nabla \times \overline{\mathbf{J}}_{Plm}(\mathbf{r})\right] - \frac{\mu_h}{\mu_1}\overline{\mathbf{J}}_{Plm}(\mathbf{r}) \times \left[\nabla \times \mathbf{J}^1_{P'l'm'}(\mathbf{r})\right]\right\} \ , \tag{2.38}$$

με τον άνω δείκτη 1 να συμβολίζει ότι η ομαλή διανυσματική σφαιρική κυματοσυνάρτηση αναφέρεται στο υλικό του σκεδαστή (κυματαριθμός q_1) και όχι του περιβάλλοντος όπως οι άλλες. Από την Εξ. (2.4), μέσω των (2.35) και (2.36), προκύπτει ότι ο πίνακας T μπορεί να υπολογιστεί από τη λύση του συστήματος

$$\sum_{P''l''m''} T_{Plm;P''l''m''} Q^0_{P''l''m'';P'l'm'} = -Q^+_{Plm;P'l'm'} \ . \tag{2.39}$$

Αν επιπλέον χρησιμοποιήσουμε τις Εξ. (1.27) μπορούμε να γράψουμε

$$\begin{aligned}
Q^{0(+)}_{Hlm;Hl'm'} &= -\frac{q_h}{q_1}\mathcal{J}^{0(+)}_{Elm;Hl'm'} + \frac{\mu_h}{\mu_1}\mathcal{J}^{0(+)}_{Hlm;El'm'} \\
Q^{0(+)}_{Hlm;El'm'} &= -\frac{q_h}{q_1}\mathcal{J}^{0(+)}_{Elm;El'm'} - \frac{\mu_h}{\mu_1}\mathcal{J}^{0(+)}_{Hlm;Hl'm'} \\
Q^{0(+)}_{Elm;El'm'} &= \frac{q_h}{q_1}\mathcal{J}^{0(+)}_{Hlm;El'm'} - \frac{\mu_h}{\mu_1}\mathcal{J}^{0(+)}_{Elm;Hl'm'} \\
Q^{0(+)}_{Elm;Hl'm'} &= \frac{q_h}{q_1}\mathcal{J}^{0(+)}_{Hlm;Hl'm'} + \frac{\mu_h}{\mu_1}\mathcal{J}^{0(+)}_{Elm;El'm'} \ ,
\end{aligned} \tag{2.40}$$

όπου τα $\mathcal{J}^{0(+)}_{PlmP'l'm'}$ δίνονται από τις εκφράσεις

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}^0_{Plm;P'l'm'} &= q_h q_1 \int_A d^2r\ \widehat{\mathbf{n}}\cdot\left[\mathbf{J}^1_{P'l'm'}(\mathbf{r}) \times \overline{\mathbf{H}}_{Plm}(\mathbf{r})\right] \\
\mathcal{J}^+_{Plm;P'l'm'} &= q_h q_1 \int_A d^2r\ \widehat{\mathbf{n}}\cdot\left[\mathbf{J}^1_{P'l'm'}(\mathbf{r}) \times \overline{\mathbf{J}}_{Plm}(\mathbf{r})\right] \ .
\end{aligned} \tag{2.41}$$

Εξάλλου, το διαφορικό της επιφάνειας γράφεται [23]

$$d^2r\ \widehat{\mathbf{n}} = r^2 \sin\theta \left(\widehat{\mathbf{r}} - \frac{1}{r}\frac{\partial r}{\partial\theta}\widehat{\boldsymbol{\theta}} - \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial r}{\partial\phi}\widehat{\boldsymbol{\phi}} \right) d\theta d\phi\ . \tag{2.42}$$

Αν και η ανάπτυξη του ΗΜ πεδίου σε διανυσματικά σφαιρικά κύματα εμπεριέχει άπειρους όρους, προκύπτει ότι, αν το μέγεθος του σωματιδίου είναι συγκρίσιμο με το μήκος κύματος, ένας περιορισμένος αριθμός σφαιρικών κυμάτων, που χαρακτηρίζονται από δείκτη στροφορμής l μικρότερο από κάποια μέγιστη τιμή $l_{\max}$, είναι αρκετός για την περιγραφή του σκεδαζόμενου πεδίου μέσω του πίνακα T. Ωστόσο, για την επίλυση της Εξ. (2.39) χρειάζεται να ληφθούν υπόψη στοιχεία πίνακα μέχρι $l_{\rm cut}(\geq l_{\max})$. Το γεγονός ότι το $l_{\rm cut}$ αυξάνεται σημαντικά καθώς το σχήμα του σωματιδίου αποκλίνει από τη σφαίρα σημαίνει ότι προκειμένου να υπολογιστούν με ακρίβεια τα στοιχεία του πίνακα T δεδομένης διάστασης χρειάζεται ένας μεγάλος αριθμός στοιχείων των πίνακων Q^0 και Q^+. Προφανώς, για σφαιρικά σωματίδια ισχύει $l_{\rm cut} = l_{\max}$. Σημειώνεται ότι η Εξ. (2.39) δεν πρέπει να επιλύεται μέσω αντιστροφής του Q^0, διότι αυτή η διαδικασία μπορεί να εισάγει αριθμητικές αστάθειες. Αντίθετα, πρέπει να θεωρείται ως ένα σύστημα γραμμικών εξισώσεων και να επιλύεται, για παράδειγμα, με τη μέθοδο Gauss με έλεγχο αριθμητικής υπερχείλισης [24].

Για σωματίδια κυλινδρικής συμμετρίας (ομάδα $D_{\infty h}$ [25]), ισχύει $\mathbf{r} = r(\theta)\ \widehat{\mathbf{r}}$, με $r(\pi - \theta) = r(\theta)$. Σε αυτή την περίπτωση, από την πρώτη των Εξ. (2.41), μέσω σχέσεων του Παραρτήματος Β′, καταλήγουμε στις εκφράσεις

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}^0_{Hlm;Hl'm'} &= -\frac{2\pi i\delta_{mm'}\left[1-(-1)^{l+l'}\right]}{\psi_l\psi_{l'}}\int_0^1 d\cos\theta\ \frac{m}{\sin\theta} \\
&\times\ q_h r h_l^+(q_h r) q_1 r j_{l'}(q_1 r)\frac{\partial\left[Y_{lm}(\theta)Y_{l'm}(\theta)\right]}{\partial\theta} \\
\mathcal{J}^0_{Elm;El'm'} &= -\frac{2\pi i\delta_{mm'}\left[1-(-1)^{l+l'}\right]}{\psi_l\psi_{l'}}\int_0^1 d\cos\theta\frac{m}{\sin\theta} \\
&\times\ \Bigg\{\left[xh_l^+(x)\right]'_{q_h r}\left[xj_{l'}(x)\right]'_{q_1 r}\ \frac{\partial\left[Y_{lm}(\theta)Y_{l'm}(\theta)\right]}{\partial\theta} \\
&+\ \frac{1}{r}\frac{\partial r}{\partial\theta}\left\{\psi_{l'}^2 j_{l'}(q_1 r)\left[xh_l^+(x)\right]'_{q_h r} + \psi_l^2 h_l^+(q_h r)\left[xj_{l'}(x)\right]'_{q_1 r}\right\}Y_{lm}(\theta)Y_{l'm}(\theta)\Bigg\} \\
\mathcal{J}^0_{Hlm;El'm'} &= -\frac{2\pi i\delta_{mm'}\left[1+(-1)^{l+l'}\right]}{\psi_l\psi_{l'}}\int_0^1 d\cos\theta\ q_h r h_l^+(q_h r) \\
&\times\ \Bigg\{\left[xj_{l'}(x)\right]'_{q_1 r}\left[\frac{m^2}{\sin^2\theta}Y_{l'm}(\theta)Y_{lm}(\theta) + \frac{\partial Y_{l'm}(\theta)}{\partial\theta}\frac{\partial Y_{lm}(\theta)}{\partial\theta}\right] \\
&+\ \frac{1}{r}\frac{\partial r}{\partial\theta}\psi_{l'}^2 j_l(q_1 r)Y_{l'm}(\theta)\frac{\partial Y_{lm}(\theta)}{\partial\theta}\Bigg\} \\
\mathcal{J}^0_{Elm;Hl'm'} &= -\frac{2\pi i\delta_{mm'}\left[1+(-1)^{l+l'}\right]}{\psi_l\psi_{l'}}\int_0^1 d\cos\theta\ q_1 r j_{l'}(q_1 r) \\
&\times\ \Bigg\{\left[xh_l^+(x)\right]'_{q_h r}\left[\frac{m^2}{\sin^2\theta}Y_{l'm}(\theta)Y_{lm}(\theta) + \frac{\partial Y_{l'm}(\theta)}{\partial\theta}\frac{\partial Y_{lm}(\theta)}{\partial\theta}\right]
\end{aligned}$$

$$+ \quad \left.\frac{1}{r}\frac{\partial r}{\partial\theta}\psi_l^2 h_l^+(q_h r)Y_{lm}(\theta)\frac{\partial Y_{l'm}(\theta)}{\partial\theta}\right\} , \tag{2.43}$$

όπου $Y_{lm}(\theta) \equiv Y_{lm}(\theta, \phi = 0)$, και $r \equiv r(\theta)$ είναι η απόσταση ενός σημείου στην επιφάνεια του σωματιδίου από το κέντρο, κατά τη διεύθυνση που ορίζει η πολική γωνία θ. Τα στοιχεία πίνακα $\mathcal{J}^+_{Plm;P'l'm'}$ δίνονται από τις ίδιες εκφράσεις όπως τα $\mathcal{J}^0_{Plm;P'l'm'}$ αντικαθιστώντας τις h_l^+ με τις j_l. Αξίζει να σημειωθεί ότι, για λόγους αριθμητικής ευστάθειας, οι υπολογισμοί βάσει των Εξ. (2.43) πρέπει να γίνονται χρησιμοποιώντας τις ταυτότητες $\frac{m}{\sin\theta}Y_{lm}(\theta) = -\alpha_l^m \cos\theta Y_{lm+1}(\theta) + m\sin\theta Y_{lm}(\theta) - \alpha_l^{-m}\cos\theta Y_{lm-1}(\theta)$ και $\frac{\partial}{\partial\theta}Y_{lm}(\theta) = \alpha_l^m Y_{lm+1}(\theta) - \alpha_l^{-m} Y_{lm-1}(\theta)$ (βλ. και Παράρτημα Β′).

Ο παράγοντας $\delta_{mm'}$ στις Εξ. (2.43) σημαίνει ότι η Εξ. (2.39) σπάει σε ανεξάρτητα συστήματα εξισώσεων για κάθε τιμή του m. Επιπλέον, εξαιτίας του παράγοντα $[1 \pm (-1)^{l+l'}]$ στις Εξ. (2.43), τα στοιχεία των πινάκων Q^0 και Q^+ για $PP' = HE, EH$ ή HH, EE είναι ταυτοτικά μηδέν εάν $l + l'$ είναι ένας άρτιος ή περιττός ακέραιος, αντίστοιχα, σύμφωνα με τις Εξ. (2.40). Γι′ αυτό καθένα από τα προαναφερθέντα συστήματα εξισώσεων μπορεί να αναχθεί περαιτέρω σε δύο ανεξάρτητα υποσυστήματα, ένα στον υπόχωρο των άρτιων και ένα στον υπόχωρο των περιττών διανυσματικών σφαιρικών πολυπόλων. Σημειώνεται επίσης ότι δεν χρειάζεται να υπολογιστούν τα $Q^{0(+)}_{Plm;P'l'm}$ για αρνητικές τιμές του m διότι, σύμφωνα με τις Εξ. (2.40) και (2.43), $Q^{0(+)}_{Pl-m;P'l'-m} = (1 - 2\delta_{PP'})Q^{0(+)}_{Plm;P'l'm}$.

Ο πίνακας σκέδασης σωματιδίων με κυλινδρική συμμετρία υπολογίζεται, όπως είδαμε παραπάνω, αξιοποιώντας αυτή τη συμμετρία, σε ένα ενδογενές σύστημα συντεταγμένων του σωματιδίου, με τον άξονα z κατά μήκος του άξονα συμμετρίας. Προφανώς, σε ένα διαφορετικό σύστημα συντεταγμένων ή, ισοδύναμα, για ένα στραμμένο σωματίδιο στο αρχικό σύστημα συντεταγμένων, για τον υπολογισμό του πίνακα σκέδασης πρέπει να χρησιμοποιηθούν κατάλληλοι πινάκες στροφής κατά γωνίες του Euler. Αν α, β, γ είναι οι γωνίες του Euler που μετασχηματίζουν ένα τυχαίο σύστημα συντεταγμένων στο ενδογενές σύστημα συντεταγμένων του σωματιδίου, ο πίνακας σκέδασης δίνεται από την

$$T_{Plm;P'l'm'} = \sum_{m_1=-l}^{l}\sum_{m_1'=-l'}^{l'} D^{(l)}_{mm_1}(\alpha,\beta,\gamma)T^0_{Plm_1;P'l'm_1'}D^{(l')}_{m_1'm'}(-\gamma,-\beta,-\alpha,) , \tag{2.44}$$

όπου ο T^0 αναφέρεται στο ενδογενές σύστημα συντεταγμένων του σωματιδίου.

2.6 Ενεργός διατομή σκέδασης, απόσβεσης και απορρόφησης

Η περιγραφή της σκέδασης από ένα σωματίδιο γίνεται συνήθως με όρους ισχύος που σκεδάζεται ή απορροφάται από το σωματίδιο. Η *ενεργός διατομή σκέδασης ή απορρόφησης* εκφράζει την ισχύ που σκεδάζεται ή απορροφάται από το σκεδαστή και κανονικοποιείται συνήθως ως προς τη μέση ισχύ της προσπίπτουσας ακτινοβολίας που διέρχεται από μια επιφάνεια ίση με μια τομή του σωματιδίου με επίπεδο κάθετο στη διεύθυνση πρόσπτωσης. Η προσπίπτουσα πυκνότητα ροής ενέργειας εκφράζεται από τη συνιστώσα του διανύσματος Poynting κατά τη διεύθυνση διάδοσης της ακτινοβολίας. Για ένα μονοχρωματικό αρμονικό κύμα, η μέση τιμή του διανύσματος Poynting σε μία περίοδο δίδεται από την Εξ. (1.12) και η μέση τιμή της ισχύος που διέρχεται από μια επιφάνεια A, με τη βοήθεια του θεωρήματος της απόκλισης του Gauss (Α′.13), μπορεί να γραφεί

$$P = \int_A d^2r\ \widehat{\mathbf{n}}\cdot < \mathbf{S}(\mathbf{r}) > \ . \tag{2.45}$$

Για ένα μονοχρωματικό αρμονικό επίπεδο προσπίπτον κύμα, που έχει τη μορφή της Εξ. (1.23), η μέση πυκνότητα ροής ενέργειας κάθετα στη διεύθυνση διάδοσης παίρνει τη μορφή

$$< \mathbf{S}_0 > \cdot\widehat{\mathbf{q}} = \frac{1}{2Z_h}\left|E_0\right|^2 \ . \tag{2.46}$$

Η ισχύς της σκεδαζόμενης ακτινοβολίας προκύπτει από την ολοκλήρωση του διανύσματος Poynting για το σκεδαζόμενο πεδίο πάνω στην επιφάνεια A σφαίρας που περιβάλλει το σωματίδιο. Χρησιμοποιώντας τις Εξ. (2.2), και τα Παραρτήματα Β′ και Γ′ προκύπτει

$$P_{\mathrm{sc}} = \frac{1}{2}\mathrm{Re}\int_A d^2r\ \widehat{\mathbf{r}}\cdot[\mathbf{E}_{\mathrm{sc}}(\mathbf{r})\times\mathbf{H}^*_{\mathrm{sc}}(\mathbf{r})] = \frac{1}{2Z_hq_h^2}\sum_{Plm}\left|a^+_{Plm}\right|^2 \ . \tag{2.47}$$

Λόγω διατήρησης της ενέργειας, η ισχύς που απορροφάται από το σωματίδιο θα ισούται με το αντίθετο της ισχύος που εκρέει συνολικά από την επιφάνεια A, η οποία γράφεται

$$P_{\mathrm{out}} = \frac{1}{2}\mathrm{Re}\int_A d^2r\ \widehat{\mathbf{r}}\cdot[\mathbf{E}_{\mathrm{out}}(\mathbf{r})\times\mathbf{H}^*_{\mathrm{out}}(\mathbf{r})] \equiv P_0 + P_{\mathrm{sc}} - P_{\mathrm{ext}}\ , \tag{2.48}$$

όπου

$$P_0 = \frac{1}{2}\mathrm{Re}\int_A d^2r\ \widehat{\mathbf{r}}\cdot[\mathbf{E}_0(\mathbf{r})\times\mathbf{H}^*_0(\mathbf{r})] = 0 \tag{2.49}$$

και

$$\begin{aligned} P_{\mathrm{ext}} &= -\frac{1}{2}\mathrm{Re}\int_A d^2r\ \widehat{\mathbf{r}}\cdot[\mathbf{E}_0(\mathbf{r})\times\mathbf{H}^*_{\mathrm{sc}}(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_{\mathrm{sc}}(\mathbf{r})\times\mathbf{H}^*_0(\mathbf{r})] = \\ &= -\frac{1}{2Z_hq_h^2}\sum_{Plm}\mathrm{Re}\left(a^{0*}_{Plm}a^+_{Plm}\right) \end{aligned} \tag{2.50}$$

είναι η ισχύς που σχετίζεται με την αλληλεπίδραση του προσπίπτοντος με το σκεδαζόμενο πεδίο και ονομάζεται ενέργεια *απόσβεσης*. Λόγω της αρχής διατήρησης της ενέργειας θα ισχύει $P_{\mathrm{abs}} = -P_{\mathrm{out}} = P_{\mathrm{ext}} - P_{\mathrm{sc}}$, δηλαδή η ενέργεια απόσβεσης εκφράζει τη συνολική ενέργεια που παρέχεται από την πηγή του εισερχόμενου κύματος στο σωματίδιο. Από τις Εξ. (2.4) και (1.31) προκύπτει

$$\begin{aligned} P_{\mathrm{sc}} &= \frac{1}{2Z_hq_h^2}\sum_{Plm}\left|\sum_{P'l'm'}T_{Plm;P'l'm'}A^0_{P'l'm';\mathrm{p}}\right|^2\left|E_0\right|^2 \\ P_{\mathrm{ext}} &= -\frac{1}{2Z_hq_h^2}\mathrm{Re}\sum_{Plm}\left(A^0_{Plm;\mathrm{p}}\right)^*\sum_{P'l'm'}T_{Plm;P'l'm'}A^0_{P'l'm';\mathrm{p}}\left|E_0\right|^2\ , \end{aligned} \tag{2.51}$$

όπου ο δείκτης p εκφράζει την πόλωση του προσπίπτοντος κύματος (p $= 1, 2$ για πόλωση TM και TE, αντίστοιχα). Είναι σαφές ότι, εκτός από την περίπτωση σκεδαστών με σφαιρική συμμετρία, η ενεργός διατομή εξαρτάται από την πόλωση και τη διεύθυνση διάδοσης του προσπίπτοντος κύματος.

Για σκεδαστές με κυκλική διατομή ακτίνας S, οι σχετικές ενεργές διατομές ορίζονται από τη σχέση $\sigma = P/P_0$, όπου $P_0 = \pi S^2 |E_0|^2/(2Z_h)$. Για απλούς ισοτροπικούς ή δισοτροπικούς σφαιρικούς σκεδαστές, η διεύθυνση πρόσπτωσης δεν έχει σημασία και έτσι, για λόγους απλούστευσης των πράξεων, θεωρούμε πρόσπτωση κατά τη διεύθυνση z ($\widehat{\mathbf{q}} = \widehat{\mathbf{z}}$). Για ένα γραμμικό πολωμένο προσπίπτον κύμα, θεωρούμε ότι το ηλεκτρικό πεδίο έχει συνιστώσα μόνο κατά τον άξονα x. Τότε, για τις περιπτώσεις απλού ισοτροπικού καθώς και δισοτροπικού σκεδαστή μας επιτρέπεται να υπολογίσουμε τα αθροίσματα ως προς m των συντελεστών A^0 αφού ο πίνακας T δεν εξαρτάται από το m. Από τις σχέσεις (1.31), (1.33), (1.34), και με τη βοήθεια της (Β′.8) καταλήγουμε στις ακόλουθες εκφράσεις για την περίπτωση απλού ισοτροπικού σκεδαστή

$$\begin{aligned}\sigma_{\mathrm{sc}} &= \frac{2}{(q_h S)^2} \sum_l (2l+1) \left(|T_{Hl}|^2 + |T_{El}|^2 \right) \\ \sigma_{\mathrm{ext}} &= -\frac{2}{(q_h S)^2} \sum_l (2l+1) \,\mathrm{Re}\,(T_{Hl} + T_{El}) \ .\end{aligned} \tag{2.52}$$

Στα ίδια αποτελέσματα καταλήγουμε και για κυκλικά πολωμένο (LCP ή RCP) προσπίπτον κύμα. Οι ενεργές διατομές σκέδασης και απορρόφησης, εν γένει, εμφανίζουν συντονισμούς στις συχνότητες των ιδιοκαταστάσεων του σωματιδίου, όπως θα δούμε και σε συγκεκριμένα παραδείγματα. Οι καταστάσεις αυτές είναι μη μηδενικές λύσεις του ΗΜ πεδίου απουσία εξωτερικής διέγερσης και εμφανίζονται στους πόλους του πίνακα T, σε ιδιοσυχνότητες $\omega_i - i\gamma_i$, $\gamma_i \ll \omega_i$, στο κάτω μιγαδικό ημιεπίπεδο.

Για την περίπτωση όπου έχουμε πρόσπτωση γραμμικά πολωμένου κύματος σε δισοτροπικό σκεδαστή, ακολουθώντας ανάλογα βήματα όπως και στην περίπτωση του απλού ισοτροπικού σκεδαστή, βρίσκουμε

$$\begin{aligned}\sigma_{\mathrm{sc}} &= \frac{2}{(q_h S)^2} \sum_l (2l+1) \left(|T_{HH;l}|^2 + |T_{EE;l}|^2 + 2\,|T_{HE;l}|^2 \right) \\ \sigma_{\mathrm{ext}} &= -\frac{2}{(q_h S)^2} \sum_l (2l+1) \,\mathrm{Re}\,(T_{HH;l} + T_{EE;l}) \ .\end{aligned} \tag{2.53}$$

Αντίστοιχα, οι κανονικοποιημένες ενεργές διατομές σκέδασης και απόσβεσης για LCP και RCP προσπίπτον επίπεδο κύμα, σε δισοτροπικό σφαιρικό σκεδαστή γράφονται

$$\begin{aligned}\sigma_{\mathrm{sc};L} &= \frac{2}{(q_h S)^2} \sum_l (2l+1) \Big[|T_{HH;l}|^2 + |T_{EE;l}|^2 + 2|T_{HE;l}|^2 - 2\mathrm{Im}\Big[(T_{HH;l} + T_{EE;l}) T^*_{HE;l} \Big] \Big] \\ \sigma_{\mathrm{sc};R} &= \frac{2}{(q_h S)^2} \sum_l (2l+1) \Big[|T_{HH;l}|^2 + |T_{EE;l}|^2 + 2|T_{HE;l}|^2 + 2\mathrm{Im}\Big[(T_{HH;l} + T_{EE;l}) T^*_{HE;l} \Big] \Big] \\ \sigma_{\mathrm{ext};L} &= -\frac{2}{(q_h S)^2} \sum_l (2l+1) \mathrm{Re}\Big[T_{HH;l} + T_{EE;l} - 2iT_{HE;l} \Big] \\ \sigma_{\mathrm{ext};R} &= -\frac{2}{(q_h S)^2} \sum_l (2l+1) \mathrm{Re}\Big[T_{HH;l} + T_{EE;l} + 2iT_{HE;l} \Big] \ .\end{aligned} \tag{2.54}$$

Κεφάλαιο 3

Η μέθοδος στρωματικής πολλαπλής σκέδασης

Μεταξύ των μεθόδων που έχουν αναπτυχθεί για τη θεωρητική μελέτη περιοδικών φωτονικών δομών, η μέθοδος στρωματικής πολλαπλής σκέδασης είναι ιδιαίτερα ελκυστική λόγω των πολλών πλεονεκτημάτων που προσφέρει. Είναι γρήγορη και ακριβής υπολογιστικά, διότι συνδυάζει την ανάπτυξη σε σφαιρικά κύματα για την περιγραφή της σκέδασης από μεμονωμένα σωματίδια και 2Δ περιοδικές δομές σωματιδίων με την ανάπτυξη σε επίπεδα κύματα για τη σκέδαση μεταξύ διαδοχικών τέτοιων επιστρώσεων. Οι δομές που μπορεί να περιγράψει συνίστανται από ομοιογενή πλακίδια ή 2Δ περιοδικές διατάξεις σκεδαστών διαφόρων τύπων, ή και συνδυασμούς των παραπάνω, με μόνη προϋπόθεση οι επιστρώσεις να έχουν την ίδια 2Δ περιοδικότητα. Η μέθοδος υπολογίζει τόσο τους συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης πεπερασμένων πλακιδίων όσο και τη μιγαδική φωτονική δομή ζωνών ενός αντίστοιχου άπειρου κρυστάλλου. Επιπλέον, επειδή οι εξισώσεις του Maxwell επιλύονται στο πεδίο των συχνοτήτων, η περιγραφή υλικών με διασπορά, όπως είναι για παράδειγμα τα μέταλλα, είναι άμεση. Στο παρόν κεφάλαιο παρουσιάζουμε εκτενώς τη μέθοδο στρωματικής πολλαπλής σκέδασης, ξεκινώντας από τη σκέδαση από μεμονωμένο σκεδαστή που αναπτύξαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο. Εξετάζουμε αρχικά την πολλαπλή σκέδαση σε μια 2Δ περιοδική διάταξη σκεδαστών και το συνδυασμό διαδοχικών τέτοιων επιστρώσεων αλλάζοντας βάση ανάπτυξης των ΗΜ κυμάτων, από σφαιρικά σε επίπεδα. Δείχνουμε πώς μπορεί κανείς να υπολογίσει όχι μόνο τους μιγαδικούς συντελεστές διέλευσης και ανάκλασης από πεπερασμένα πλακίδια, αλλά και τις ιδιοκαταστάσεις ενός επιπέδου σκεδαστών ή σύνθετου πλακιδίου. Ακολούθως παρουσιάζουμε τον υπολογισμό της μιγαδικής φωτονικής δομής ζωνών άπειρου κρυστάλλου, συνυφασμένης με ένα δεδομένο κρυσταλλογραφικό επίπεδο, καθώς και του συντελεστή ανάκλασης και των επιφανειακών καταστάσεων (αν υπάρχουν) του αντίστοιχου ημιάπειρου κρυστάλλου.

3.1 Θεωρία πολλαπλής σκέδασης

Θεωρούμε ένα σύστημα από μη αλληλεπικαλυπτόμενους σκεδαστές, σε ομοιογενές απλό ισοτροπικό περιβάλλον μέσο (σχετικής) διηλεκτρικής σταθεράς ϵ_h και μαγνητικής διαπερατότητας μ_h, διατεταγμένους - περιοδικά ή τυχαία - σε θέσεις $\mathbf{R}_n$. Χρησιμοποιώντας τις μαθηματικές ταυτότητες (1.32) και [8]

$$\frac{\exp(iq\,|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = 4\pi iq \sum_{lm} j_l(qr_<)h_l^+(qr_>)Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}') \ , \tag{3.1}$$

με $r_< \equiv \min(r,r')$ και $r_> \equiv \max(r,r')$, μπορούμε να εκφράσουμε τα εξερχόμενα βαθμωτά σφαιρικά κύματα γύρω από τη θέση $\mathbf{R}_{n'}$ ως εισερχόμενα στη θέση $\mathbf{R}_n$, ως εξής [26]:

$$h^+_{l'}(q_h r_{n'}) Y_{l'm'}(\widehat{\mathbf{r}}_{n'}) = \sum_{lm} G_{l'm';lm}(\mathbf{R}_{nn'}) j_l(q_h r_n) Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}_n) \quad (r_n < R_{nn'}) \ , \tag{3.2}$$

όπου $q_h = \omega\sqrt{\epsilon_h \mu_h}/c$ $\mathbf{R}_{nn'} = \mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}$, $\mathbf{r}_{n'} = \mathbf{r} - \mathbf{R}_{n'}$ και $\mathbf{r}_n = \mathbf{r} - \mathbf{R}_n$. Οι συντελεστές $G_{lm;l'm'}$ στην παραπάνω έκφραση δίνονται από την

$$\begin{aligned} G_{lm;l'm'}(\mathbf{R}_{nn'}) &= 4\pi \sum_{l''m''} (-1)^{(l-l'-l'')/2} (-1)^{m'+m''} B_{lm}(l''m'';l'm') \\ &\times \ h^+_{l''}(q_h R_{nn'}) Y_{l''-m''}(\widehat{\mathbf{R}}_{nn'}) \ , \end{aligned} \tag{3.3}$$

με

$$B_{lm}(l''m'';l'm') = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \; Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) Y_{l'-m'}(\widehat{\mathbf{r}}) Y_{l''m''}(\widehat{\mathbf{r}}) \ . \tag{3.4}$$

Αντίστοιχα, για τα εξερχόμενα διανυσματικά σφαιρικά κύματα μπορούμε να γράψουμε

$$\mathbf{H}_{P'l'm'}(\mathbf{r}_{n'}) = \sum_{Plm} \Omega^{nn'}_{Plm;P'l'm'} \mathbf{J}_{Plm}(\mathbf{r}_n) \quad (r_n < R_{nn'}) \ . \tag{3.5}$$

Για τον υπολογισμό του πίνακα Ω προχωράμε ως εξής: Από τη σχέση που συνδέει δύο εγκάρσια σφαιρικά κύματα [Εξ. (1.27)] μπορούμε, δρώντας με τον τελεστή $(i/q)\nabla\times$ στην Εξ. (3.5) για $P = H$ και συγκρίνοντας με την αντίστοιχη για $P = E$, να δούμε ότι $\Omega^{nn'}_{Elm;El'm'} = \Omega^{nn'}_{Hlm;Hl'm'}$ και $\Omega^{nn'}_{Elm;Hl'm'} = -\Omega^{nn'}_{Hlm;El'm'}$. Συνεπώς, αρκεί ο προσδιορισμός των $\Omega^{nn'}_{Hlm;Hl'm'}$, $\Omega^{nn'}_{Elm;Hl'm'}$. Εύκολα φαίνεται ότι

$$\Omega^{nn'}_{Hlm;Hl'm'} = \frac{\int_0^{2\pi} d\phi_n \int_0^{\pi} d\theta_n \sin\theta_n \; \mathbf{H}_{Hl'm'}(\mathbf{r}_{n'}) \cdot \mathbf{X}^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}_n)}{j_l(q_h r_n)} \tag{3.6}$$

αν λάβουμε υπόψη τις Εξ. (Β′.33), (Β′.37) και (Β′.38), καθώς και ότι

$$\Omega^{nn'}_{Elm;Hl'm'} = -\frac{q_h r_n \int_0^{2\pi} d\phi_n \int_0^{\pi} d\theta_n \sin\theta_n \; \mathbf{H}_{Hl'm'}(\mathbf{r}_{n'}) \cdot \widehat{\mathbf{r}}_n Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}_n)}{\psi_l j_l(q_h r_n)} \ . \tag{3.7}$$

Στις παραπάνω εκφράσεις, το κύμα $\mathbf{H}_{Hl'm'}(\mathbf{r}_{n'})$, που εξέρχεται από τη θέση $\mathbf{R}_{n'}$, αναπτύσσεται σε εισερχόμενα κύματα ως προς τις διάφορες θέσεις $\mathbf{R}_n$. Με τη βοήθεια της Εξ. (3.2) και της έκφρασης των διανυσματικών σφαιρικών αρμονικών σε καρτεσιανές συντεταγμένες, Εξ. (Β′.27), παίρνουμε

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{El'm'}(\mathbf{r}_{n'}) &= \frac{1}{\psi_{l'}} \sum_{l''m''} \Big[\alpha^{-m'}_{l'} G_{l'm'-1;l''m''}(\mathbf{R}_{nn'}) \, (\widehat{\mathbf{x}} + i\widehat{\mathbf{y}}) + m' G_{l'm';l''m''}(\mathbf{R}_{nn'}) \, \widehat{\mathbf{z}} \\ &+ \ \alpha^{m'}_{l'} G_{l'm'+1;l''m''}(\mathbf{R}_{nn'}) \, (\widehat{\mathbf{x}} - i\widehat{\mathbf{y}}) \Big] j_{l''}(q_h r_n) Y_{l''m''}(\widehat{\mathbf{r}}_n) \ . \end{aligned} \tag{3.8}$$

Από την Εξ. (3.6), μέσω της (3.8), βρίσκουμε ότι

$$\begin{aligned}\Omega^{nn'}_{Hlm;Hl'm'} &= \Omega^{nn'}_{Elm;El'm'} = \frac{1}{\psi_l\psi_{l'}}\Big[2\alpha_l^{-m}\alpha_{l'}^{-m'}G_{l'm'-1;lm-1}(\mathbf{R}_{nn'}) \\ &+ mm'G_{l'm';lm}(\mathbf{R}_{nn'}) + 2\alpha_l^{m}\alpha_{l'}^{m'}G_{l'm'+1;lm+1}(\mathbf{R}_{nn'})\Big] \ . \qquad (3.9)\end{aligned}$$

Επιπλέον, από την Εξ. (3.7), μέσω των (3.8) και (Β′.42), καταλήγουμε στην έκφραση

$$\Omega^{nn'}_{Elm;Hl'm'} = -\frac{1}{\psi_l\psi_{l'}}\frac{q_h r_n}{j_l(q_h r_n)}\left[j_{l+1}(q_h r_n)\mathcal{F}^{+}_{l'm';lm} + j_{l-1}(q_h r_n)\mathcal{F}^{-}_{l'm';lm}\right] \ , \qquad (3.10)$$

όπου

$$\begin{aligned}\mathcal{F}^{+}_{lm;l'm'} &= 2\alpha_l^{-m}\gamma_{l'+1}^{-m'+1}G_{lm-1;l'+1m'-1}(\mathbf{R}_{nn'}) + m\,\zeta_{l'+1}^{m'}G_{lm;l'+1m'}(\mathbf{R}_{nn'}) \\ &\quad -2\alpha_l^{m}\gamma_{l'+1}^{m'+1}G_{lm+1;l'+1m'+1}(\mathbf{R}_{nn'}) \\ \mathcal{F}^{-}_{lm;l'm'} &= -2\alpha_l^{-m}\gamma_{l'}^{m'}G_{lm-1;l'-1m'-1}(\mathbf{R}_{nn'}) + m\,\zeta_{l'}^{m'}G_{lm;l'-1m'}(\mathbf{R}_{nn'}) \\ &\quad +2\alpha_l^{m}\gamma_{l'}^{-m'}G_{lm+1;l'-1m'+1}(\mathbf{R}_{nn'}) \qquad (3.11)\end{aligned}$$

και

$$\gamma_l^m = \frac{\left[(l+m)\,(l+m-1)\right]^{1/2}}{2\left[(2l-1)\,(2l+1)\right]^{1/2}} \ , \qquad (3.12)$$

$$\zeta_l^m = \frac{\left[(l+m)\,(l-m)\right]^{1/2}}{\left[(2l-1)\,(2l+1)\right]^{1/2}} \ . \qquad (3.13)$$

Από τις Εξ. (3.3), (3.4) και (3.11) έχουμε

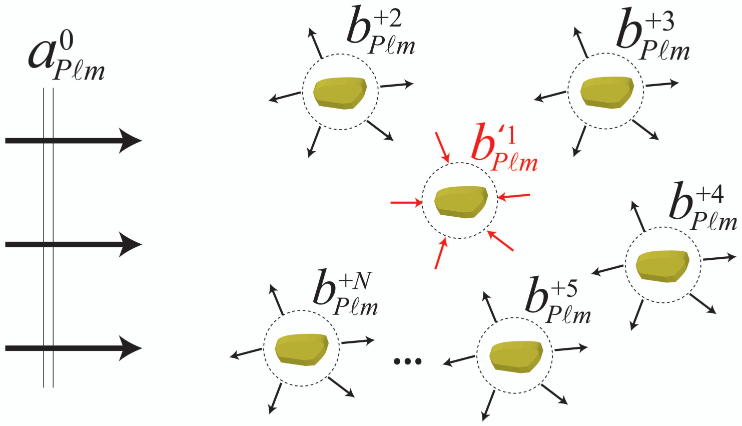
$$\begin{aligned}&\mathcal{F}^{+}_{lm;l'm'} - \mathcal{F}^{-}_{lm;l'm'} = 4\pi\sum_{l''m''} i^{l-l'-l''-1}\,(-1)^{m'+m''-1}\,h^{+}_{l''}(q_h R_{nn'})Y_{l''-m''}(\widehat{\mathbf{R}}_{nn'}) \\ \times &\int_0^{2\pi} d\phi\int_0^{\pi} d\theta\sin\theta\; Y_{l''m''}(\widehat{\mathbf{r}})\Big\{2\alpha_l^{-m}Y_{lm-1}(\widehat{\mathbf{r}})\left[\gamma_{l'+1}^{-m'+1}Y_{l'+1-m'+1}(\widehat{\mathbf{r}}) - \gamma_{l'}^{m'}Y_{l'-1-m'+1}(\widehat{\mathbf{r}})\right] \\ - \;& mY_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\left[\zeta_{l'+1}^{m'}Y_{l'+1-m'}(\widehat{\mathbf{r}}) + \zeta_{l'}^{m'}Y_{l'-1-m'}(\widehat{\mathbf{r}})\right] \\ - \;& 2\alpha_l^{m}Y_{lm+1}(\widehat{\mathbf{r}})\left[\gamma_{l'+1}^{m'+1}Y_{l'+1-m'-1}(\widehat{\mathbf{r}}) - \gamma_{l'}^{-m'}Y_{l'-1-m'-1}(\widehat{\mathbf{r}})\right]\Big\} \qquad (3.14)\end{aligned}$$

και με τη βοήθεια των Εξ. (Β′.12), (Β′.13), (Β′.14) και (Β′.15), προκύπτει ότι

$$\mathcal{F}^{+}_{lm;l'm'} = \mathcal{F}^{-}_{lm;l'm'} \ . \qquad (3.15)$$

Έτσι, από την Εξ. (3.10), μέσω της (3.15) και της (Γ′.19) έχουμε

$$\begin{aligned}\Omega^{nn'}_{Hlm;El'm'} &= -\Omega^{nn'}_{Elm;Hl'm'} = \frac{2l+1}{\psi_l\psi_{l'}}\Big[-2\alpha_{l'}^{-m'}\gamma_l^{m}G_{l'm'-1;l-1m-1}(\mathbf{R}_{nn'}) \\ &+ m'\zeta_l^{m}G_{l'm';l-1m}(\mathbf{R}_{nn'}) + 2\alpha_{l'}^{m'}\gamma_l^{-m}G_{l'm'+1;l-1m+1}(\mathbf{R}_{nn'})\Big] \ . \qquad (3.16)\end{aligned}$$



Σχήμα 3.1: Το κύμα που προσπίπτει σε ένα σκεδαστή ('1') ισούται με το άθροισμα των κυμάτων που εξέρχονται από όλους τους υπόλοιπους σκεδαστές συν το εξωτερικά προσπίπτον κύμα.

Σημειώνουμε ότι για $n = n'$ εξ ορισμού $\Omega^{nn'}_{Plm;P'l'm'} = 0$.

Έτσι, ένα εξερχόμενο κύμα γύρω από τη θέση $\mathbf{R}_{n'}$, $\sum_{P'l'm'} b^{+n'}_{P'l'm'}\mathbf{H}_{P'l'm'}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{n'})$, μπορεί να γραφεί ως εισερχόμενο γύρω από τη θέση $\mathbf{R}_n$, $\sum_{Plm} b'^{n}_{Plm}(n')\mathbf{J}_{Plm}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_n)$, όπου

$$b'^{n}_{Plm}(n') = \sum_{P'l'm'} \Omega^{nn'}_{Plm;P'l'm'} b^{+n'}_{P'l'm'} \ . \tag{3.17}$$

Το σκεδαζόμενο κύμα από το σωματίδιο στη θέση $\mathbf{R}_n$ προσδιορίζεται από το ολικό προσπίπτον κύμα σε αυτό το σωματίδιο

$$b^{+n}_{Plm} = \sum_{P'l'm'} T^{n}_{Plm;P'l'm'}\left[a^{0n}_{P'l'm'} + \sum_{n' \neq n} b'^{n}_{P'l'm'}(n')\right] , \tag{3.18}$$

με $T^{n}_{Plm;P'l'm'}$ τα στοιχεία του πίνακα σκέδασης του σωματιδίου στη θέση $\mathbf{R}_n$, και $a^{0n}_{P'l'm'}$ τους συντελεστές πολυπολικής ανάπτυξης γύρω από τη θέση $\mathbf{R}_n$ ενός εξωτερικά προσπίπτοντος κύματος, όπως δείχνουμε σχηματικά στο Σχ. 3.1. Από τις Εξ. (3.17) και (3.18) έχουμε

$$\sum_{n'P'l'm'}\left[\delta_{nn'}\delta_{Plm;P'l'm'} - \sum_{P''l''m''} T^{n}_{Plm;P''l''m''}\Omega^{nn'}_{P''l''m'';P'l'm'}\right] b^{+n'}_{P'l'm'} = \sum_{P'l'm'} T^{n}_{Plm;P'l'm'} a^{0n}_{P'l'm'} \ . \tag{3.19}$$

Αν έχουμε μια περιοδική δομή, που περιγράφεται από τα διανύσματα πλέγματος Bravais, $\mathbf{R}_\lambda$, και τα μη θεμελιώδη διανύσματα $\mathbf{t}_\alpha$ που ορίζουν τις θέσεις των σκεδαστών (εάν υπάρχουν περισσότεροι από ένας) στη μοναδιαία κυψελίδα, ο δείκτης της πλεγματικής θέσης, n, αντιστοιχεί στον σύνθετο δείκτη $\lambda\alpha$. Οι ιδιοκαταστάσεις του κρυστάλλου προσδιορίζονται μηδενίζοντας το εξωτερικά προσπίπτον κύμα στην Εξ. (3.19), κι εφόσον αυτές ικανοποιούν το θεώρημα Bloch, $b^{+\lambda'\alpha'}_{P'l'm'} = \exp(i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{R}_{\lambda'} - \mathbf{R}_\lambda])b^{+\lambda\alpha'}_{P'l'm'}$, όπου $\mathbf{k}$ το κυματάνυσμα Bloch, παίρνουμε την καταστατική εξίσωση

$$\det\left[\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{Plm;P'l'm'} - \sum_{P''l''m''} T^{\alpha}_{Plm;P''l''m''}\Omega^{\alpha\alpha'}_{P''l''m'';P'l'm'}(\mathbf{k})\right] = 0 \ , \tag{3.20}$$

με

$$\Omega^{\alpha\alpha'}_{Plm;P'l'm'}(\mathbf{k}) = \sum_{\lambda'} \Omega^{nn'}_{Plm;P'l'm'} \exp(-i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{R}_\lambda - \mathbf{R}_{\lambda'}]) \ , \tag{3.21}$$

το οποίο δεν εξαρτάται από το λ, και

$$\Omega^{nn'}_{Plm;P'l'm'} = \frac{1}{v}\int_{\mathrm{ZB}} d^3q \exp(i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{R}_\lambda - \mathbf{R}_{\lambda'}])\ \Omega^{\alpha\alpha'}_{Plm;P'l'm'}(\mathbf{k}) \ , \tag{3.22}$$

με v τον όγκο της πρώτης ζώνης Brillouin (ZB). Τόσο τα $T^{\alpha}_{Plm;P'l'm'}$ όσο και τα $\Omega^{\alpha\alpha'}_{Plm;P'l'm'}(\mathbf{k})$ είναι συναρτήσεις της συχνότητας. Όμως τα $T^{\alpha}_{Plm;P'l'm'}$ εξαρτώνται μόνο από τις ιδιότητες του ενός σκεδαστή, ενώ τα $\Omega^{\alpha\alpha'}_{Plm;P'l'm'}(\mathbf{k})$ εξαρτώνται μόνο από τη γεωμετρία και ονομάζονται *σταθερές δομής*, σύμφωνα με την ορολογία της μεθόδου KKR [27, 28] στο πρόβλημα της ηλεκτρονικής δομής ζωνών περιοδικών στερεών. Ο υπολογισμός των σταθερών δομής, που αρκεί να γίνει μόνο μία φορά για ένα δεδομένο πλέγμα, απαιτεί συνήθως τη χρήση τεχνικών άθροισης Ewald [29], διότι το πλεγματικό άθροισμα στον ευθύ χώρο συγκλίνει συνήθως αργά. Εξαίρεση αποτελούν περιπτώσεις όπου δεν υπάρχουν διαδιδόμενα κύματα στο μητρικό υλικό, όπως σε μέταλλα κάτω από τη συχνότητα πλάσματος ή σε ετεροπολικά υλικά εντός του πολαριτονικού χάσματος, οπότε οι διαδότες $\Omega^{nn'}_{Plm;P'l'm'}$ φθίνουν εκθετικά με την απόσταση $|\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}|$ και τότε προτιμάται η απευθείας άθροιση στον ευθύ χώρο.

Τέλος, σημειώνουμε ότι, παρά το γεγονός ότι στην Εξ. (3.20) υπεισέρχονται πίνακες άπειρων διαστάσεων, σε πραγματικούς υπολογισμούς η σύγκλιση είναι γρήγορη με τις διαστάσεις των πινάκων και αρκεί να αποκόψουμε τον δείκτη της στροφορμής, l, σε κάποια σχετικά μικρή τιμή, $l_{\max}$. Στο γεγονός αυτό οφείλεται, μεταξύ άλλων, και η αποτελεσματικότητα των μεθόδων πολλαπλής σκέδασης.

3.2 Διδιάστατη περιοδική δομή

Στην παρούσα διατριβή θα εξετάσουμε δομές που οικοδομούνται στρωματικά, έστω κατά τη διεύθυνση z. Είτε μελετάμε πεπερασμένες, είτε άπειρες κατά αυτή τη διεύθυνση δομές, βασικό συστατικό είναι ένα σύνθετο πλακίδιο το οποίο αποτελείται, στη γενική περίπτωση, από ομοιογενή ή/και ανομοιογενή πλακίδια από μη αλληλεπικαλυπτόμενους σκεδαστές, διατεταγμένους περιοδικά σε ένα ή περισσότερα επίπεδα με την ίδια 2Δ περιοδικότητα, παράλληλα στο επίπεδο $x-y$. Αυτή η περιοδικότητα διαδραματίζει κεντρικό ρόλο στην όλη γεωμετρική περιγραφή των συστημάτων. Ας ξεκινήσουμε από την περίπτωση ενός και μόνο επιπέδου, στη θέση $z=0$, με τα κέντρα των σκεδαστών στις πλεγματικές θέσεις ενός 2Δ πλέγματος που ορίζεται από τα διανύσματα

$$\mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 \ , \tag{3.23}$$

με $n_1, n_2 = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \ldots$, και με $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ τα θεμελιώδη διανύσματα στο επίπεδο $x-y$. Ορίζουμε το αντίστοιχο 2Δ αντίστροφο πλέγμα

$$\mathbf{g} = m_1\mathbf{b}_1 + m_2\mathbf{b}_2 \ , \tag{3.24}$$

με $m_1, m_2 = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \ldots$, και με τα θεμελιώδη διανύσματα του αντίστροφου πλέγματος, $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$, να ορίζονται από τις σχέσεις

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij} \ , i,j = 1,2 \ . \tag{3.25}$$

Επειδή, όπως είπαμε, οι δομές που μελετάμε παρουσιάζουν 2Δ περιοδικότητα κάθετα στη διεύθυνση z, είναι βολικό να γράφουμε την παράλληλη στο επίπεδο $x-y$ συνιστώσα του κυματανύσματος ενός επίπεδου προσπίπτοντος κύματος ως

$$\mathbf{q}_\parallel = \mathbf{k}_\parallel + \mathbf{g}' \ , \tag{3.26}$$

όπου $\mathbf{k}_\parallel$ η παράλληλη στο επίπεδο και ανηγμένη στην επιφανειακή ζώνη Brillouin (ΕΖΒ) συνιστώσα του κυματανύσματος και $\mathbf{g}'$ κάποιο κατάλληλο διάνυσμα του αντίστροφου πλέγματος (3.24). Σημειώνουμε ότι, με βάση τις Εξ. (3.25) και (3.26), $\exp(i\mathbf{q}_\parallel \cdot \mathbf{R}_n) = \exp(i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{R}_n)$. Στην πράξη, έχοντας δεδομένο το $\mathbf{q}_\parallel$, μπορεί κανείς με διαδοχικές αφαιρέσεις διάφορων διανυσμάτων του αντίστροφου πλέγματος (ξεκινώντας από αυτά με το μικρότερο μήκος και προχωρώντας σε όλο και μεγαλύτερου μήκους τέτοια διανύσματα) να βρει κατάλληλο διάνυσμα $\mathbf{g}'$, ώστε το $\mathbf{q}_\parallel - \mathbf{g}'$ να βρίσκεται μέσα στην ΕΖΒ.

Ένα επίπεδο κύμα που προσπίπτει στην παραπάνω επίπεδη διάταξη γράφεται, επιλέγοντας ως αρχή των συντεταγμένων το κέντρο ενός αυθαίρετα επιλεγμένου σκεδαστή, στη μορφή

$$\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) = [E_0]^{s'}_{\mathbf{g}'\mathrm{p}'} \exp(i\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'} \cdot \mathbf{r}) \ \widehat{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}'}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'}) \ , \tag{3.27}$$

με $s' = +(-)$ για προσπίπτον κύμα κατά τη θετική (αρνητική) κατεύθυνση z. Λαμβάνοντας υπόψη την Εξ. (3.26) γράφουμε

$$\mathbf{K}^{\pm}_{\mathbf{g}'} \equiv \mathbf{k}_\parallel + \mathbf{g}' \pm \left[q_h^2 - \left(\mathbf{k}_\parallel + \mathbf{g}'\right)^2\right]^{1/2} \widehat{\mathbf{z}} \ , \tag{3.28}$$

όπου $q_h = \omega\sqrt{\epsilon_h \mu_h}/c$ το μέτρο του κυματανύσματος στο μέσο που περιβάλλει τους σκεδαστές. Στην Εξ. (3.27), τα $\widehat{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}'}$ αντιστοιχούν στην πολική (p$'=1$, πόλωση TM) ή την αζιμουθιακή (p$'=2$, πόλωση TE) συνιστώσα του πεδίου, οι οποίες προφανώς είναι κάθετες στο $\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'}$. Με τον ίδιο τρόπο ορίζουμε, για δεδομένα ω και $\mathbf{k}_\parallel$, το κυματάνυσμα $\mathbf{K}^s_\mathbf{g}$ και τα αντίστοιχα $\widehat{\mathbf{e}}_\mathrm{p}$ για οποιοδήποτε $\mathbf{g}$. Όταν $(\mathbf{k}_\parallel + \mathbf{g})^2 > q_h^2$ το αντίστοιχο κύμα φθίνει εκθετικά για $z \to +\infty$ για $s = +$, και για $z \to -\infty$ για $s = -$, και τα αντίστοιχα μοναδιαία διανύσματα $\widehat{\mathbf{e}}_\mathrm{p}$ γίνονται μιγαδικά. Πράγματι, τα $\widehat{\mathbf{e}}_\mathrm{p}$ ορίζονται σε καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων ως

$$\begin{aligned}
\widehat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{K}^s_\mathbf{g}) &= \cos\theta\cos\phi\ \widehat{\mathbf{x}} + \cos\theta\sin\phi\ \widehat{\mathbf{y}} - \sin\theta\ \widehat{\mathbf{z}} \ , \\
\widehat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{K}^s_\mathbf{g}) &= -\sin\phi\ \widehat{\mathbf{x}} + \cos\phi\ \widehat{\mathbf{y}} \ ,
\end{aligned} \tag{3.29}$$

με θ και ϕ να δηλώνουν τις γωνιακές μεταβλητές του $\mathbf{K}^s_\mathbf{g}$ (βλ. και Σχ. 1.1). Σημειώνουμε ότι η συνιστώσα z του $\mathbf{K}^s_\mathbf{g}$, $K^s_{\mathbf{g}z}$, είναι πραγματική εάν $(\mathbf{k}_\parallel + \mathbf{g})^2 < q_h^2$ και μιγαδική εάν $(\mathbf{k}_\parallel + \mathbf{g})^2 > q_h^2$. Στην τελευταία περίπτωση τα $\cos\theta$ και $\sin\theta$ στην Εξ. (3.29) αντικαθίστανται από τα $K^s_{\mathbf{g}z}/q_h$ και $\left|\mathbf{k}_\parallel + \mathbf{g}\right|/q_h$, αντίστοιχα, με συνέπεια το $\widehat{\mathbf{e}}_1$ να γίνεται μιγαδικό.

Για ένα προσπίπτον στο επίπεδο των σκεδαστών κύμα της μορφής (3.27), το σκεδαζόμενο κύμα θα γράφεται ως άθροισμα εξερχόμενων σφαιρικών κυμάτων με κέντρα τις θέσεις $\mathbf{R}_n$ των σκεδαστών του επιπέδου, το καθένα από τα οποία θα διαφέρει από το σκεδαζόμενο κύμα από τον κεντρικό σκεδαστή ($\mathbf{R}_n = \mathbf{0}$) μόνο κατά το φασικό παράγοντα $\exp(i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{R}_n)$, εξαιτίας της 2Δ περιοδικότητας της δομής. Έτσι, γράφουμε

$$\mathbf{E}_{\rm sc}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}_n} \exp(i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{R}_n) \sum_{Plm} b^+_{Plm} \mathbf{H}_{Plm}(\mathbf{r}_n) \; , \tag{3.30}$$

όπου $\mathbf{r}_n = \mathbf{r} - \mathbf{R}_n$. Σημειώνουμε ότι $\exp(i[\mathbf{k}_\parallel + \mathbf{g}] \cdot \mathbf{R}_n) = \exp(i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{R}_n)$ λόγω της Εξ. (3.25).

Οι συντελεστές b^+_{Plm}, που σχετίζονται με το σκεδαζόμενο κύμα από τον κεντρικό σκεδαστή, προσδιορίζονται από το ολικό προσπίπτον σε αυτόν κύμα, το οποίο συνίσταται από το προσπίπτον επίπεδο κύμα και από το άθροισμα των σκεδαζόμενων κυμάτων από όλους τους άλλους σκεδαστές του επιπέδου, $\mathbf{E}'_{\rm sc}(\mathbf{r})$. Αυτό μπορεί να βρεθεί από το $\mathbf{E}_{\rm sc}(\mathbf{r})$ αφαιρώντας από την Εξ. (3.30) τον όρο που αντιστοιχεί στο $\mathbf{R}_n = \mathbf{0}$. Από την άλλη, το $\mathbf{E}'_{\rm sc}(\mathbf{r})$ μπορεί να αναπτυχθεί σε άθροισμα σφαιρικών κυμάτων με κέντρο την αρχή των συντεταγμένων

$$\mathbf{E}'_{\rm sc}(\mathbf{r}) = \sum_{Plm} b'_{Plm} \mathbf{J}_{Plm}(\mathbf{r}) \; , \tag{3.31}$$

με τους συντελεστές b'_{Plm} να δίνονται από τη σχέση

$$b'_{Plm} = \sum_{P'l'm'} \Omega_{Plm;P'l'm'}(\mathbf{k}_\parallel) b^+_{P'l'm'} \; . \tag{3.32}$$

Τα $\Omega_{Plm;P'l'm'}$ στην Εξ. (3.32) δεν είναι τίποτε άλλο παρά ο μετασχηματισμός Fourier[1] για $\mathbf{k} = \mathbf{k}_\parallel$ των διαδοτών $\Omega^{nn'}_{Plm;P'l'm'}$ [Εξ. (3.22)] που, θυμίζουμε, εξαρτώνται από τη γεωμετρία του επιπέδου [βλ. Εξ. (3.23)] και, μέσω του q_h, από τη συχνότητα και τα οπτικά χαρακτηριστικά του μέσου που περιβάλλει τους σκεδαστές, ενώ δεν εξαρτώνται από την επιλογή του μεμονωμένου σκεδαστή. Ορίζοντας

$$Z^{l'm'}_{lm}(\mathbf{k}_\parallel) \equiv \sum_{\mathbf{R}_n \neq \mathbf{0}} \exp(i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{R}_n) G_{lm;l'm'}(-\mathbf{R}_n) \; , \tag{3.33}$$

το μετασχηματισμό Fourier των $G_{lm;l'm'}(-\mathbf{R}_n)$ [Εξ. (3.3) με $\mathbf{R}_{nn'} \to -\mathbf{R}_n$], και με τη βοήθεια των Εξ. (3.9) και (3.16), παίρνουμε για τα μη μηδενικά στοιχεία του πίνακα Ω

$$\begin{aligned}
\Omega_{Hlm;Hl'm'}(\mathbf{k}_\parallel) &= \Omega_{Elm;El'm'}(\mathbf{k}_\parallel) = \frac{1}{\psi_l \psi_{l'}} \Big[2\alpha^{-m}_l \alpha^{-m'}_{l'} Z^{lm-1}_{l'm'-1}(\mathbf{k}_\parallel) \\
&\quad + mm' Z^{lm}_{l'm'}(\mathbf{k}_\parallel) + 2\alpha^m_l \alpha^{m'}_{l'} Z^{lm+1}_{l'm'+1}(\mathbf{k}_\parallel) \Big] \; , \\
\Omega_{Hlm;El'm'}(\mathbf{k}_\parallel) &= -\Omega_{Elm;Hl'm'}(\mathbf{k}_\parallel) = \frac{2l+1}{\psi_l \psi_{l'}} \Big[-2\alpha^{-m'}_{l'} \gamma^m_l Z^{l-1m-1}_{l'm'-1}(\mathbf{k}_\parallel) \\
&\quad + m' \zeta^m_l Z^{l-1m}_{l'm'}(\mathbf{k}_\parallel) + 2\alpha^{m'}_{l'} \gamma^{-m}_l Z^{l-1m+1}_{l'm'+1}(\mathbf{k}_\parallel) \Big] \; .
\end{aligned} \tag{3.34}$$

[1] Από την Εξ. (3.21), παραλείποντας τους δείκτες α, α', ταυτίζοντας το λ με το n αφού έχουμε έναν σκεδαστή ανά πλεγματική θέση, και αντιστοιχώντας το $\mathbf{R}_{nn'}$ στο $-\mathbf{R}_n$.

Ο υπολογισμός του πίνακα Ω ανάγεται στον υπολογισμό του πίνακα Z, που είναι γνωστός από τη θεωρία περίθλασης ηλεκτρονίων χαμηλής ενέργειας (Low Energy Electron Diffraction, LEED). Ο αριθμητικός υπολογισμός του γίνεται με χρήση τεχνικών Ewald [30, 31] ή με απευθείας άθροιση στο ευθύ πλέγμα σε περιπτώσεις που αυτή συγκλίνει γρήγορα (βλ. σχετική συζήτηση στην τελευταία παράγραφο του Εδαφίου 3.1). Επιπλέον, η ακόλουθη ιδιότητα των $Z_{lm}^{l'm'}$ [31]

$$Z_{lm}^{l'm'}(\mathbf{k}_{\|}) = 0, \quad \text{εκτός αν} \quad l+m+l'+m' : \text{ άρτιος}, \tag{3.35}$$

διευκολύνει ακόμη περισσότερο τους υπολογισμούς. Από την Εξ. (3.35) μπορεί κανείς να συναγάγει αντίστοιχες ιδιότητες για τα στοιχεία του πίνακα Ω.

$$\begin{aligned}
\Omega_{Hlm;Hl'm'}(\mathbf{k}_{\|}) = \Omega_{Elm;El'm'}(\mathbf{k}_{\|}) = 0 \quad &\text{εκτός αν} \quad l+m+l'+m' : \text{ άρτιος αριθμός} \\
\Omega_{Hlm;El'm'}(\mathbf{k}_{\|}) = -\Omega_{Elm;Hl'm'}(\mathbf{k}_{\|}) = 0 \quad &\text{εκτός αν} \quad l+m+l'+m' : \text{ περιττός αριθμός} \ ,
\end{aligned} \tag{3.36}$$

Οι συντελεστές b^{+}_{Plm}, που περιγράφουν το σκεδαζόμενο κύμα από το σκεδαστή στην αρχή των συντεταγμένων, δίνονται από την εξίσωση

$$b^{+}_{Plm} = \sum_{P'l'm'} T_{Plm;P'l'm'} \left(a^{0}_{P'l'm'} + b'_{P'l'm'} \right) . \tag{3.37}$$

Οι συντελεστές στο δεξιό μέλος της Εξ. (3.37) περιγράφουν το ολικό προσπίπτον κύμα στον κεντρικό σκεδαστή. Οι συντελεστές a^{0}_{Plm} προκύπτουν από το προσπίπτον επίπεδο κύμα (3.27) μέσω της Εξ. (1.31), και οι b'_{Plm} από το πεδίο που ορίζεται στην Εξ. (3.31). Συνδυάζοντας τις Εξ. (3.32) και (3.37), παίρνουμε

$$\sum_{P'l'm'} \left[\delta_{Plm;P'l'm'} - \sum_{P''l''m''} T_{Plm;P''l''m''} \Omega_{P''l''m'';P'l'm'}(\mathbf{k}_{\|}) \right] b^{+}_{P'l'm'} = \sum_{P'l'm'} T_{Plm;P'l'm'} a^{0}_{P'l'm'} \ . \tag{3.38}$$

Η Εξ. (3.38) προσδιορίζει τους συντελεστές b^{+}_{Plm} του σκεδαζόμενου κύματος από το επίπεδο των σκεδαστών, Εξ. (3.30), συναρτήσει των συντελεστών a^{0}_{Plm} του προσπίπτοντος. Με βάση την Εξ. (1.31) γράφουμε τους συντελεστές a^{0}_{Plm} στη μορφή

$$a^{0}_{Plm} = A^{0}_{Plm;\mathrm{p}'}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'}) [E_0]^{s'}_{\mathbf{g}'\mathrm{p}'} \ , \tag{3.39}$$

με τα $\mathbf{A}^{0}_{Plm}$ να δίνονται από τις Εξ. (1.33) και (1.34). Εξαιτίας της γραμμικότητας των Εξ. (3.38) και οι συντελεστές b^{+}_{Plm} μπορούν να γραφούν στη μορφή

$$b^{+}_{Plm} = B^{+}_{Plm;\mathrm{p}'}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'}) [E_0]^{s'}_{\mathbf{g}'\mathrm{p}'} \ , \tag{3.40}$$

και έτσι το σύστημα των Εξ. (3.38) ανάγεται στη μορφή

$$\begin{aligned}
&\sum_{P'l'm'} \left[\delta_{Plm;P'l'm'} - \sum_{P''l''m''} T_{Plm;P''l''m''} \Omega_{P''l''m'';P'l'm'}(\mathbf{k}_{\|}) \right] B^{+}_{P'l'm';\mathrm{p}'}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'}) \\
&\quad = \sum_{P'l'm'} T_{Plm;P'l'm'} A^{0}_{P'l'm';\mathrm{p}'}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'}) \ .
\end{aligned} \tag{3.41}$$

Θυμίζουμε ότι οι s', p', και $\mathbf{g}'$ είναι παράμετροι που χαρακτηρίζουν το προσπίπτον κύμα. Οι Εξ. (3.41) αποτελούν γραμμικό σύστημα με άπειρο πλήθος εξισώσεων, το οποίο στην πράξη επιλύεται εισάγοντας μια μέγιστη τιμή, $l_{\max}$, για τη στροφορμή και αποκόπτοντας όλα τα αναπτύγματα στην αναπαράσταση των σφαιρικών κυμάτων μέχρι αυτή την τιμή. Έτσι, η διάσταση του συστήματος γίνεται $2l_{\max}(l_{\max}+2)$. Αν επιπλέον χρησιμοποιήσουμε την ιδιότητα (3.36) των $\Omega_{Plm;P'l'm'}$, η οποία ισχύει και για τα στοιχεία $T_{Plm;P'l'm'}$ στις περιπτώσεις σκεδαστών που εξετάζουμε, το σύστημα ανάγεται σε δύο ανεξάρτητα συστήματα

$$\sum_{\mathrm{o}'}\left[\delta_{\mathrm{oo}'}-\sum_{\mathrm{o}''}T_{\mathrm{oo}''}\Omega_{\mathrm{o}''\mathrm{o}'}\right]B^{+}_{\mathrm{o}';\mathrm{p}'}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'})=\sum_{\mathrm{o}'}T_{\mathrm{oo}'}A^{0}_{\mathrm{o}';\mathrm{p}'}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'})$$
$$\sum_{\mathrm{e}'}\left[\delta_{\mathrm{ee}'}-\sum_{\mathrm{e}''}T_{\mathrm{ee}''}\Omega_{\mathrm{e}''\mathrm{e}'}\right]B^{+}_{\mathrm{e}';\mathrm{p}'}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'})=\sum_{\mathrm{e}'}T_{\mathrm{ee}'}A^{0}_{\mathrm{e}';\mathrm{p}'}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'})\ , \tag{3.42}$$

όπου $\mathrm{o}=1,2,3,\ldots$ αριθμεί τα στοιχεία πίνακα που αντιστοιχούν σε $Plm=H1{-}1,H11,H2{-}2,\ldots,E10,E2-1,E21,\ldots$ και $\mathrm{e}=1,2,3,\ldots$ αριθμεί τα στοιχεία πίνακα που αντιστοιχούν σε $Plm=H10,H2-1,H21,\ldots,E1-1,E11,E2-2,\ldots$. Η διάσταση καθενός από τα επιμέρους συστήματα είναι $l_{\max}(l_{\max}+2)$.

Το σκεδαζόμενο κύμα, που δίνεται στην Εξ. (3.30) σε μορφή αναπτύγματος σε διανυσματικά σφαιρικά κύματα ως προς τα κέντρα των σκεδαστών, μπορεί με τη βοήθεια της ταυτότητας

$$\sum_{\mathbf{R}_n}\exp(i\mathbf{k}_{\parallel}\cdot\mathbf{R}_n)h^{+}_{l}(q_h r_n)Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}_n)=\sum_{\mathbf{g}}\frac{2\pi(-i)^l}{q_h A_0 K^{+}_{\mathbf{g}z}}Y_{lm}(\widehat{\mathbf{K}}^{s}_{\mathbf{g}})\exp\left(i\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}}\cdot\mathbf{r}\right) \tag{3.43}$$

(βλ. Παράρτημα ϛ′), όπου $A_0=|\mathbf{a}_1\times\mathbf{a}_2|$ είναι η επιφάνεια της θεμελιώδους κυψελίδας του πλέγματος που περιγράφεται από την Εξ. (3.23), να γραφεί ως άθροισμα επίπεδων κυμάτων με ίδια ω και $\mathbf{k}_{\parallel}$

$$\mathbf{E}^{s}_{\mathrm{sc}}(\mathbf{r})=\sum_{\mathbf{g}\mathrm{p}}\left[E_{\mathrm{sc}}\right]^{s}_{\mathbf{g}\mathrm{p}}\exp(i\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}}\cdot\mathbf{r})\widehat{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}}(\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}})\ , \tag{3.44}$$

όπου $s=+(-)$ για $z>0$ $(z<0)$. Σημειώνουμε ότι τα $\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}}$ στην Εξ. (3.44) έχουν την ίδια συχνότητα ω και το ίδιο $\mathbf{k}_{\parallel}$ με το προσπίπτον κύμα. Αντιστοιχούν σε περιθλώμενες δέσμες (διαφορετικών διανυσμάτων $\mathbf{g}$) επίπεδων κυμάτων, με ίδια όμως ω και $\mathbf{k}_{\parallel}$. Η Εξ. (3.44) εκφράζει το σκεδαζόμενο κύμα ως επαλληλία ενός πλήθους από περιθλώμενες δέσμες ($\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}}$) από τις οποίες μόνο εκείνες που αντιστοιχούν σε πραγματικό $K^{s}_{\mathbf{g}z}$ περιγράφουν οδεύοντα κύματα. Οι συντελεστές στην παραπάνω εξίσωση δίνονται από τη σχέση

$$\left[E_{\mathrm{sc}}\right]^{s}_{\mathbf{g}\mathrm{p}}=\sum_{Plm}\Delta_{Plm;\mathrm{p}}(\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}})b^{+}_{Plm}\ , \tag{3.45}$$

όπου

$$\begin{aligned}\mathbf{\Delta}_{Elm}(\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}}) \quad = \quad & \frac{2\pi\,(-i)^l}{q_h A_0 K^{+}_{\mathbf{g}z}\psi_l}\left\{i\left[\alpha^{-m}_{l}e^{i\phi}\,Y_{lm-1}(\widehat{\mathbf{K}}^{s}_{\mathbf{g}})-\alpha^{m}_{l}e^{-i\phi}\,Y_{lm+1}(\widehat{\mathbf{K}}^{s}_{\mathbf{g}})\right]\widehat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{K}^{s}_{\mathbf{g}})\right.\\ & -\left[\alpha^{-m}_{l}\cos\theta\;e^{i\phi}\,Y_{lm-1}(\widehat{\mathbf{K}}^{s}_{\mathbf{g}})-m\sin\theta\,Y_{lm}(\widehat{\mathbf{K}}^{s}_{\mathbf{g}})\right.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\quad +\alpha_l^{m}\cos\theta\, e^{-i\phi}\, Y_{lm+1}(\widehat{\mathbf{K}}^s_{\mathbf{g}})\Big]\,\widehat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{K}^s_{\mathbf{g}})\Big\} \\
&= \frac{2\pi(-i)^l}{q_h A_0 K^+_{\mathbf{g}z}}\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{K}}^s_{\mathbf{g}})\times\widehat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{K}^s_{\mathbf{g}})\ , \qquad (3.46)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{\Delta}_{Hlm}(\mathbf{K}^s_{\mathbf{g}}) &= \frac{2\pi\,(-i)^l}{q_h A_0 K^+_{\mathbf{g}z}\psi_l}\Big\{\Big[\alpha_l^{-m}\cos\theta\, e^{i\phi}\, Y_{lm-1}(\widehat{\mathbf{K}}^s_{\mathbf{g}}) - m\sin\theta\, Y_{lm}(\widehat{\mathbf{K}}^s_{\mathbf{g}}) \\
&\quad +\alpha_l^{m}\cos\theta\, e^{-i\phi}\, Y_{lm+1}(\widehat{\mathbf{K}}^s_{\mathbf{g}})\Big]\,\widehat{\mathbf{e}}_1(\mathbf{K}^s_{\mathbf{g}}) \\
&\quad +i\Big[\alpha_l^{-m}e^{i\phi}\, Y_{lm-1}(\widehat{\mathbf{K}}^s_{\mathbf{g}}) - \alpha_l^{m}e^{-i\phi}\, Y_{lm+1}(\widehat{\mathbf{K}}^s_{\mathbf{g}})\Big]\,\widehat{\mathbf{e}}_2(\mathbf{K}^s_{\mathbf{g}})\Big\} \\
&= \frac{2\pi\,(-i)^l}{q_h A_0 K^+_{\mathbf{g}z}}\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{K}}^s_{\mathbf{g}})\ , \qquad (3.47)
\end{aligned}$$

με τα θ και ϕ να δηλώνουν κατά τα συνήθη τις γωνιακές μεταβλητές του $\mathbf{K}^s_{\mathbf{g}}$. Στα $\mathbf{K}^\pm_{\mathbf{g}}$ το $+(-)$ ισχύει για $z>0$ ($z<0$), και το $K^\pm_{\mathbf{g}z}$ μπορεί να είναι πραγματικό ή φανταστικό. Στη δεύτερη περίπτωση το $\cos\theta$ στις συνήθεις εκφράσεις για τις $Y_{lm}(\widehat{\mathbf{K}}^\pm_{\mathbf{g}})$ αντικαθίσταται από το $K^\pm_{\mathbf{g}z}/q_h$. Εδώ πρέπει να τονίσουμε ότι, με βάση τις Εξ. (3.40) και (3.45), τα πλάτη $[E_{\rm sc}]^s_{\mathbf{g}\rm p}$ εξαρτώνται από το προσπίπτον επίπεδο κύμα μέσω των συντελεστών $B^+_{Plm;\rm p'}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'})$. Αυτοί υπολογίζονται από την Εξ. (3.41), με τα $A^0_{Plm;\rm p'}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'})$ να δίνονται από τις Εξ. (1.33) και (1.34). Θυμίζουμε ότι ο δείκτης $s'=+(-)$ περιγράφει ένα επίπεδο κύμα που προσπίπτει στο επίπεδο των σκεδαστών κατά τη θετική (αρνητική) κατεύθυνση z.

Ας υποθέσουμε ότι ένα επίπεδο κύμα της μορφής (3.27) προσπίπτει στο επίπεδο των σκεδαστών κατά τη θετική κατεύθυνση z. Τότε το διερχόμενο κύμα (προσπίπτον + σκεδαζόμενο) γράφεται στη μορφή

$$\mathbf{E}^+_{\rm tr}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}\rm p}[E_{\rm tr}]^+_{\mathbf{g}\rm p}\exp(i\mathbf{K}^+_{\mathbf{g}}\cdot\mathbf{r})\,\widehat{\mathbf{e}}_{\rm p}(\mathbf{K}^+_{\mathbf{g}}),\quad z>0, \qquad (3.48)$$

με

$$[E_{\rm tr}]^+_{\mathbf{g}\rm p} = [E_0]^+_{\mathbf{g}'\rm p'}\delta_{\rm pp'}\delta_{\mathbf{gg}'} + [E_{\rm sc}]^+_{\mathbf{g}\rm p} = S^{++}_{\mathbf{g}\rm p;\mathbf{g}'\rm p'}[E_0]^+_{\mathbf{g}'\rm p'} \qquad (3.49)$$

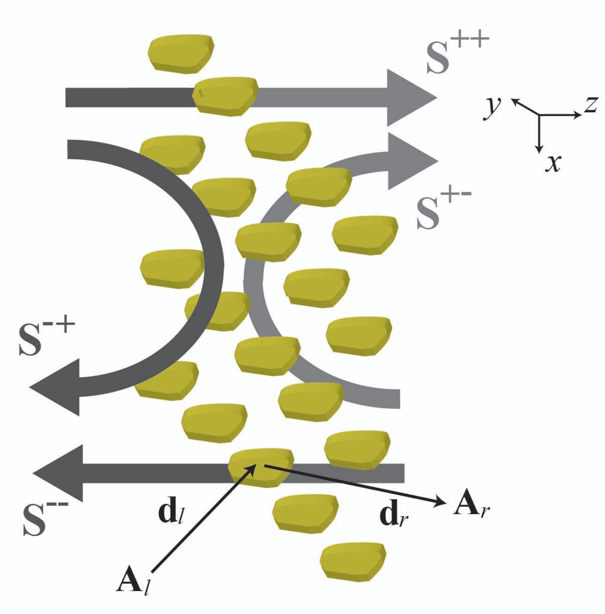
και το ανακλώμενο στη μορφή

$$\mathbf{E}^-_{\rm rf}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}\rm p}[E_{\rm rf}]^-_{\mathbf{g}\rm p}\exp(i\mathbf{K}^-_{\mathbf{g}}\cdot\mathbf{r})\,\widehat{\mathbf{e}}_{\rm p}(\mathbf{K}^-_{\mathbf{g}}),\quad z<0, \qquad (3.50)$$

με

$$[E_{\rm rf}]^-_{\mathbf{g}\rm p} = [E_{\rm sc}]^-_{\mathbf{g}\rm p} = S^{-+}_{\mathbf{g}\rm p;\mathbf{g}'\rm p'}[E_0]^+_{\mathbf{g}'\rm p'}\ , \qquad (3.51)$$

Οι σχέσεις (3.49) και (3.51) είναι στην ουσία σχέσεις ορισμού των στοιχείων πίνακα $S^{++}_{\mathbf{g}\rm p;\mathbf{g}'\rm p'}$, $S^{-+}_{\mathbf{g}\rm p;\mathbf{g}'\rm p'}$ που περιγράφουν τη διέλευση και ανάκλαση, αντίστοιχα, για ένα επίπεδο κύμα που προσπίπτει στο επίπεδο από κατά τη θετική κατεύθυνση z. Υπολογίζονται από τις Εξ. (3.49) και (3.51) χρησιμοποιώντας τις Εξ. (3.45) και (3.40) για $s'=+$. Παρόμοια ορίζουμε τα στοιχεία $S^{--}_{\mathbf{g}\rm p;\mathbf{g}'\rm p'}$ του πίνακα διέλευσης και τα στοιχεία $S^{+-}_{\mathbf{g}\rm p;\mathbf{g}'\rm p'}$ του πίνακα ανάκλασης για ένα



Σχήμα 3.2: Πίνακες διέλευσης και ανάκλασης για ένα επίπεδο σκεδαστών.

επίπεδο κύμα που προσπίπτει στο επίπεδο των σκεδαστών κατά την αρνητική κατεύθυνση z [βάζουμε $s' = -$ στις Εξ. (3.27) και (3.40)]. Έτσι έχουμε τελικά

$$S^{ss'}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} = \delta_{ss'}\delta_{\mathrm{pp}'}\delta_{\mathbf{gg}'} + \sum_{Plm} \Delta_{Plm;\mathrm{p}}(\mathbf{K}^s_{\mathbf{g}}) B^{+}_{Plm;\mathrm{p}'}(\mathbf{K}^{s'}_{\mathbf{g}'}) \ . \tag{3.52}$$

Η φυσική διαδικασία που υποδηλώνουν οι πίνακες αυτοί παρουσιάζεται σχηματικά στο Σχ. 3.2. Εύκολα μπορεί να αποδειχθεί η σχέση συμμετρίας

$$S^{-s-s'}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} = (-1)^{\mathrm{p}+\mathrm{p}'} S^{ss'}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} \ . \tag{3.53}$$

Όπως αναφέραμε, βασικό χαρακτηριστικό της μεθόδου στρωματικής πολλαπλής σκέδασης είναι ότι οι δομές που περιγράφει οικοδομούνται στρωματικά, κατά τη διεύθυνση z. Τα διάφορα στοιχεία που απαρτίζουν μια τέτοια δομή (πεπερασμένη ή άπειρη) μπορεί να είναι επίπεδα σκεδαστών σε ομοιογενές περιβάλλον μέσο, επίπεδες διαχωριστικές επιφάνειες μεταξύ διαφορετικών ομοιογενών μέσων, ή ομοιογενή πλακίδια. Το καθένα από αυτά τα στοιχεία χαρακτηρίζεται από τους δικούς του πίνακες σκέδασης, τους οποίους συνδυάζουμε κατάλληλα για να περιγράψουμε τη σκέδαση από τη σύνθετη στρωματική δομή. Γι΄ αυτό τον λόγο είναι βολικό να εκφράσουμε τα επίπεδα κύματα στα αριστερά (δεξιά) ενός επιπέδου σκεδαστών ως προς ένα σημείο στα αριστερά (δεξιά) του επιπέδου που ορίζεται από το διάνυσμα θέσης $\mathbf{A}_l$ ($\mathbf{A}_r$) ως προς την αρχή των συντεταγμένων, και από το διάνυσμα $-\mathbf{d}_l$ ($\mathbf{d}_r$) ως προς το κέντρο του επιπέδου[2]. Έτσι, ένα κύμα στα αριστερά του επιπέδου θα γράφεται στη

[2] Θεωρούμε ότι η διεύθυνση ανάπτυξης z της δομής είναι από τα αριστερά προς τα δεξιά.

μορφή $\sum_{\mathbf{g}\mathrm{p}} E^s_{\mathbf{g}\mathrm{p}} \exp(i\mathbf{K}^s_{\mathbf{g}} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{A}_l])\, \widehat{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}}(\mathbf{K}^s_{\mathbf{g}})$ και ένα κύμα στα δεξιά του επιπέδου στη μορφή $\sum_{\mathbf{g}\mathrm{p}} E^s_{\mathbf{g}\mathrm{p}} \exp(i\mathbf{K}^s_{\mathbf{g}} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{A}_r])\, \widehat{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}}(\mathbf{K}^s_{\mathbf{g}})$.

Οι πίνακες που συνδέουν το πλάτος του προσπίπτοντος με τα πλάτη του ανακλώμενου και διερχόμενου κύματος, αν αυτά τα κύματα εκφραστούν σε σχέση με τα παραπάνω τοπικά σημεία αναφοράς, προκύπτουν απευθείας από τους αντίστοιχους πίνακες S. Συμβολίζοντας τους νέους αυτούς πίνακες με Q παίρνουμε

$$\begin{aligned}
Q^{\mathrm{I}}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} &= S^{++}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} \exp(i[\mathbf{K}^+_{\mathbf{g}} \cdot \mathbf{d}_r + \mathbf{K}^+_{\mathbf{g}'} \cdot \mathbf{d}_l]) \\
Q^{\mathrm{II}}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} &= S^{+-}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} \exp(i[\mathbf{K}^+_{\mathbf{g}} \cdot \mathbf{d}_r - \mathbf{K}^-_{\mathbf{g}'} \cdot \mathbf{d}_r]) \\
Q^{\mathrm{III}}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} &= S^{-+}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} \exp(-i[\mathbf{K}^-_{\mathbf{g}} \cdot \mathbf{d}_l - \mathbf{K}^+_{\mathbf{g}'} \cdot \mathbf{d}_l]) \\
Q^{\mathrm{IV}}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} &= S^{--}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} \exp(-i[\mathbf{K}^-_{\mathbf{g}} \cdot \mathbf{d}_l + \mathbf{K}^-_{\mathbf{g}'} \cdot \mathbf{d}_r])\ .
\end{aligned} \tag{3.54}$$

Η φυσική σημασία των παραπάνω πινάκων είναι η ίδια με αυτή των αντίστοιχων πινάκων S και χρησιμοποιούμε την εξής αλληλουχία στη δεικτοδότηση των στοιχείων των πινάκων αυτών: $\mathbf{g}_1 1$, $\mathbf{g}_1 2$, $\mathbf{g}_2 1$, $\mathbf{g}_2 2$, $\ldots$. Ο δείκτης $\mathbf{g}$ θεωρητικά εκτείνεται μέχρι το άπειρο, στην πράξη όμως κρατάμε $g_{\max}$ το πλήθος διανύσματα του 2Δ αντίστροφου πλέγματος (αυτά με το μικρότερο μέτρο) οπότε οι πίνακες Q αποκτούν διαστάσεις $2g_{\max} \times 2g_{\max}$.

3.3 Ομοιογενές πλακίδιο

Οι διάφορες δομές συνήθως αναπτύσσονται πάνω σε ένα υπόστρωμα, ενώ αρκετές φορές παρεμβάλλονται και ομοιογενή υμένια. Είναι λοιπόν χρήσιμο, η μέθοδος στρωματικής πολλαπλής σκέδασης να μπορεί να περιγράψει, εκτός από περιοδικές δομές, και ομοιογενή πλακίδια ως στοιχεία μιας σύνθετης δομής.

Έστω ένα ομοιογενές πλακίδιο, που συμβολίζεται ως μέσο $j = 2$, πάχους h, κάθετα στον άξονα z, μεταξύ δύο διαφορετικών μέσων, $j = 1$ στα αριστερά και $j = 3$ στα δεξιά του. Οι ΗΜ ιδιότητες των τριών μέσων καθορίζονται, κατά τα γνωστά, από τις σχετικές διηλεκτρικές συναρτήσεις, ϵ_j, και μαγνητικές διαπερατότητες, μ_j. Εξαιτίας της συμμετρίας μεταφοράς παράλληλα στις επιφάνειες, το κυματάνυσμα ενός επίπεδου κύματος στο μέσο j γράφεται στη μορφή $\mathbf{q}^{\pm}_j = \mathbf{q}_{\parallel} \pm [(\omega/c)^2 \epsilon_j \mu_j - \mathbf{q}^2_{\parallel}]^{1/2}\, \widehat{\mathbf{z}}$, με το $+(-)$ να υποδηλώνει ένα κύμα διαδιδόμενο προς τα δεξιά (αριστερά) κατά μήκος της διεύθυνσης z εάν $(\omega/c)^2 \epsilon_j \mu_j > \mathbf{q}^2_{\parallel}$, και ένα κύμα που φθίνει στα δεξιά (αριστερά) εάν $(\omega/c)^2 \epsilon_j \mu_j < \mathbf{q}^2_{\parallel}$. Αναπτύσσουμε τα κύματα αριστερά από το πλακίδιο ως προς κέντρο $\mathbf{A}_1 = (0,0,0)$ στην αριστερή επιφάνεια και τα κύματα δεξιά από το πλακίδιο ως προς κέντρο $\mathbf{A}_3 = (0,0,h)$ στη δεξιά επιφάνεια. Μια διαχωριστική επιφάνεια μεταξύ δύο διαφορετικών ημιάπειρων μέσων αντιμετωπίζεται ως ειδική περίπτωση των παραπάνω, με $h = 0$ και $\mathbf{A}_1 = \mathbf{A}_3 = (0,0,0)$.

Το ηλεκτρικό πεδίο που αντιστοιχεί σε ένα επίπεδο προσπίπτον κύμα γράφεται στη μορφή

$$\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) = [E_0]^{s'}_{\mathrm{p}'} \exp(i\mathbf{q}^+_j \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{A}_j])\, \widehat{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}'}\ , \tag{3.55}$$

με $s' = +$, $j = 1$ να αντιστοιχεί σε κύμα προσπίπτον από τα αριστερά, και με $s' = -$, $j = 3$ σε κύμα προσπίπτον από τα δεξιά. Το διερχόμενο κύμα μπορεί να γραφεί στη μορφή

$$\mathbf{E}_{\mathrm{tr}}(\mathbf{r}) = [E_{\mathrm{tr}}]^{s}_{\mathrm{p}} \exp(i\mathbf{q}^+_j \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{A}_j])\, \widehat{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}}\ , \tag{3.56}$$

με $s=+$, $j=3$ για πρόσπτωση από τα αριστερά και $s=-$, $j=1$ για πρόσπτωση από τα δεξιά. Κατ΄ αναλογία θα έχουμε και το ανακλώμενο κύμα

$$\mathbf{E}_{\mathrm{rf}}(\mathbf{r}) = [E_{\mathrm{rf}}]^{s}_{\mathrm{p}} \exp(i\mathbf{q}^{+}_{j} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{A}_0])\, \widehat{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}} \ , \tag{3.57}$$

με $s=-$, $j=1$ για πρόσπτωση από τα αριστερά και $s=+$, $j=3$ για πρόσπτωση από τα δεξιά. Τα πλάτη των κυμάτων αυτών σχετίζονται με αυτό του προσπίπτοντος μέσω των εξισώσεων του Fresnel [1], οι οποίες γράφονται στη μορφή

$$\begin{aligned} [E_{\mathrm{tr}}]^{+}_{\mathrm{p}} &= N^{++}_{\mathrm{p}} \delta_{\mathrm{pp}'} [E_0]^{+}_{\mathrm{p}'} \qquad & [E_{\mathrm{tr}}]^{-}_{\mathrm{p}} &= N^{--}_{\mathrm{p}} \delta_{\mathrm{pp}'} [E_0]^{-}_{\mathrm{p}'} \\ [E_{\mathrm{rf}}]^{-}_{\mathrm{p}} &= N^{-+}_{\mathrm{p}} \delta_{\mathrm{pp}'} [E_0]^{+}_{\mathrm{p}'} \qquad & [E_{\mathrm{rf}}]^{+}_{\mathrm{p}} &= N^{+-}_{\mathrm{p}} \delta_{\mathrm{pp}'} [E_0]^{-}_{\mathrm{p}'} \ , \end{aligned} \tag{3.58}$$

με

$$\begin{aligned} N^{++}_{\mathrm{p}} &= t_{23(\mathrm{p})} t_{12(\mathrm{p})} \exp(iq_{2z}h) \left[1 - \exp(iq_{2z}h) r_{21(\mathrm{p})} r_{23(\mathrm{p})}\right]^{-1} \\ N^{+-}_{\mathrm{p}} &= r_{32(\mathrm{p})} + t_{23(\mathrm{p})} r_{21(\mathrm{p})} t_{32(\mathrm{p})} \exp(iq_{2z}h) \left[1 - \exp(iq_{2z}h) r_{21(\mathrm{p})} r_{23(\mathrm{p})}\right]^{-1} \\ N^{-+}_{\mathrm{p}} &= r_{12(\mathrm{p})} + t_{21(\mathrm{p})} r_{23(\mathrm{p})} t_{12(\mathrm{p})} \exp(iq_{2z}h) \left[1 - \exp(iq_{2z}h) r_{21(\mathrm{p})} r_{23(\mathrm{p})}\right]^{-1} \\ N^{--}_{\mathrm{p}} &= t_{21(\mathrm{p})} t_{32(\mathrm{p})} \exp(iq_{2z}h) \left[1 - \exp(iq_{2z}h) r_{21(\mathrm{p})} r_{23(\mathrm{p})}\right]^{-1} \ , \end{aligned} \tag{3.59}$$

όπου $\mathrm{p} = 1, 2$ για πόλωση TM και TE, αντίστοιχα, και

$$\begin{aligned} t_{jj'(1)} &= \frac{2q_{jz}\sqrt{\epsilon_{j'}\mu_{j'}}\sqrt{\frac{\epsilon_j}{\mu_j}}}{\epsilon_{j'}q_{jz} + \epsilon_j q_{j'z}}, \quad & t_{jj'(2)} &= \frac{2q_{jz}\mu_{j'}}{\mu_{j'}q_{jz} + \mu_j q_{j'z}} \\ r_{jj'(1)} &= \frac{\epsilon_{j'}q_{jz} - \epsilon_j q_{j'z}}{\epsilon_{j'}q_{jz} + \epsilon_j q_{j'z}}, \quad & r_{jj'(2)} &= \frac{\mu_{j'}q_{jz} - \mu_j q_{j'z}}{\mu_{j'}q_{jz} + \mu_j q_{j'z}} \ . \end{aligned} \tag{3.60}$$

Για την περιγραφή συνθετότερων δομών, στις οποίες το ομοιογενές πλακίδιο (ή η διαχωριστική επιφάνεια) συνδυάζονται με επίπεδο(α) σκεδαστών καθορισμένης 2Δ περιοδικότητας, είναι βολικό να γράψουμε την παράλληλη συνιστώσα του κυματανύσματος στη μορφή $\mathbf{q}_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g}$, με $\mathbf{g}$ κάποιο διάνυσμα του αντίστροφου πλέγματος. Επίσης, για λόγους που εξηγήσαμε στο τέλος της προηγούμενης ενότητας, τα κύματα στα αριστερά του πλακιδίου πρέπει να εκφράζονται ως προς το σημείο που ορίζεται από ένα διάνυσμα $-\mathbf{d}_l$ από το $\mathbf{A}_1$ και τα κύματα στα δεξιά του πλακιδίου ως προς το σημείο που ορίζεται από ένα διάνυσμα $+\mathbf{d}_r$ από το $\mathbf{A}_3$ (βλ. και Σχ. 3.2). Έτσι, τα στοιχεία των πινάκων διέλευσης και ανάκλασης ως προς αυτά τα σημεία γράφονται

$$\begin{aligned} Q^{\mathrm{I}}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} &= \delta_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} \delta_{\mathrm{pp}'} N^{++}_{\mathrm{p}} \exp(i[\mathbf{K}^{+}_{3\mathbf{g}} \cdot \mathbf{d}_r + \mathbf{K}^{+}_{1\mathbf{g}'} \cdot \mathbf{d}_l]) \\ Q^{\mathrm{II}}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} &= \delta_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} \delta_{\mathrm{pp}'} N^{+-}_{\mathrm{p}} \exp(i[\mathbf{K}^{+}_{3\mathbf{g}} \cdot \mathbf{d}_r + \mathbf{K}^{-}_{3\mathbf{g}'} \cdot \mathbf{d}_r]) \\ Q^{\mathrm{III}}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} &= \delta_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} \delta_{\mathrm{pp}'} N^{-+}_{\mathrm{p}} \exp(-i[\mathbf{K}^{-}_{1\mathbf{g}} \cdot \mathbf{d}_l - \mathbf{K}^{+}_{1\mathbf{g}'} \cdot \mathbf{d}_l]) \\ Q^{\mathrm{IV}}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} &= \delta_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} \delta_{\mathrm{pp}'} N^{--}_{\mathrm{p}} \exp(-i[\mathbf{K}^{-}_{1\mathbf{g}} \cdot \mathbf{d}_l + \mathbf{K}^{-}_{3\mathbf{g}'} \cdot \mathbf{d}_r]) \ , \end{aligned} \tag{3.61}$$

με $\mathbf{K}^{\pm}_{j\mathbf{g}} = \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g} \pm [(\omega/c)^2 \epsilon_j \mu_j - (\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g})^2]^{1/2} \widehat{\mathbf{z}}$.

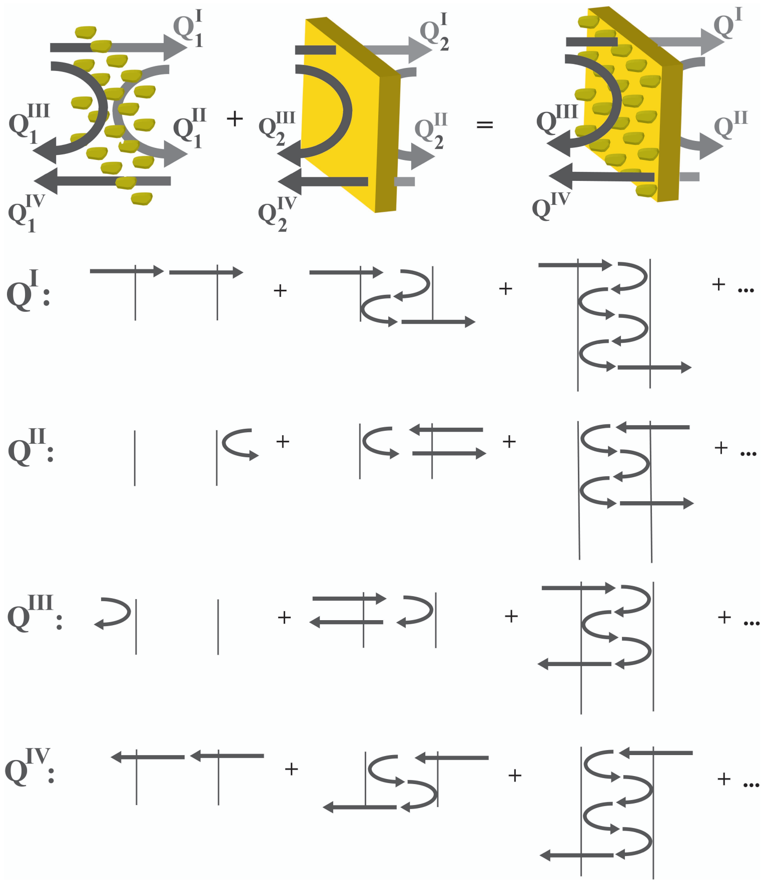
3.4 Σύνθετο πλακίδιο

Ένα σύνθετο πλακίδιο αποτελείται από πεπερασμένο πλήθος στοιχείων, όπου το κάθε στοιχείο μπορεί να είναι ένα επίπεδο από σκεδαστές (Εδ. 3.2), ή μια επίπεδη διαχωριστική επιφάνεια ή ομοιογενές πλακίδιο (Εδ. 3.3). Θυμίζουμε ότι αν δύο διαδοχικά επίπεδα βρίσκονται σε διαφορετικά περιβάλλοντα μέσα, που διαχωρίζονται με επίπεδη επιφάνεια, τότε αυτή θα πρέπει να θεωρηθεί ξεχωριστά ως ένα επιπλέον στοιχείο που θα προκαλέσει σκεδάσεις. Οι πίνακες διέλευσης και ανάκλασης, Q, για ένα ζευγάρι από διαδοχικά στοιχεία, έστω '1' και '2', υπολογίζονται συνδυάζοντας τους πίνακες $Q(1)$ και $Q(2)$ των δύο στοιχείων, όπως φαίνεται στο Σχ. 3.3. Εδώ πρέπει να τονίσουμε ότι, αν και η επιλογή των $\mathbf{d}_l$ και $\mathbf{d}_r$ για το κάθε στοιχείο είναι ως έναν βαθμό αυθαίρετη, πρέπει να είναι τέτοια ώστε το σημείο ως προς το οποίο αναπτύσσονται τα κύματα μεταξύ των διαδοχικών στοιχείων να είναι κοινό, δηλαδή $\mathbf{A}_r(1) = \mathbf{A}_l(2)$. Εύκολα αποδεικνύεται, λαμβάνοντας υπόψη όλες τις πολλαπλές σκεδάσεις και αθροίζοντας άπειρες σειρές (βλ. Σχ. 3.3), ότι

$$\begin{aligned}
\mathbf{Q}^{\mathrm{I}} &= \mathbf{Q}^{\mathrm{I}}(2)\left[\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{\mathrm{II}}(1)\mathbf{Q}^{\mathrm{III}}(2)\right]^{-1}\mathbf{Q}^{\mathrm{I}}(1)\\
\mathbf{Q}^{\mathrm{II}} &= \mathbf{Q}^{\mathrm{II}}(2) + \mathbf{Q}^{\mathrm{I}}(2)\mathbf{Q}^{\mathrm{II}}(1)\left[\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{\mathrm{III}}(2)\mathbf{Q}^{\mathrm{II}}(1)\right]^{-1}\mathbf{Q}^{\mathrm{IV}}(2)\\
\mathbf{Q}^{\mathrm{III}} &= \mathbf{Q}^{\mathrm{III}}(1) + \mathbf{Q}^{\mathrm{IV}}(1)\mathbf{Q}^{\mathrm{III}}(2)\left[\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{\mathrm{II}}(1)\mathbf{Q}^{\mathrm{III}}(2)\right]^{-1}\mathbf{Q}^{\mathrm{I}}(1)\\
\mathbf{Q}^{\mathrm{IV}} &= \mathbf{Q}^{\mathrm{IV}}(1)\left[\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{\mathrm{III}}(2)\mathbf{Q}^{\mathrm{II}}(1)\right]^{-1}\mathbf{Q}^{\mathrm{IV}}(2)\ .
\end{aligned} \tag{3.62}$$

Όλοι οι πίνακες αναφέρονται βέβαια στα ίδια ω και $\mathbf{k}_\parallel$. Υπενθυμίζουμε ότι τα κύματα στα αριστερά και τα δεξιά του ζεύγους των στοιχείων αναπτύσσονται ως προς το σημείο που ορίζει το διάνυσμα θέσης $-\mathbf{d}_l = \mathbf{d}_l(1)$ από το κέντρο του αριστερού στοιχείου και $\mathbf{d}_r = \mathbf{d}_r(2)$ από το κέντρο του δεξιού στοιχείου, αντίστοιχα. Η ίδια διαδικασία μπορεί προφανώς να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό των πινάκων διέλευσης και ανάκλασης από τρία διαδοχικά στοιχεία, συνδυάζοντας τους πίνακες του ζεύγους των δύο στοιχείων με αυτούς του τρίτου. Με τον τρόπο αυτό μπορούμε να βρούμε τους πίνακες σκέδασης ενός σύνθετου πλακιδίου που αποτελείται από οποιονδήποτε (πεπερασμένο) αριθμό στοιχείων.

Για ένα πεπερασμένο πλακίδιο φωτονικού κρυστάλλου που οικοδομείται με επανάληψη μεγάλου αριθμού πανομοιότυπων σύνθετων μοναδιαίων πλακιδίων μπορεί να χρησιμοποιηθεί μια τεχνική διαδοχικού διπλασιασμού του μεγέθους του συστήματος, που επιτρέπει το γρήγορο και αποτελεσματικό υπολογισμό των πινάκων σκέδασης που χαρακτηρίζουν το συνολικό σύστημα. Ας υποθέσουμε ότι έχουμε 2^M ($M = 0, 1, 2, \ldots$) διαδοχικά μοναδιαία πλακίδια. Έχοντας υπολογίσει τους πίνακες Q του ενός μοναδιαίου πλακιδίου, οι αντίστοιχοι πίνακες για ένα ζευγάρι διαδοχικών τέτοιων πλακιδίων υπολογίζονται με τον τρόπο που περιγράφουν οι Εξ. (3.62). Στη συνέχεια, χρησιμοποιώντας ως μονάδες τους πίνακες Q του ζευγαριού, υπολογίζονται οι πίνακες Q για τέσσερα διαδοχικά μοναδιαία πλακίδια, και έτσι, διπλασιάζοντας το πλήθος των μοναδιαίων πλακιδίων σε κάθε στάδιο, προκύπτουν τελικά οι πίνακες Q για όλο το πλακίδιο του κρυστάλλου. Αν αυτό το πλακίδιο είναι εμβαπτισμένο σε διαφορετικό ομοιογενές μέσο, χωρίς απορρόφηση, η σκέδαση στην αριστερή και δεξιά επιφάνεια λαμβάνεται υπόψη θεωρώντας τις επιφάνειες αυτές ως επιπρόσθετα στοιχεία σκέδασης. Αξίζει να σημειωθεί ότι το (ημιάπειρο) μέσο στα αριστερά του πλακιδίου του κρυστάλλου μπορεί να διαφέρει από αυτό στα δεξιά του.



Σχήμα 3.3: Υπολογισμός των πινάκων Q ενός σύνθετου πλακιδίου από αυτούς των μεμονωμένων στοιχείων του.

Συνοψίζοντας, για ένα επίπεδο κύμα $[E_0]^+_{\mathbf{g}'\mathrm{p}'}\exp(i\mathbf{K}^+_{(\mathrm{L})\mathbf{g}'}\cdot[\mathbf{r}-\mathbf{A}_\mathrm{L}])\,\widehat{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}'}(\mathbf{K}^+_{(\mathrm{L})\mathbf{g}'})$, που προσπίπτει από τα αριστερά ενός (σύνθετου) πλακιδίου, βρίσκουμε το ανακλώμενο κύμα $\sum_{\mathbf{g}\mathrm{p}}[E_{\mathrm{rf}}]^-_{\mathbf{g}\mathrm{p}}\exp(i\mathbf{K}^-_{(\mathrm{L})\mathbf{g}}\cdot[\mathbf{r}-\mathbf{A}_\mathrm{L}])\,\widehat{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}}(\mathbf{K}^-_{(\mathrm{L})\mathbf{g}})$ στα αριστερά του πλακιδίου, και το διερχόμενο $\sum_{\mathbf{g}\mathrm{p}}[E_{\mathrm{tr}}]^+_{\mathbf{g}\mathrm{p}}\exp(i\mathbf{K}^+_{(\mathrm{R})\mathbf{g}}\cdot[\mathbf{r}-\mathbf{A}_\mathrm{R}])\,\widehat{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}}(\mathbf{K}^+_{(\mathrm{R})\mathbf{g}})$ στα δεξιά του, με τους δείκτες (L) και (R) να δηλώνουν ποσότητες που αναφέρονται στα ημιάπειρα μέσα στα αριστερά και δεξιά του πλακιδίου, αντίστοιχα. Το $\mathbf{A}_\mathrm{L}$ ($\mathbf{A}_\mathrm{R}$) είναι το κατάλληλο σημείο αναφοράς στα αριστερά (δεξιά) του πλακιδίου. Έχουμε

$$[E_{\mathrm{rf}}]^-_{\mathbf{g}\mathrm{p}} = Q^{\mathrm{III}}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'}\,[E_{\mathrm{in}}]^+_{\mathbf{g}'\mathrm{p}'} \tag{3.63}$$

$$[E_{\mathrm{tr}}]^+_{\mathbf{g}\mathrm{p}} = Q^{\mathrm{I}}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'}\,[E_{\mathrm{in}}]^+_{\mathbf{g}'\mathrm{p}'} \;, \tag{3.64}$$

όπου ο πίνακας Q περιγράφει όλο το πλακίδιο, συμπεριλαμβάνοντας και τις εξωτερικές του επιφάνειες, αν υπάρχουν.

Έχοντας υπολογίσει το διερχόμενο κύμα από την Εξ. (3.64) και το ανακλώμενο από την Εξ. (3.64), για το δεδομένο προσπίπτον κύμα, μπορούμε να βρούμε τη διελευσιμότητα, $\mathcal{T}$, και ανακλαστικότητα, $\mathcal{R}$, του πεπερασμένου πλακιδίου του κρυστάλλου. Οι ποσότητες αυτές ορίζονται ως το πηλίκο της ροής του διερχόμενου ή ανακλώμενου κύματος προς τη ροή του προσπίπτοντος κύματος. Ολοκληρώνοντας το διάνυσμα Poynting σε όλο το επίπεδο $x-y$ στην κατάλληλη κάθε φορά πλευρά του πλακιδίου, και λαμβάνοντας τη χρονική μέση τιμή για μια περίοδο $T=2\pi/\omega$, έχουμε

$$\mathcal{T} = \frac{\sum_{\mathbf{g}\mathrm{p}} [E_{\mathrm{tr}}]^{+}_{\mathbf{g}\mathrm{p}} \left([E_{\mathrm{tr}}]^{+}_{\mathbf{g}\mathrm{p}}\right)^{*} K^{+}_{(\mathrm{R})\mathbf{g}z}}{[E_0]^{+}_{\mathbf{g}'\mathrm{p}'} \left([E_0]^{+}_{\mathbf{g}'\mathrm{p}'}\right)^{*} K^{+}_{(\mathrm{L})\mathbf{g}'z}} \frac{\mu_{\mathrm{L}}}{\mu_{\mathrm{R}}} \tag{3.65}$$

$$\mathcal{R} = \frac{\sum_{\mathbf{g}\mathrm{p}} [E_{\mathrm{rf}}]^{-}_{\mathbf{g}\mathrm{p}} \left([E_{\mathrm{rf}}]^{-}_{\mathbf{g}\mathrm{p}}\right)^{*} K^{+}_{(\mathrm{L})\mathbf{g}z}}{[E_0]^{+}_{\mathbf{g}'\mathrm{p}'} \left([E_0]^{+}_{\mathbf{g}'\mathrm{p}'}\right)^{*} K^{+}_{(\mathrm{L})\mathbf{g}'z}} , \tag{3.66}$$

όπου το σύμβολο * δηλώνει, κατά τα γνωστά, μιγαδική συζυγία. Στην περίπτωση που σε οποιοδήποτε στρώμα του πλακιδίου έχουμε απώλειες λόγω απορρόφησης, η απορροφητικότητα, $\mathcal{A}$, του πλακιδίου προσδιορίζεται από την αρχή διατήρησης της ενέργειας

$$\mathcal{A} = 1 - \mathcal{T} - \mathcal{R} . \tag{3.67}$$

Τέλος, η απόσβεση του κύματος ορίζεται ως ο αρνητικός φυσικός λογάριθμος της διελευσιμότητας, $-\ln\mathcal{T}$.

Ο πίνακας S ορίζεται εν γένει στη θεωρία σκέδασης ως ο πίνακας που μετασχηματίζει το εισερχόμενο πεδίο στο εξερχόμενο και, για το σύνθετο πλακίδιο, στην αναπαράσταση επίπεδων κυμάτων, δίνεται από τις σχέσεις

$$\begin{aligned}
S^{++}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} &= \exp(-i[\mathbf{K}^{+}_{(\mathrm{R})\mathbf{g}} \cdot \mathbf{A}_{\mathrm{R}} - \mathbf{K}^{+}_{(\mathrm{L})\mathbf{g}'} \cdot \mathbf{A}_{\mathrm{L}}])\, Q^{\mathrm{I}}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} \\
S^{+-}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} &= \exp(-i[\mathbf{K}^{+}_{(\mathrm{R})\mathbf{g}} \cdot \mathbf{A}_{\mathrm{R}} - \mathbf{K}^{-}_{(\mathrm{R})\mathbf{g}'} \cdot \mathbf{A}_{\mathrm{R}}])\, Q^{\mathrm{II}}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} \\
S^{-+}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} &= \exp(-i[\mathbf{K}^{-}_{(\mathrm{L})\mathbf{g}} \cdot \mathbf{A}_{\mathrm{L}} - \mathbf{K}^{+}_{(\mathrm{L})\mathbf{g}'} \cdot \mathbf{A}_{\mathrm{L}}])\, Q^{\mathrm{III}}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} \\
S^{--}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} &= \exp(-i[\mathbf{K}^{-}_{(\mathrm{L})\mathbf{g}} \cdot \mathbf{A}_{\mathrm{L}} - \mathbf{K}^{-}_{(\mathrm{R})\mathbf{g}'} \cdot \mathbf{A}_{\mathrm{R}}])\, Q^{\mathrm{IV}}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} ,
\end{aligned} \tag{3.68}$$

για δεδομένα ω και $\mathbf{k}_{\|}$. Οι φασικοί παράγοντες στις Εξ. (3.68) προέρχονται από το γεγονός ότι όλα τα κύματα πρέπει να αναφέρονται στην ίδια κοινή αρχή συντεταγμένων. Η διατήρηση της ροής υπαγορεύει ο πίνακας S να είναι μοναδιακός, ενώ η αρχή της αιτιότητας επιβάλλει οι ιδιοτιμές του να είναι αναλυτικές συναρτήσεις στο άνω μιγαδικό ημιεπίπεδο των συχνοτήτων [32]. Μπορούν όμως να υπάρχουν πόλοι στο κάτω ημιεπίπεδο, στα σημεία $\omega_i - i\gamma_i$, $\gamma_i \geq 0$, όπου ω_i είναι η ιδιοσυχνότητα και γ_i ο αντίστροφος χρόνος ζωής της αντίστοιχης κατάστασης. Τέτοιοι πόλοι, με $\gamma_i \ll \omega_i$, αντιστοιχούν σε καταστάσεις συντονισμού και έχουν ιδιαίτερο φυσικό ενδιαφέρον. Οι ιδιοσυχνότητες ενδεχόμενων δέσμιων καταστάσεων υπολογίζονται ξεχωριστά, από τη συνθήκη ύπαρξης εντοπισμένου πεδίου χωρίς εξωτερική διέγερση. Χωρίζοντας το σύνθετο πλακίδιο σε ένα αριστερό (L) και ένα δεξιό (R) κομμάτι, ως προς την περιοχή εντοπισμού, η συνθήκη αυτή μας οδηγεί στην καταστατική εξίσωση

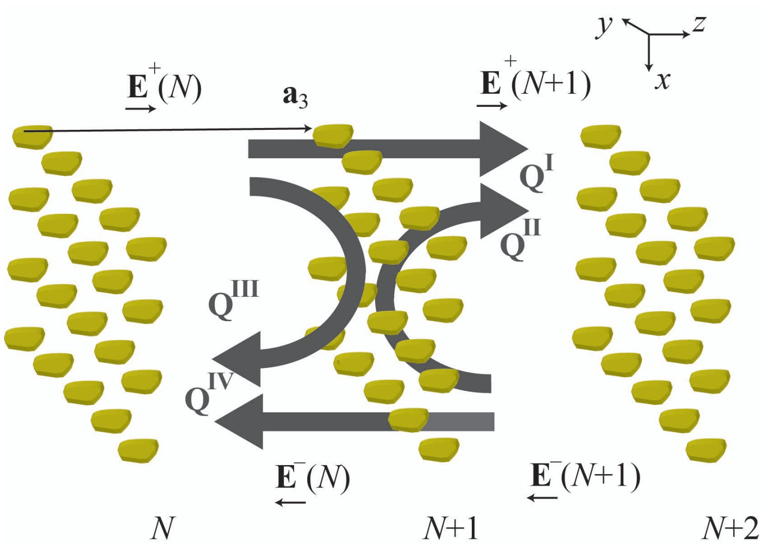
$$\det\left[\mathbf{I} - \mathbf{Q}^{\mathrm{II}}(\mathrm{L})\mathbf{Q}^{\mathrm{III}}(\mathrm{R})\right] = 0 . \tag{3.69}$$

3.5 Μιγαδική φωτονική δομή ζωνών άπειρου κρυστάλλου

Ένας άπειρος 3Δ κρύσταλλος οικοδομείται ως αλληλουχία πανομοιότυπων μοναδιαίων πλακιδίων, παράλληλων στο επίπεδο $x-y$, που εκτείνονται σε όλο τον χώρο (από $z \to -\infty$ έως $z \to +\infty$) (Σχ. 3.4). Αν η Εξ. (3.23) περιγράφει το 2Δ πλέγμα του μοναδιαίου πλακιδίου, και το $\mathbf{a}_3$ είναι το διάνυσμα που μας μεταφέρει από ένα σημείο του N-οστού πλακιδίου σε ένα ισοδύναμο σημείο στο $(N+1)$-οστό μοναδιαίο πλακίδιο, τότε τα $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3\}$ αποτελούν ένα σύνολο θεμελιωδών διανυσμάτων του κρυστάλλου.

Στην περιοχή μεταξύ του N-οστού και του $(N+1)$-οστού μοναδιαίου πλακιδίου, το πεδίο, με δεδομένα ω και $\mathbf{k}_{\|}$, έχει τη μορφή

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}) \;&=\; \sum_{\mathbf{g}\mathrm{p}} \{E^{+}_{\mathbf{g}\mathrm{p}}(N)\exp(i\mathbf{K}^{+}_{\mathbf{g}}\cdot[\mathbf{r}-\mathbf{A}_r(N)])\;\widehat{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}}(\mathbf{K}^{+}_{\mathbf{g}}) \\ &\quad +E^{-}_{\mathbf{g}\mathrm{p}}(N)\exp(i\mathbf{K}^{-}_{\mathbf{g}}\cdot[\mathbf{r}-\mathbf{A}_r(N)])\;\widehat{\mathbf{e}}_{\mathrm{p}}(\mathbf{K}^{-}_{\mathbf{g}})\}\;. \end{aligned} \tag{3.70}$$



Σχήμα 3.4: Οι πίνακες Q για μια άπειρη περιοδική φωτονική δομή

Οι συντελεστές $E^{s}_{\mathbf{g}\mathrm{p}}(N)$ σχετίζονται με τους $E^{s}_{\mathbf{g}\mathrm{p}}(N+1)$ μέσω των ιδιοτήτων σκέδασης του μοναδιαίου πλακιδίου σύμφωνα με τις σχέσεις

$$\begin{aligned} E^{-}_{\mathbf{g}\mathrm{p}}(N) &= \sum_{\mathbf{g}'\mathrm{p}'} Q^{\mathrm{IV}}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} E^{-}_{\mathbf{g}'\mathrm{p}'}(N+1) + \sum_{\mathbf{g}'\mathrm{p}'} Q^{\mathrm{III}}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} E^{+}_{\mathbf{g}'\mathrm{p}'}(N) \\ E^{+}_{\mathbf{g}\mathrm{p}}(N+1) &= \sum_{\mathbf{g}'\mathrm{p}'} Q^{\mathrm{I}}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} E^{+}_{\mathbf{g}'\mathrm{p}'}(N) + \sum_{\mathbf{g}'\mathrm{p}'} Q^{\mathrm{II}}_{\mathbf{g}\mathrm{p};\mathbf{g}'\mathrm{p}'} E^{-}_{\mathbf{g}'\mathrm{p}'}(N+1)\;, \end{aligned} \tag{3.71}$$

όπου Q είναι οι πίνακες διέλευσης και ανάκλασης του μοναδιαίου πλακιδίου.

Ένα γενικευμένο κύμα Bloch έχει την ιδιότητα

$$E^{s}_{\mathbf{g}\mathrm{p}}(N+1) = \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3)\;E^{s}_{\mathbf{g}\mathrm{p}}(N)\;, \tag{3.72}$$

όπου

$$\mathbf{k} = (\mathbf{k}_\parallel, k_z(\omega; \mathbf{k}_\parallel)) \ . \tag{3.73}$$

Με δεδομένο το $\mathbf{k}_\parallel$, το k_z είναι μια εν γένει μιγαδική συνάρτηση του ω, που προσδιορίζεται ως εξής: Αντικαθιστώντας την Εξ. (3.72) στο αριστερό μέλος των (3.71) παίρνουμε

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Q}^{\mathrm{I}} & \mathbf{Q}^{\mathrm{II}} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}^{+}(N) \\ \mathbf{E}^{-}(N+1) \end{pmatrix} = \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3) \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{Q}^{\mathrm{III}} & \mathbf{Q}^{\mathrm{IV}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}^{+}(N) \\ \mathbf{E}^{-}(N+1) \end{pmatrix} \ , \tag{3.74}$$

κι εφόσον

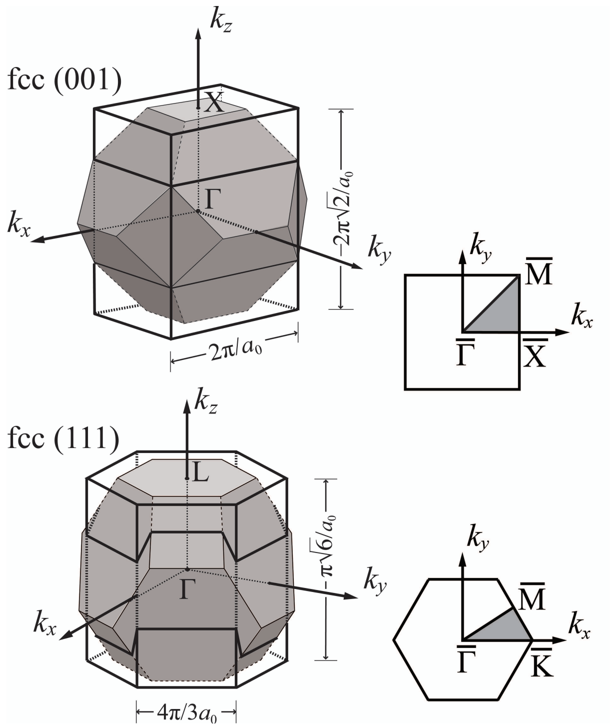
$$\begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{Q}^{\mathrm{III}} & \mathbf{Q}^{\mathrm{IV}} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ -\left[\mathbf{Q}^{\mathrm{IV}}\right]^{-1}\mathbf{Q}^{\mathrm{III}} & \left[\mathbf{Q}^{\mathrm{IV}}\right]^{-1} \end{pmatrix} \tag{3.75}$$

προκύπτει

$$\begin{aligned} &\begin{pmatrix} \mathbf{Q}^{\mathrm{I}} & \mathbf{Q}^{\mathrm{II}} \\ -\left[\mathbf{Q}^{\mathrm{IV}}\right]^{-1}\mathbf{Q}^{\mathrm{III}}\mathbf{Q}^{\mathrm{I}} & \left[\mathbf{Q}^{\mathrm{IV}}\right]^{-1}\left[\mathbf{I}-\mathbf{Q}^{\mathrm{III}}\mathbf{Q}^{\mathrm{II}}\right] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}^{+}(N) \\ \mathbf{E}^{-}(N+1) \end{pmatrix} \\ &= \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3) \begin{pmatrix} \mathbf{E}^{+}(N) \\ \mathbf{E}^{-}(N+1) \end{pmatrix} \ , \end{aligned} \tag{3.76}$$

η οποία συνιστά ένα πρόβλημα ιδιοτιμών. Η αντίστοιχη εξίσωση για τη σκέδαση ηλεκτρονίων από ατομικά επίπεδα διατυπώθηκε από τον McRae [33, 34]. Τα $\mathbf{E}^{\pm}$ είναι πίνακες-στήλες με πλήθος στοιχείων $2g_{\max}$. Ο παραπάνω ορισμός των $\mathbf{E}^{\pm}$ υποδηλώνει και τον τρόπο δεικτοδότησης των στοιχείων, που είναι ο ίδιος με αυτόν που χρησιμοποιείται για τους πίνακες Q (Εδ. 3.2). Για δεδομένο ω και $\mathbf{k}_\parallel$ υπολογίζονται $4g_{\max}$ το πλήθος τιμές του k_z από τις ιδιοτιμές [γραμμένες στη μορφή $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3)$] του πίνακα στο αριστερό μέλος της Εξ. 3.76, διαστάσεων $4g_{\max} \times 4g_{\max}$. Οι τιμές $k_z(\omega; \mathbf{k}_\parallel)$ που προκύπτουν με αυτό τον τρόπο, για πραγματικό ω και δεδομένο $\mathbf{k}_\parallel$, ορίζουν $4g_{\max}$ καμπύλες διασποράς στον χώρο του μιγαδικού k_z, που όλες μαζί συνιστούν τη μιγαδική φωτονική δομή ζωνών του άπειρου κρυστάλλου που σχετίζεται με το δεδομένο κρυσταλλογραφικό επίπεδο.

Σε αυτό το σημείο αξίζει να σημειώσουμε ότι η δομή ζωνών εμφανίζει περιοδικότητα στον αντίστροφο χώρο αφού αντικατάσταση του $\mathbf{k}_\parallel$ με το $\mathbf{k}_\parallel + \mathbf{g}$ μετονομάζει τους συντελεστές χωρίς να αλλάζει τη μορφή της κυματοσυνάρτησης. Επιπλέον, επειδή οι ιδιοτιμές της Εξ. (3.76) είναι της μορφής $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3)$, τιμές του k_z που διαφέρουν κατά ακέραιο πολλαπλάσιο του $2\pi/a_{3z}$ αντιστοιχούν στο ίδιο κύμα Bloch. Μπορούμε κατά συνέπεια να επιλέξουμε την ανηγμένη ζώνη του $\mathbf{k}$ στον αντίστροφο χώρο ως εξής: $(\mathbf{k}_\parallel, \mathrm{Re}k_z)$ με το $\mathbf{k}_\parallel = (k_x, k_y)$ να εκτείνεται σε όλη την ΕΖΒ του δεδομένου κρυσταλλογραφικού επιπέδου, και με $-|\mathbf{b}_3|/2 < \mathrm{Re}k_z \leq |\mathbf{b}_3|/2$, όπου $\mathbf{b}_3 \equiv 2\pi\,(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)/[\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)] = 2\pi/a_{3z}\,\widehat{\mathbf{z}}$, ενώ $|\mathbf{a}_1| \equiv a_0$ (βλ. Σχ. 3.5). Εδώ αξίζει να σημειωθεί ότι όταν υπάρχει επίπεδο κατοπτρικής συμμετρίας που σχετίζεται με την υπό μελέτη κρυσταλλογραφική επιφάνεια, οι λύσεις (κύματα Bloch) της Εξ. (3.76) εμφανίζονται σε ζεύγη: $k_z(\omega; \mathbf{k}_\parallel)$ και $-k_z(\omega; \mathbf{k}_\parallel)$. Μια καμπύλη διασποράς με δεδομένο $\mathbf{k}_\parallel$ μπορεί να είναι πραγματική (με την έννοια ότι το k_z είναι πραγματικό) σε κάποιες περιοχές συχνοτήτων, και μιγαδική (με την έννοια ότι το k_z είναι μιγαδικό) για ω εκτός των περιοχών αυτών. Προκύπτει ότι για δεδομένα ω και $\mathbf{k}_\parallel$, καμία, ή στην καλύτερη περίπτωση λίγες από τις $4g_{\max}$ ιδιοτιμές της Εξ. (3.76) δίνουν πραγματικό $k_z(\omega; \mathbf{k}_\parallel)$ και οι καταστάσεις που αντιστοιχούν σε αυτές



Σχήμα 3.5: Οι ανηγμένες ζώνες στον αντίστροφο χώρο που αντιστοιχούν στα κρυσταλλογραφικά επίπεδα (001) και (111) πλέγματος fcc (αριστερά) και οι αντίστοιχες ΕΖΒ (δεξιά). Για λόγους σύγκρισης παρουσιάζεται και η συμβατική 1^{η} ΖΒ του fcc (γκρι πολύεδρο αριστερά). Οι σκιασμένες περιοχές δεξιά είναι τα μη αναγωγίσιμα τμήματα των αντίστοιχων ΕΖΒ.

είναι διαδιδόμενα κύματα Bloch στο συγκεκριμένο άπειρο κρύσταλλο. Οι υπόλοιπες ιδιοτιμές της Εξ. (3.76) δίνουν μιγαδικό $k_z(\omega; \mathbf{k}_\parallel)$ και τα κύματα που αντιστοιχούν σε αυτές έχουν πλάτος που φθίνει εκθετικά στη θετική ή αρνητική διεύθυνση του z. Σε αντίθεση με τα διαδιδόμενα κύματα, τα φθίνοντα κύματα δεν έχουν φυσική υπόσταση στον άπειρο κρύσταλλο· αποτελούν όμως αναπόσπαστο κομμάτι των φυσικών λύσεων του ΗΜ πεδίου σε έναν ημιάπειρο κρύσταλλο (που εκτείνεται από το $z = 0$ μέχρι το $z \to \infty$) ή σε ένα πεπερασμένο πλακίδιο του κρυστάλλου. Για παράδειγμα, η απόσβεση ενός κύματος με δεδομένο $\mathbf{k}_\parallel$, που προσπίπτει σε πλακίδιο του κρυστάλλου πάχους D, με συχνότητα μέσα σε περιοχή όπου δεν υπάρχουν διαδιδόμενες λύσεις για το δεδομένο $\mathbf{k}_\parallel$, προσδιορίζεται από το φθίνον κύμα που αντιστοιχεί στο k_z με το μικρότερο κατά μέτρο φανταστικό μέρος, q_{I}. Με άλλα λόγια, το πλάτος του κύματος είναι ανάλογο του $\exp(-q_{\mathrm{I}}D)$.

Η πλήρης εικόνα για τη συνηθισμένη δομή ζωνών συχνοτήτων απαιτεί τη γνώση των καμπυλών διασποράς με πραγματικό k_z για κάθε τιμή του $\mathbf{k}_\parallel$ στο μη αναγωγίσιμο τμήμα της ΕΖΒ· στο υπόλοιπο μέρος της ΕΖΒ οι καμπύλες διασποράς προσδιορίζονται με επιχειρήματα συμμετρίας. Οι καμπύλες διασποράς που βρίσκουμε με αυτό τον τρόπο μπορούν πάντα να συσχετιστούν με αυτές που προσδιορίζονται στη συνηθισμένη 1^{η} ΖΒ (βλ. Σχ. 3.5). Κάτι τέτοιο όμως δεν είναι απαραίτητο, αφού η φυσική ερμηνεία των αποτελεσμάτων είναι ίδια και στις δύο περιγραφές. Επιπλέον, ο τρόπος παρουσίασης της δομής ζωνών που αναπτύξαμε στο παρόν εδάφιο παρουσιάζει σαφή πλεονεκτήματα στην ανάλυση πειραμάτων διέλευσης, στα οποία η συνιστώσα $\mathbf{k}_{\|}$ είναι το μέγεθος που διατηρείται. Μια περιοχή συχνοτήτων στην οποία δεν υπάρχουν διαδιδόμενα κύματα για το δεδομένο $\mathbf{k}_{\|}$ συνιστά ένα *χάσμα συχνοτήτων* για αυτό το $\mathbf{k}_{\|}$. Εάν σε μια περιοχή συχνοτήτων δεν υπάρχουν διαδιδόμενα κύματα για κάθε τιμή του $\mathbf{k}_{\|}$, τότε η περιοχή αυτή χαρακτηρίζεται ως *απόλυτο χάσμα συχνοτήτων*.

3.6 Ημιάπειρος κρύσταλλος

Στο προηγούμενο εδάφιο αξιοποιήσαμε τον πίνακα σκέδασης S, ο οποίος συνδέει το σκεδαζόμενο με το προσπίπτον κύμα σε έναν άπειρο κρύσταλλο και ορίζεται μέσω των Εξ. (3.71). Οι σχέσεις αυτές μπορούν να ξαναγραφούν στη μορφή

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}^{+}(N+1) \\ \mathbf{E}^{-}(N+1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}^{\mathrm{I}} - \mathbf{Q}^{\mathrm{II}}\left[\mathbf{Q}^{\mathrm{IV}}\right]^{-1}\mathbf{Q}^{\mathrm{III}} & \mathbf{Q}^{\mathrm{II}}\left[\mathbf{Q}^{\mathrm{IV}}\right]^{-1} \\ -\left[\mathbf{Q}^{\mathrm{IV}}\right]^{-1}\mathbf{Q}^{\mathrm{III}} & \left[\mathbf{Q}^{\mathrm{IV}}\right]^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}^{+}(N) \\ \mathbf{E}^{-}(N) \end{pmatrix} . \quad (3.77)$$

με την οποία ορίζεται ο πίνακας μεταφοράς που συνδέει τα πεδία στα αριστερά και τα δεξιά ενός μοναδιαίου πλακιδίου του κρυστάλλου [35]. Χρησιμοποιώντας το θεώρημα Bloch, Εξ. (3.72), οδηγούμαστε σε ένα πρόβλημα ιδιοτιμών του πίνακα μεταφοράς, αντίστοιχο με αυτό της Εξ. (3.76)

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Q}^{\mathrm{I}} - \mathbf{Q}^{\mathrm{II}}\left[\mathbf{Q}^{\mathrm{IV}}\right]^{-1}\mathbf{Q}^{\mathrm{III}} & \mathbf{Q}^{\mathrm{II}}\left[\mathbf{Q}^{\mathrm{IV}}\right]^{-1} \\ -\left[\mathbf{Q}^{\mathrm{IV}}\right]^{-1}\mathbf{Q}^{\mathrm{III}} & \left[\mathbf{Q}^{\mathrm{IV}}\right]^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}^{+}(N) \\ \mathbf{E}^{-}(N) \end{pmatrix} = \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3) \begin{pmatrix} \mathbf{E}^{+}(N) \\ \mathbf{E}^{-}(N) \end{pmatrix} . \quad (3.78)$$

Ο πίνακας ανάκλασης του ημιάπειρου κρυστάλλου, για δεδομένα ω και $\mathbf{k}_{\|}$, μπορεί να υπολογιστεί από τα ιδιοδιανύσματα, $\mathbf{f}$, του πίνακα μεταφοράς, ως εξής: Οι ιδιοκαταστάσεις Bloch κατατάσσονται αρχικά ανάλογα με το αν διαδίδονται (ή φθίνουν) κατά τη θετική ή αρνητική κατεύθυνση του άξονα z. Αυτή η κατάταξη γίνεται άμεσα για τα φθίνοντα κύματα, σύμφωνα με το πρόσημο του $\mathrm{Im}k_z$. Για τα διαδιδόμενα κύματα ($\mathrm{Im}k_z = 0$) εξετάζεται η κατεύθυνση της ροής ενέργειας, η οποία προσδιορίζεται από το πρόσημο της ποσότητας [36]

$$\mathcal{E}_{\mathrm{V}} = \sum_{\substack{\mathbf{g}\mathrm{p} \\ (\mathbf{k}_{\|}+\mathbf{g})^2 < q^2}} \left(\left|f^{+}_{\mathbf{g}\mathrm{p}}\right|^2 - \left|f^{-}_{\mathbf{g}\mathrm{p}}\right|^2 \right) - 2\mathrm{Im} \sum_{\substack{\mathbf{g}\mathrm{p} \\ (\mathbf{k}_{\|}+\mathbf{g})^2 > q^2}} f^{+}_{\mathbf{g}\mathrm{p}} \left[f^{-}_{\mathbf{g}\mathrm{p}}\right]^{*} , \quad (3.79)$$

όπου $f^{s}_{\mathbf{g}\mathrm{p}}$ είναι τα στοιχεία του εκάστοτε ιδιοδιανύσματος. Όπως αναφέραμε στα προηγούμενα εδάφια, στην πράξη κρατάμε έναν πεπερασμένο αριθμό, $g_{\max}$, διανυσμάτων του 2Δ αντίστροφου πλέγματος (αυτά με το μικρότερο μέγεθος), οπότε παίρνουμε $4g_{\max}$ ιδιοτιμές και αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα. Τα μισά από αυτά αντιστοιχούν σε καταστάσεις διαδιδόμενες κατά τη θετική κατεύθυνση z ($z > 0$) και τα άλλα μισά σε καταστάσεις διαδιδόμενες κατά την αρνητική κατεύθυνση z ($z < 0$), ως αποτέλεσμα της συμμετρίας αντιστροφής χρόνου. Ορίζουμε έναν πίνακα ιδιοδιανυσμάτων, $\mathbf{F}$, διάστασης $4g_{\max} \times 4g_{\max}$, ως εξής: Οι πρώτες $2g_{\max}$ στήλες του περιέχουν τα ιδιοδιανύσματα που αντιστοιχούν σε εμπροσθοδιαδιδόμενες καταστάσεις (+) και οι επόμενες $2g_{\max}$ στήλες περιέχουν τα ιδιοδιανύσματα που αντιστοιχούν σε οπισθοδιαδιδόμενες καταστάσεις $(-)$. Ο πίνακας αυτός έχει μια απλή φυσική σημασία: Προβάλλει το χώρο των εμπροσθο- και οπισθοδιαδιδόμενων ιδιοκαταστάσεων Bloch, $\mathbf{V}^{+}$ και $\mathbf{V}^{-}$, αντίστοιχα, στην αρχική βάση επιπέδων κυμάτων, δηλαδή

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}^{+}(0) \\ \mathbf{E}^{-}(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}^{++} & \mathbf{F}^{+-} \\ \mathbf{F}^{-+} & \mathbf{F}^{--} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{V}^{+} \\ \mathbf{V}^{-} \end{pmatrix} . \tag{3.80}$$

Εξ ορισμού, κάθε ιδιοκατάσταση διαδίδεται στον κρύσταλλο χωρίς να αλλάζει και, από την άλλη, για έναν ημιάπειρο κρύσταλλο δεν υπάρχει πίσω επιφάνεια για να ανακλάσει τις εμπροσθοδιαδιδόμενες καταστάσεις Bloch. Συνεπώς, η κατάλληλη συνοριακή συνθήκη για τη σκέδαση ΗΜ ακτινοβολίας που προσπίπτει σε έναν ημιάπειρο φωτονικό κρύσταλλο από ένα ημιάπειρο ομοιογενές μέσο είναι $\mathbf{V}^{-} = \mathbf{0}$ [37]. Αυτή η συνθήκη, όταν εφαρμοστεί στην Εξ. (3.80), οδηγεί στις εξισώσεις

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^{+}(0) &= \mathbf{F}^{++}\mathbf{V}^{+} \\ \mathbf{E}^{-}(0) &= \mathbf{F}^{-+}\mathbf{V}^{+} \ , \end{aligned} \tag{3.81}$$

και κατά συνέπεια,

$$\mathbf{E}^{-}(0) = \mathbf{F}^{-+}\left[\mathbf{F}^{++}\right]^{-1}\mathbf{E}^{+}(0) \equiv \mathbf{R}_{\infty}\mathbf{E}^{+}(0) \ , \tag{3.82}$$

που ορίζει τον πίνακα ανάκλασης, R_{∞}, του ημιάπειρου φωτονικού κρυστάλλου. Η ανακλαστικότητα του ημιάπειρου κρυστάλλου, $\mathcal{R}_{\infty}$, υπολογίζεται από τον πίνακα ανάκλασης κατ' αναλογία με την Εξ. (3.66).

Με βάση τον πίνακα μεταφοράς μπορεί κανείς επίσης να αναζητήσει επιφανειακές καταστάσεις, εντοπισμένες στη διεπιφάνεια μεταξύ ενός ημιάπειρου ομοιογενούς μέσου (στα αριστερά) και ενός ημιάπειρου φωτονικού κρυστάλλου (στα δεξιά). Η συνθήκη ύπαρξης τέτοιων επιφανειακών καταστάσεων είναι η ύπαρξη εξερχόμενων κυμάτων απουσία προσπίπτοντος κύματος. Αυτό σημαίνει ότι στο σύστημα (3.81) θα πρέπει να υπάρχουν εξερχόμενες καταστάσεις Bloch, $\mathbf{V}^{+} \neq \mathbf{0}$, για μηδενικό εισερχόμενο πεδίο, $\mathbf{E}^{+}(0) = \mathbf{0}$. Τότε η πρώτη των Εξ. (3.81) γίνεται [38]

$$\mathbf{F}^{++}\mathbf{V}^{+} = \mathbf{E}^{+}(0) = \mathbf{0} \ , \tag{3.83}$$

που ικανοποιείται όταν

$$\det\left[\mathbf{F}^{++}\right] = 0 \ . \tag{3.84}$$

Κεφάλαιο 4

Περιοδικές δομές σφαιρικών σωματιδίων από διισοτροπικό υλικό

Φωτονικοί κρύσταλλοι από χειρόμορφες δομικές μονάδες διατεταγμένες περιοδικά σε μία, δύο, και τρείς διαστάσεις μελετήθηκαν τις τελευταίες δεκαετίες κυρίως σε σχέση με την εμφάνιση φωτονικών χασμάτων [39–41]. Πιο πρόσφατα, προτάθηκε ότι χειρόμορφα υλικά προσφέρουν νέες δυνατότητες για την υλοποίηση αρνητικής διάθλασης και συναφών φαινομένων. Συγκεκριμένα έχει αναφερθεί ότι η ύπαρξη ενός χειρόμορφου συντονισμού, που μπορεί να εμφανιστεί είτε σε ένα μίγμα μικρών ελικοειδών εγκλεισμάτων [42, 43] είτε σε μία συλλογή σωματιδίων που εμφανίζουν συντονισμό εμβαπτισμένα σε χειρόμορφο μέσο χωρίς διασπορά [44], μπορεί να οδηγήσει σε αρνητική διάθλαση και υπερεστίαση, προσφέροντας νέες δυνατότητες για απλούστερη σχεδίαση καινοτόμων χειρόμορφων οπτικών μεταϋλικών [45–50]. Επιπλέον, σε καθεστώς ισχυρής χειρομορφίας, ενδιαφέροντα φαινόμενα όπως διέλευση και εντοπισμός που εξαρτώνται από την πόλωση έχουν αναφερθεί σε 2Δ φωτονικές δομές από άπειρους κυλίνδρους χειρόμορφου (μετα)υλικού σε διηλεκτρικό περιβάλλον μέσο [51].

Σε φωτονικούς κρυστάλλους από διισοτροπικά υλικά, ο συνδυασμός άρσης συμμετρίας αντιστροφής χώρου και γυροτροπίας έχει το ίδιο αποτέλεσμα στη δομή των ιδιοκαταστάσεων όπως η σύζευξη σπιν-τροχιακής στροφορμής στις καταστάσεις ηλεκτρονίων σε ασύμμετρες ενώσεις ημιαγωγών, γεγονός που μας επιτρέπει να συναγάγουμε ενδιαφέρουσες αναλογίες μεταξύ μεταφοράς ηλεκτρονιακού και φωτονικού σπιν σε αντίστοιχες περιοδικές δομές. Μια τέτοια ανάλυση έγινε σε μια μονοδιάστατη περιοδική δομή από εναλασσόμενες επιστρώσεις διισοτροπικού και απλού ισοτροπικού υλικού στο όριο της ασθενούς χειρομορφίας [52].

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζουμε μια εμπεριστατωμένη ανάλυση βασισμένη στη θεωρία ομάδων για να ερμηνεύσουμε γενικά χαρακτηριστικά της φωτονικής δομής ζωνών σε 3Δ κρυστάλλους από διισοτροπικές σφαίρες σε διηλεκτρικό περιβάλλον μέσο, σε καθεστώς ισχυρής χειρομορφίας αλλά κάτω από το όριο εμφάνισης αρνητικού δείκτη διάθλασης, και ερμηνεύουμε με συνέπεια τη φυσική προέλευση των διαφόρων ιδιοκαστάσεων του ΗΜ πεδίου σε τέτοιες δομές σε συνδυασμό με αντίστοιχα φάσματα διέλευσης από πεπερασμένα πλακίδια των δομών. Στη συνέχεια, συνδυάζουμε οπτική ενεργότητα και συντονισμό στην ίδια δομική μονάδα: μια σφαίρα από διισοτροπικό υλικό καλυμμένη με σφαιρικό μεταλλικό φλοιό. Η οπτική ενεργότητα επάγεται από τον πυρήνα ενώ ο μεταλλικός φλοιός εισάγει πλασμονικές καταστάσεις συντονισμού. Διατάσσοντας τέτοια σωματίδια σε περιοδική δομή, μπορούμε να υλοποιήσουμε ένα χειρόμορφο μέσο με συντονισμό που εμφανίζει ενδιαφέρουσες οπτικές ιδιότητες, όπως διέλευση εξαρτώμενη από την πόλωση, διαχωρισμό καταστάσεων κυκλικής πόλωσης και συνεπακόλουθα καμπύλες διασποράς με αρνητική κλίση, καθώς και αρνητική διάθλαση σε περιοχές συχνοτήτων που μπορούν να ρυθμιστούν κατά βούληση. Τέτοια χαρακτηριστικά δεν εμφανίζονται σε κρυστάλλους από μεταλλικούς φλοιούς με μη οπτικά ενεργό πυρήνα [53]. Εξάλλου, ομοιογενείς σφαίρες από οπτικά ενεργό υλικό εμφανίζουν συντονισμούς μόνο σε καθεστώς ισχυρής χειρομορφίας και συνεπώς δεν αποτελούν μία ευέλικτη πλατφόρμα για την κατασκευή ενός σύνθετου χειρόμορφου μέσου με συντονισμό.

4.1 Σκέδαση από μία οπτικά ενεργή σφαίρα

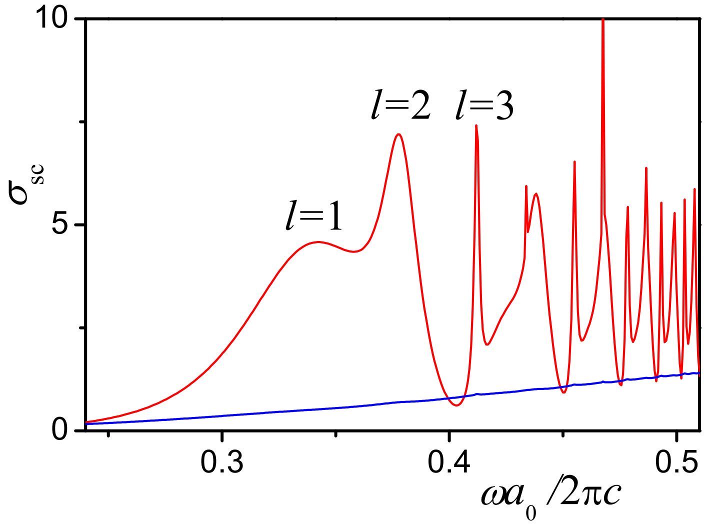
Θεωρούμε μία σφαίρα ακτίνας $S = 0.45a_0$, όπου a_0 προς το παρόν είναι αυθαίρετη μονάδα μήκους, από δισοτροπικό υλικό που χαρακτηρίζεται από ΗΜ παραμέτρους $\epsilon_c = 2$, $\mu_c = 1$, $\beta_c/a_0 = 0.2$. Η σφαίρα είναι εμβαπτισμένη σε διηλεκτρικό μέσο με $\epsilon = 3$ και $\mu = 1$. Για μια ρεαλιστική εφαρμογή, θεωρώντας $\beta_c = 3 \times 10^{-8}$ m [51], το a_0 αντιστοιχεί σε 150 nm. Η σφαίρα αυτή προκαλεί καταστάσεις συντονισμού του ΗΜ πεδίου, που είναι κυρίως εντοπισμένες στη σφαίρα και επεκτείνονται λίγο στον περιβάλλοντα χώρο. Οι καταστάσεις αυτές εμφανίζονται στους πόλους των ιδιοτιμών του πίνακα σκέδασης T στο κάτω μιγαδικό ημιεπίπεδο των συχνοτήτων, κοντά στον πραγματικό άξονα. Τέτοιοι πόλοι υπάρχουν για μία από τις δύο ιδιοτιμές του πίνακα T σε δεδομένο υπόχωρο l καθώς το γινόμενο $q_c\beta_c$ πλησιάζει τη μονάδα και συνεπώς το q_L απειρίζεται ασυμπτωτικά, βλ. Εδάφιο 2.2, στα σημεία $z_{il} = \omega_{il} - i\gamma_{il}$ όπου ω_{il} είναι η ιδιοσυχνότητα και $\gamma_{il}(0 < \gamma_{il} << \omega_{il})$ ο αντίστροφος χρόνος ζωής της αντίστοιχης 2^l-πολικής κατάστασης συντονισμού τάξης i. Χρησιμοποιώντας τις ασυμπτωτικές εκφράσεις των σφαιρικών συναρτήσεων Bessel για μεγάλο όρισμα στο όριο $q_L S \to \infty$ (βλ. Παράρτημα Γ′) καταλήγουμε στην εξής προσεγγιστική συνθήκη, τύπου στάσιμου κύματος, για την εμφάνιση καταστάσεων συντονισμού: $q_L S - l\pi/2 + \phi_l = n\pi$ για $n = 0, \pm1, \pm2, \ldots$, όπου ϕ_l είναι κατάλληλες συναρτήσεις φάσης που μεταβάλλονται αργά με τη συχνότητα για κάθε τιμή του l ($l = 1, 2, 3, \ldots$). Είναι προφανές ότι όσο πλησιάζουμε στο όριο $q_c\beta_c \to 1$ τόσο καλύτερη γίνεται η προσέγγιση.

Στο Σχ. 4.1 δείχνουμε την ενεργό διατομή σκέδασης, κανονικοποιημένη ως προς τη γεωμετρική διατομή, της συγκεκριμένης οπτικά ενεργής σφαίρας για LCP (κόκκινη καμπύλη) και RCP (μπλέ καμπύλη) προσπίπτον φως. Παρατηρούμε την ύπαρξη καταστάσεων συντονισμού που διεγείρονται μόνο από LCP προσπίπτον κύμα. Η πρώτη διπολική ($l = 1$) κατάσταση συντονισμού με χρόνο ζωής $\gamma_{11}^{-1}\ 2\pi c/a_0 \cong 25$ εμφανίζεται στη συχνότητα $\omega_{11} = 0.343\ \ 2\pi c/a_0$ ενώ η πρώτη τετραπολική ($l = 2$) κατάσταση εμφανίζεται στη συχνότητα $\omega_{12} = 0.379\ \ 2\pi c/a_0$ με $\gamma_{12}^{-1}\ 2\pi c/a_0 \cong 100$ και η πρώτη οκταπολική ($l = 3$) στη συχνότητα $\omega_{13} = 0.412\ \ 2\pi c/a_0$ με $\gamma_{13}^{-1}\ 2\pi c/a_0 \cong 848$.

Ας θεωρήσουμε τώρα ένα σφαιρικό σωματίδιο, ακτίνας S που αποτελείται από ένα σφαιρικό πυρήνα δισοτροπικού υλικού, ακτίνας S_c, και ένα μεταλλικό φλοιό, πάχους D ($S = S_c + D$), στον αέρα. Το μέταλλο έχει σχετική μαγνητική διαπερατότητα $\mu_p = 1$ και η σχετική διηλεκτρική του συνάρτηση, στο πλαίσιο του προτύπου Drude, έχει την απλή μορφή

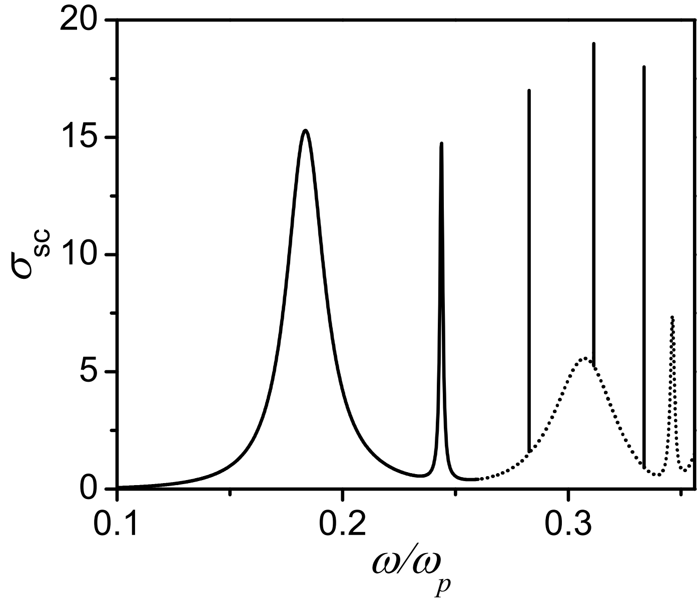
$$\epsilon_p(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\tau^{-1})} , \tag{4.1}$$

όπου τ είναι ο χρόνος αποκατάστασης των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας και ω_p η συχνότητα



Σχήμα 4.1: Φάσματα ενεργού διατομής σκέδασης, κανονικοποιημένα ως προς τη γεωμετρική διατομή, για LCP (κόκκινη καμπύλη) και RCP (μπλέ καμπύλη) φως που προσπίπτει σε μία σφαίρα ακτίνας $S = 0.45a_0$ από δισοτροπικό υλικό που χαρακτηρίζεται από ΗΜ παραμέτρους $\epsilon_c = 2$, $\mu_c = 1$, $\beta_c/a_0 = 0.2$ (a_0 είναι η μονάδα μήκους, προς το παρόν αυθαίρετη). Η σφαίρα είναι εμβαπτισμένη σε διηλεκτρικό μέσο με $\epsilon = 3$ και $\mu = 1$. Στο σχήμα δείχνουμε τις καταστάσεις συντονισμού ανά συμμετρία ($l = 1, 2, 3$) στην περιοχή χαμηλών συχνοτήτων του φάσματος.

πλάσματος του μετάλλου. Θα χρησιμοποιήσουμε την ποσότητα c/ω_p ως μονάδα μήκους, η οποία αντιστοιχεί περίπου σε 20 nm αν θεωρήσουμε μια τυπική τιμή της ενέργειας πλάσματος του μετάλλου $\hbar\omega_p \approx 10$ eV. Στο παράδειγμα που θα εξετάσουμε θέτουμε $S = 3.3c/\omega_p$, $S_c = 3c/\omega_p$ και $D = 0.3c/\omega_p$. Οι ΗΜ παράμετροι του πυρήνα είναι $\beta_c = 1.5c/\omega_p$, $\epsilon_c = 2$ και $\mu_c = 1$, ενώ αγνοούμε τις απώλειες ($\tau^{-1} = 0$) στο μεταλλικό περίβλημα. Ο οπτικά ενεργός πυρήνας του σύνθετου σωματιδίου δημιουργεί καταστάσεις συντονισμού του ΗΜ πεδίου σε υψηλές συχνότητες όπου η χειρομορφία είναι αρκετά ισχυρή. Εξάλλου, ο μεταλλικός φλοιός εμφανίζει σωματιδιακές πλασμονικές καταστάσεις, όπου το ΗΜ πεδίο είναι κυρίως εντοπισμένο στην εξωτερική επιφάνεια, και πλασμονικές καταστάσεις κοιλότητας, όπου το πεδίο συγκεντρώνεται κατά το πλείστον στην εσωτερική επιφάνεια. Οι καταστάσεις αυτές είναι ηλεκτρικού 2^l-πολικού τύπου και έχουν αναλυθεί λεπτομερώς στη βιβλιογραφία [53–55]. Τα πλασμόνια της εξωτερικής και της εσωτερικής επιφάνειας του φλοιού αλληλεπιδρούν μεταξύ τους και δημιουργούν συζευγμένες υβριδικές καταστάσεις: Μία κάτω από την πλασμονική κατάσταση χαμηλής συχνότητας της εξωτερικής επιφάνειας (τύπου σωματιδίου) και μία πάνω από την πλασμονική κατάσταση υψηλής συχνότητας της εσωτερικής επιφάνειας (τύπου κοιλότητας). Οι καταστάσεις αυτές μπορούν να ρυθμιστούν κατά βούληση αλλάζοντας το πάχος του φλοιού. Στο φάσμα της ενεργού διατομής σκέδασης που δείχνουμε στο Σχ. 4.2, φαίνονται καθαρά οι κορυφές συντονισμού των ιδιοκαταστάσεων του οπτικά ενεργού πυρήνα και των πλασμονίων τύπου σωματιδίου του μεταλλικού περιβλήματος. Οι πλασμονικές καταστά-

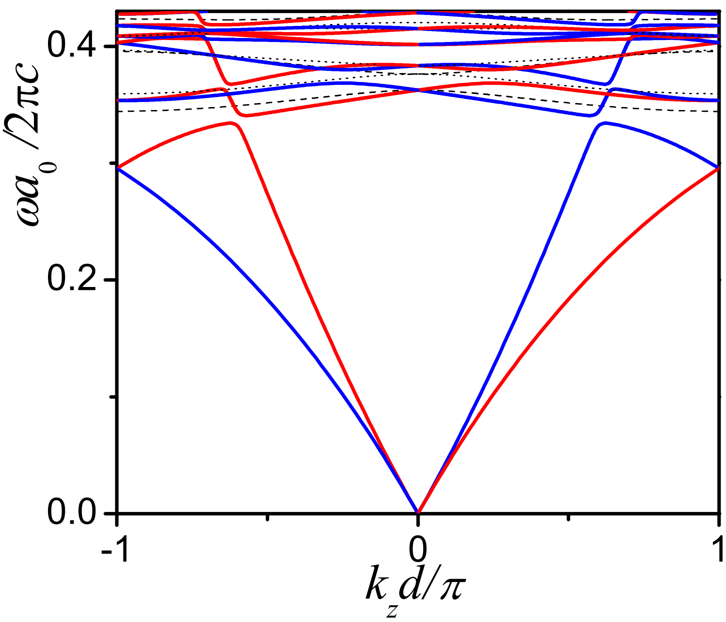


Σχήμα 4.2: Το φάσμα της ενεργού διατομής σκέδασης, κανονικοποιημένο ως προς τη γεωμετρική διατομή, μιας σφαίρας με οπτικά ενεργό πυρήνα ($\epsilon_c = 2$, $\mu_c = 1$, $\beta_c = 1.5c/\omega_p$) ακτίνας $S_c = 3c/\omega_p$, καλυμμένης με μεταλλικό φλοιό, πάχους $D = 0.3c/\omega_p$ που περιγράφεται από τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude χωρίς απώλειες και $\mu_p = 1$, για γραμμικά πολωμένο προσπίπτον κύμα. Το σωματίδιο βρίσκεται στον αέρα. Οι συνεχείς και εστιγμένες γραμμές δείχνουν τους σωματιδιακούς πλασμονικούς συντονισμούς του φλοιού και τους συντονισμούς του οπτικά ενεργού πυρήνα, αντίστοιχα.

σεις τύπου κοιλότητας εμφανίζονται σε υψηλότερες συχνότητες ($> 0.8\omega_p$) και δεν βρίσκονται στην περιοχή συχνοτήτων που μας ενδιαφέρει. Αν θέσουμε $\beta_c = 0$, οι συντονισμοί λόγω χειρομορφίας εξαφανίζονται, και έτσι μπορούμε να διακρίνουμε και να ταυτοποιήσουμε την προέλευση των διαφόρων καταστάσεων. Η θεμελιώδης διπολική πλασμονική κατάσταση τύπου σωματιδίου εμφανίζεται σε συχνότητα $0.18\omega_p$, η τετραπολική σε $0.24\omega_p$, η οκταπολική σε $0.28\omega_p$ κτλ. Αντίστοιχα, η θεμελιώδης διπολική κατάσταση συντονισμού του οπτικά ενεργού πυρήνα εμφανίζεται σε συχνότητα $0.31\omega_p$ και η τετραπολική σε $0.34\omega_p$.

4.2 Κρύσταλλος δομής fcc από οπτικά ενεργές σφαίρες

Θεωρούμε έναν κρύσταλλο fcc, πλεγματικής σταθεράς a, από σφαίρες εμβαπτισμένες σε διηλεκτρικό μέσο με $\epsilon = 3$ και $\mu = 1$. Οικοδομούμε τον κρύσταλλο ως επαλληλία κρυσταλλογραφικών επιπέδων (001). Σε κάθε επίπεδο, οι σφαίρες είναι διατεταγμένες σε τετραγωνικό πλέγμα πλεγματικής σταθεράς $a_0 = a\sqrt{2}/2$ ενώ τα διαδοχικά επίπεδα απέχουν κατά $d = a/2$. Οι σφαίρες έχουν ακτίνα $S = 0.45a_0$ και είναι από δισοτροπικό υλικό με $\epsilon_c = 2$, $\mu_c = 1$, $\beta_c/a_0 = 0.2$. Είναι ενδιαφέρον ότι ο συγκεκριμένος κρύσταλλος δεν έχει συμμετρία αντιστροφής χώρου λόγω των δισοτροπικών συστατικών του. Επομένως η σημειακή ομάδα συμμετρίας που τον περιγράφει είναι η O, που περιλαμβάνει μόνο αμιγείς στροφές, και όχι η O_h που θα ήταν αν οι σφαίρες ήταν από απλό ισοτροπικό υλικό.



Σχήμα 4.3: Η φωτονική δομή ζωνών ενός κρυστάλλου fcc πλεγματικής σταθεράς a (απόσταση πλησιεστέρων γειτόνων: $a_0 = a\sqrt{2}/2$) από σφαίρες ακτίνας $S = 0.45a_0$ από δισοτροπικό υλικό με ΗΜ παραμέτρους $\epsilon_c = 2$, $\mu_c = 1$, $\beta_c/a_0 = 0.2$ σε διηλεκτρικό μέσο με $\epsilon = 3$ και $\mu = 1$, κατά τη διεύθυνση [001]. Οι ζώνες των ιδιοκατάστασεων LCP και RCP απεικονίζονται με κόκκινο και μπλέ χρώμα, αντίστοιχα. Με διακεκομμένες και εστιγμένες καμπύλες δείχνουμε τις μη οπτικά ενεργές ζώνες (βλ. επίσης Σχ. 4.4).

Μελετάμε τις φωτονικές ιδιοκαταστάσεις και την οπτική απόκριση αυτού του κρυστάλλου με ακριβείς υπολογισμούς χρησιμοποιώντας τη μέθοδο στρωματικής πολλαπλής σκέδασης που περιγράψαμε στα προηγούμενα κεφάλαια. Σημειώνεται ότι για να εξασφαλίσουμε καλή σύγκλιση των αποτελεσμάτων μας θεωρούμε $l_{max} = 6$ και $g_{max} = 37$. Το Σχ. 4.3 παριστάνει τη φωτονική δομή ζωνών του κρυστάλλου κατά τη διεύθυνση [001]. Οι ζώνες κατά τη διεύθυνση αυτή έχουν τη συμμετρία των μη αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων (A, B, E_1, E_2) της ομάδας C_4, η οποία είναι υποομάδα της O [56]. Όλες αυτές οι ζώνες είναι μη εκφυλισμένες διότι οι μη αναγωγίσιμες αναπαραστάσεις της C_4 είναι μονοδιάστατες. Η συμμετρία των ζωνών E_1 και E_2 είναι συμβατή με αυτή των LCP και RCP διαδιδομένων κυμάτων, αντίστοιχα, και συνεπώς μπορούν να διεγερθούν από κύμα με την αντίστοιχη πόλωση, που προσπίπτει κάθετα στην επιφάνεια (001) του κρυστάλλου. Ζώνες A και B δεν μπορούν να διεγερθούν από εξωτερικά προσπίπτον κύμα γιατί δεν έχουν την κατάλληλη συμμετρία. Οι ζώνες αυτές αντιστοιχούν σε δέσμιες καταστάσεις του ΗΜ πεδίου σε ένα πεπερασμένο πλακίδιο κομμένο παράλληλα στην επιφάνεια (001) του κρυστάλλου που φθίνουν εκθετικά στον περιβάλλοντα χώρο. Αυτό φαίνεται αν προσδιορίσουμε τις ιδιοκαταστάσεις ενός τέτοιου πλακιδίου αποτελούμενου, π.χ., από

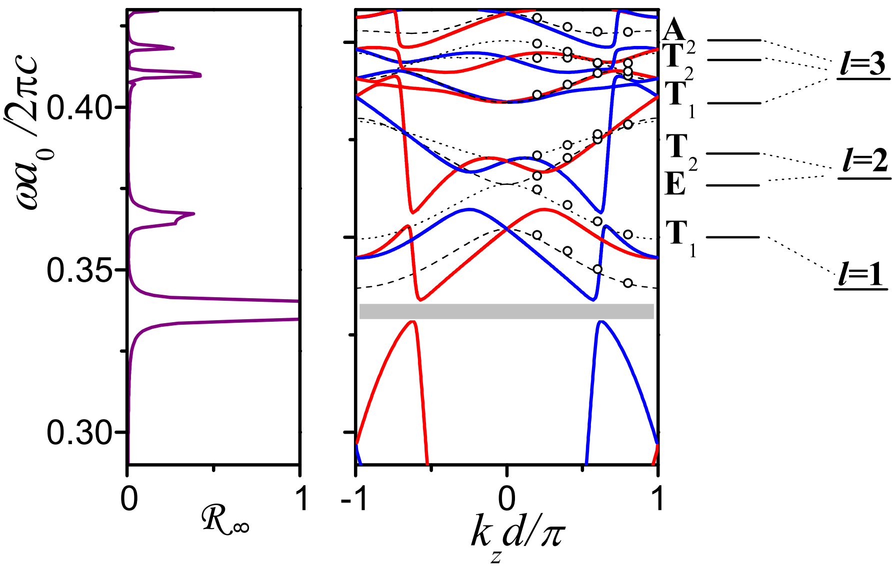
O	A_1	A_2	E	T_1	T_2
C_4	A	B	$A\ B$	$A\ E_1\ E_2$	$B\ E_1\ E_2$
D_4	A_1	B_1	A_2	B_2	E
C_4	A	B	A	B	$E_1\ E_2$

Πίνακας 4.1: Σχέσεις συμβατότητας μεταξύ των μη αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων των ομάδων O και C_4 καθώς και των D_4 και C_4.

$N_L = 4$ επίπεδα σφαιρών για $\mathbf{k}_{\parallel} = (0,0)$ βάσει της Εξ. (3.69). Στην περιοχή συχνοτήτων καθεμιάς από τις ζώνες αυτές βρίσκουμε τέσσερεις ιδιοσυχνότητες οι οποίες, αν αντιστοιχιστούν σε κυματαριθμούς $k_z = \kappa\pi/(N_L+1)$ όπου $\kappa = 1,\ 2, \ldots, N_L$ και $N_L = 4$, αναπαράγουν τις αντίστοιχες καμπύλες διασποράς του άπειρου κρυστάλλου, όπως δείχνουν οι ανοιχτοί κύκλοι στο Σχ. 4.4.

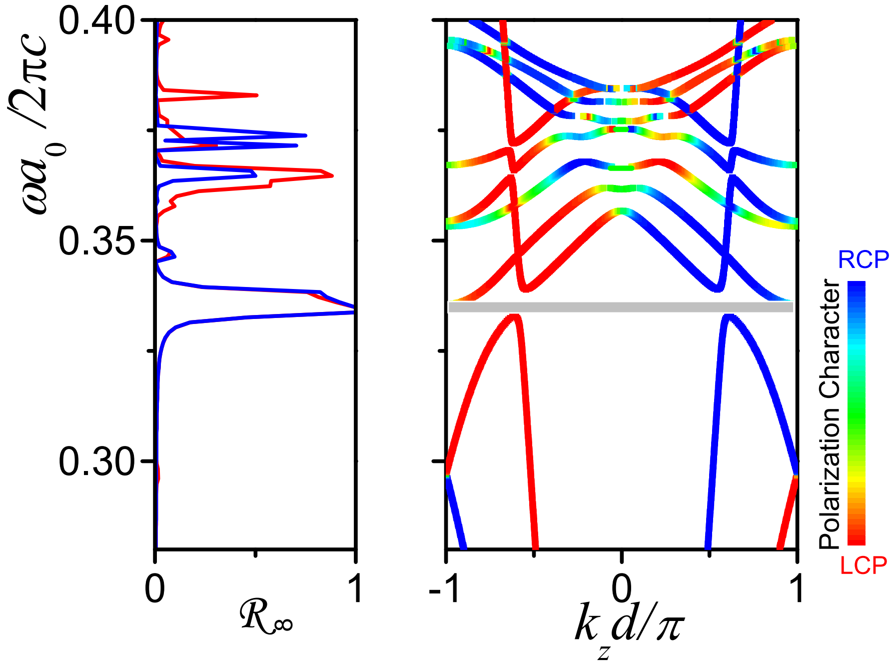
Οι ιδιοκαταστάσεις στο κέντρο της $1^{ης}$ ΖΒ, $\mathbf{k}$=(0,0,0), έχουν την πλήρη συμμετρία της σημειακής ομάδας O, ενώ στα όρια της ζώνης, $\mathbf{k}$=$(0,0,\pm\pi/d)$, έχουν τη συμμετρία της D_4, η οποία είναι υποομάδα της O. Συμβατότητα μεταξύ των μη αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων των ομάδων O και C_4 καθώς και των D_4 και C_4 (βλ. Πίνακα 4.2) επιβάλλει οι οπτικά ενεργές ζώνες για κύματα LCP και RCP κατά τη διεύθυνση [001], συμμετρίας E_1 και E_2 αντίστοιχα, να συγκλίνουν σε διπλά εκφυλισμένες καταστάσεις συμμετρίας E στα πιο πάνω όρια της $1^{ης}$ ΖΒ και σε τριπλά εκφυλισμένες καταστάσεις (T_1 ή T_2) στο κέντρο της ζώνης, όπως φαίνεται στο Σχ. 4.4. Ένα άλλο ενδιαφέρον χαρακτηριστικό του διαγράμματος ζωνών των Σχ. 4.3 και 4.4 προκύπτει από τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου, που επιβάλλει φασματική αντιστρεπτότητα όπως στην περίπτωση μη χειρόμορφων φωτονικών κρυστάλλων: Παρότι $\omega_{nE_1}(\mathbf{k}) \neq \omega_{nE_1}(-\mathbf{k})$ και $\omega_{nE_2}(\mathbf{k}) \neq \omega_{nE_2}(-\mathbf{k})$ λόγω απουσίας συμμετρίας αντιστροφής χώρου, $\omega_{nE_1}(\mathbf{k}) = \omega_{nE_2}(-\mathbf{k})$, όπου ο δείκτης $n = 1, 2, \ldots$ απαριθμεί τις ζώνες. Αυτό σημαίνει ότι η συμμετρία αντιστροφής χρόνου *από μόνη της* διασφαλίζει τον εκφυλισμό των καταστάσεων LCP και RCP στο κέντρο και στα όρια της $1^{ης}$ ΖΒ. Ας σημειωθεί ότι διαχωρισμός σε καταστάσεις κυκλικής πόλωσης και ύπαρξη οπτικά ανενεργών ζωνών υφίστανται σε διευθύνσεις υψηλής συμμετρίας, όπως [001] και [111]. Κατά μια τυχαία διεύθυνση, όλες οι ζώνες έχουν τη συμμετρία της ταυτοτικής αναπαράστασης της τετριμμένης σημειακής ομάδας οπότε μπορούν να διεγερθούν από κατάλληλο προσπίπτον κύμα οποιασδήποτε πόλωσης.

Σε χαμηλές συχνότητες $\omega a_0/2\pi c \lesssim 0.3$ παίρνουμε μη εκφυλισμένες εκτεταμένες ζώνες καταστάσεων LCP και RCP, συμμετρίας E_1 και E_2 αντίστοιχα, όπως αναμένεται για διάδοση σε ομοιογενές οπτικά ενεργό ισοδύναμο μέσο, στην αναπαράσταση ανηγμένης ζώνης λόγω της περιοδικότητας. Σε υψηλότερες συχνότητες, το διάγραμμα διασποράς χαρακτηρίζεται από στενές ζώνες που προκύπτουν από καταστάσεις συντονισμού των σφαιρών που αλληλεπιδρούν ασθενώς μεταξύ τους. Οι συνιστώσες E_1 και E_2 αυτών των ζωνών συντονισμού αλληλεπιδρούν με τις εκτεταμένες ζώνες ισοδύναμου μέσου της ίδιας συμμετρίας και έτσι προκύπτει η δομή ζωνών που φαίνεται στα Σχ. 4.3 και 4.4. Παρατηρούμε ότι αλληλεπιδράσεις στα σημεία διασταύρωσης των ζωνών προκαλούν την ισχυρή κάμψη τους καθώς επίσης και συνάρτηση διασποράς με αρνητική κλίση στο εσωτερικό της $1^{ης}$ ΖΒ, ενώ ένα χάσμα συχνοτήτων που εκτείνεται από $\omega a_0/2\pi c = 0.335$ εως $\omega a_0/2\pi c = 0.340$ ανοίγει στη διεύθυνση [001] του συγκεκριμένου κρυστάλλου.



Σχήμα 4.4: Μεγέθυνση του Σχ. 4.3 σε περιορισμένο εύρος συχνοτήτων περί τους χαμηλότερους πολυπολικούς συντονισμούς της μεμονωμένης σφαίρας, που σημειώνονται στο περιθώριο μαζί με τις αντίστοιχες ιδιοκαταστάσεις στο κέντρο της $1^{ης}$ ΖΒ. Οι δεύτερες συμβολίζονται με την κατάλληλη μη αναγωγίσιμη αναπαράσταση της σημειακής ομάδας συμμετρίας O που τις περιγράφει. Οι ζώνες κατά τη διεύθυνση [001] έχουν τη συμμετρία της ομάδας C_4: A (διακεκομμένη γραμμή), B (εστιγμένη γραμμή), E_1 (κόκκινη συνεχής γραμμή), E_2 (μπλέ συνεχής γραμμή). Η σκιασμένη περιοχή δείχνει χάσμα συχνοτήτων. Με ανοιχτούς κύκλους φαίνονται οι ιδιοσυχνότητες ενός πλακιδίου τεσσάρων επιπέδων (001) του κρυστάλλου αντιστοιχισμένες σε διακριτές τιμές του $k_z d/\pi = 1/5,\ 2/5,\ 3/5,\ 4/5$ (βλ. κείμενο). Αριστερά του διαγράμματος ζωνών δείχνουμε το αντίστοιχο φάσμα ανάκλασης (για LCP και RCP προσπίπτον κύμα) του ημιάπειρου κρυστάλλου.

Ο συνολικός αριθμός των ζωνών που φαίνονται στο Σχ. 4.3 ισούται με αυτόν που θα περίμενε κανείς από την αλληλεπίδραση των ζωνών συντονισμού με τις εκτεταμένες ζώνες που θα υπήρχαν σε ένα ισοδύναμο ομοιογενές μέσο. Σύμφωνα με τη θεωρία ομάδων (βλ. επίσης Πίνακα 4.1), όπως φαίνεται στο Σχ. 4.4 μια διπολική κατάσταση συντονισμού των μεμονομένων σφαιρών δίνει μια τριπλά εκφυλισμένη κατάσταση συμμετρίας T_1 στο κέντρο της $1^{ης}$ ΖΒ, η οποία διαχωρίζεται σε μία ζώνη A, μία E_1 και μία E_2 κατά τη διεύθυνση [001]. Αντίστοιχα, μια τετραπολική κατάσταση συντονισμού δίνει μία διπλά εκφυλισμένη κατάσταση E και μία άλλη τριπλά εκφυλισμένη T_2 στο κέντρο της $1^{ης}$ ΖΒ. Αυτές διαχωρίζονται σε μία ζώνη A και μία B και σε μία B, μία E_1 και μία E_2 κατά τη διεύθυνση [001], αντίστοιχα. Επίσης μια οκταπολική κατάσταση συντονισμού των σφαιρών δίνει μία μη εκφυλισμένη κατάσταση A_2 καθώς και δύο τριπλά εκφυλισμένες καταστάσεις συμμετρίας T_1 και T_2 στο κέντρο της $1^{ης}$ ΖΒ. Κατά τη διεύθυνση [001] οι καταστάσεις αυτές εξελίσσονται σε: Μία ζώνη B· μία E_1, μία E_2 και μία A· μία E_1, μία E_2 και μία B, αντίστοιχα.



Σχήμα 4.5: Η φωτονική δομή ζωνών του υπό μελέτη κρυστάλλου, για $\mathbf{k}_{\parallel} = (0.1, 0)2\pi/a_0$. Η σκιασμένη περιοχή δείχνει χάσμα συχνοτήτων. Αριστερά του διαγράμματος ζωνών δείχνουμε το αντίστοιχο φάσμα ανάκλασης (για LCP και RCP προσπίπτον κύμα) του ημιάπειρου κρυστάλλου.

Δίπλα από το διάγραμμα ζωνών, στο Σχ. 4.4 παρουσιάζουμε επίσης το φάσμα ανάκλασης του αντίστοιχου ημιάπειρου κρυστάλλου για φως που προσπίπτει κάθετα στην επιφάνεια (001). Όπως προκύπτει από τους υπολογισμούς, η ανακλαστικότητα δεν εξαρτάται από την πόλωση (LCP ή RCP) του προσπίπτοντος κύματος, όπως στην περίπτωση ενός ομοιογενούς οπτικά ενεργού μέσου [57, 58]. Αξίζει να σημειωθεί ότι η ύπαρξη μόνο καταστάσεων RCP (LCP) για θετικά (αρνητικά) k_z, π.χ., πάνω και κάτω από το χάσμα (βλ. Σχ. 4.3 και 4.4), δεν συνεπάγεται επιλεκτική διέλευση ανάλογα με την πόλωση. Η διάδοση του φωτός κατά συγκεκριμένη διεύθυνση στον κρύσταλλο πραγματοποιείται μέσω των ζωνών εκείνων, των οποίων η ταχύτητα ομάδας και όχι το k_z έχει το κατάλληλο πρόσημο. Όπως φαίνεται από τα Σχ. 4.3 και 4.4 μια ζώνη RCP με θετική ή αρνητική ταχύτητα ομάδας σε δεδομένη συχνότητα συνοδεύεται από μια ζώνη LCP με ταχύτητα ομάδας του ιδίου προσήμου στη συχνότητα αυτή, και αντίστροφα. Επομένως, κύματα οποιασδήποτε κυκλικής πόλωσης μπορούν να διαδοθούν μέσω του κρυστάλλου. Στην περιοχή του χάσματος, όπου δεν υπάρχουν διαδιδόμενες καταστάσεις του ΗΜ πεδίου στον κρύσταλλο, η ανακλαστικότητα ισούται με τη μονάδα όπως φαίνεται στο αριστερό διάγραμμα του Σχ. 4.4.

Όπως τονίστηκε προηγουμένως, κατά μια τυχαία διεύθυνση, όλες οι ζώνες έχουν τη συμμετρία της ταυτοτικής αναπαράστασης της τετριμμένης σημειακής ομάδας και συνεπώς μπορούν να διεγερθούν από κύμα κατάλληλης πρόσπτωσης με οποιαδήποτε πόλωση. Όμως, εφόσον οι ζώνες συζεύγνυνται σε διαφορετικό βαθμό με κάθε κατάσταση πόλωσης, το αντίστοιχο φάσμα ανάκλασης για LCP και RCP προσπίπτον φως είναι στην περίπτωση αυτή διαφορετικό, όπως φαίνεται στο Σχ. 4.5. Ο βαθμός σύζευξης με κύμα συγκεκριμένης κυκλικής πόλωσης κατά μήκος μιας ζώνης καθορίζεται από την προβολή των αντίστοιχων καταστάσεων Bloch σε βάση ιδιοκαταστάσεων LCP και RCP, όπως δείχνει η μεταβολή του χρώματος των ζωνών.

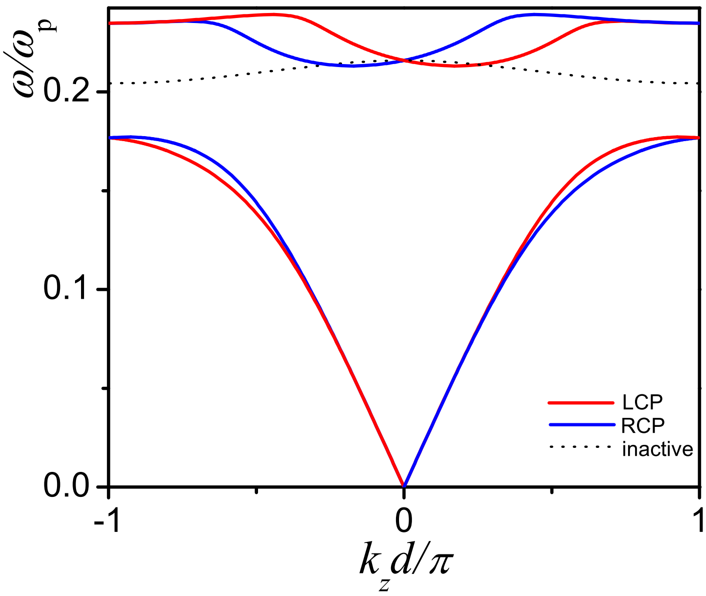
Οι απώλειες στο οπτικά ενεργό υλικό, που είναι σημαντικές σε χειρόμορφα μεταϋλικά, προσδίδουν ένα φανταστικό μέρος και στην παράμετρο χειρομορφίας, κάτι που μπορεί να ληφθεί υπόψη στους υπολογισμούς μας. Λόγω των απωλειών όλες οι ζώνες γίνονται μιγαδικές, υπό την έννοια ότι όλες οι τιμές του k_z αποκτούν ένα φανταστικό μέρος, και οι κορυφές στην ανακλαστικότητα γίνονται ασθενέστερες λόγω της απορρόφησης.

Στους υπολογισμούς μας υποθέσαμε ότι οι διάφορες ΗΜ παράμετροι των συστατικών υλικών παραμένουν σταθερές στην περιοχή συχνοτήτων που θεωρήσαμε αλλά η μέθοδός μας μπορεί να χειριστεί και περιπτώσεις με τις παραμέτρους αυτές να εξαρτώνται από τη συχνότητα. Πρέπει να τονιστεί ότι, υποθέτοντας μια σταθερή τιμή του β_c, η ισχύς της χειρομορφίας, που περιγράφεται από την αδιάστατη παράμετρο $|q_c\beta_c|$, μηδενίζεται στο στατικό όριο ($\omega = 0$) και αυξάνει γραμμικά με τη συχνότητα. Αυτό μας επιτρέπει να μελετήσουμε το καθεστώς τόσο ασθενούς όσο και ισχυρής χειρομορφίας στο ίδιο φυσικό σύστημα. Στην περιοχή υψηλών συχνοτήτων που θεωρήσαμε, δηλαδή $\omega a_0/2\pi c \approx 0.4$, η σταθερή παράμετρος χειρομορφίας $\beta_c = 0.2a_0$ που υποθέσαμε αντιστοιχεί σε $q_c\beta_c \approx 0.7$, που είναι πρακτικά εφικτό. Σε χειρόμορφα μεταϋλικά, η ποσότητα $|q_c\beta_c|$ μπορεί ακόμη και να υπερβαίνει τη μονάδα κοντά σε μια συχνότητα συντονισμού, επάγοντας αρνητικό ισοδύναμο δείκτη διάθλασης για μια συγκεκριμένη κατάσταση πόλωσης [47–49].

Υπάρχουν επίσης ουσίες με πολύ ισχυρή οπτική ενεργότητα, π.χ., ελικοειδή πολυμερή. Για παράδειγμα έχει αναφερθεί ότι το πολυ-Λ-λακτικό οξύ (PLLA) εμφανίζει τεράστια οπτική στροφική ικανότητα [59], η οποία αντιστοιχεί σε $\beta_c = 3.08 \times 10^{-8}$ m [51]. Επομένως, νανοσωματίδια από PLLA [60], αυτοοργανωμένα σε περιοδική δομή, μπορούν να προσφέρουν μια εναλλακτική δυνατότητα για την υλοποίηση κρυστάλλων από οπτικά ενεργές σφαίρες, όπως αυτές που μελετήσαμε, που να είναι λειτουργικοί στο ορατό φάσμα.

4.3 Κρύσταλλος δομής fcc από οπτικά ενεργές σφαίρες με μεταλλικό περίβλημα

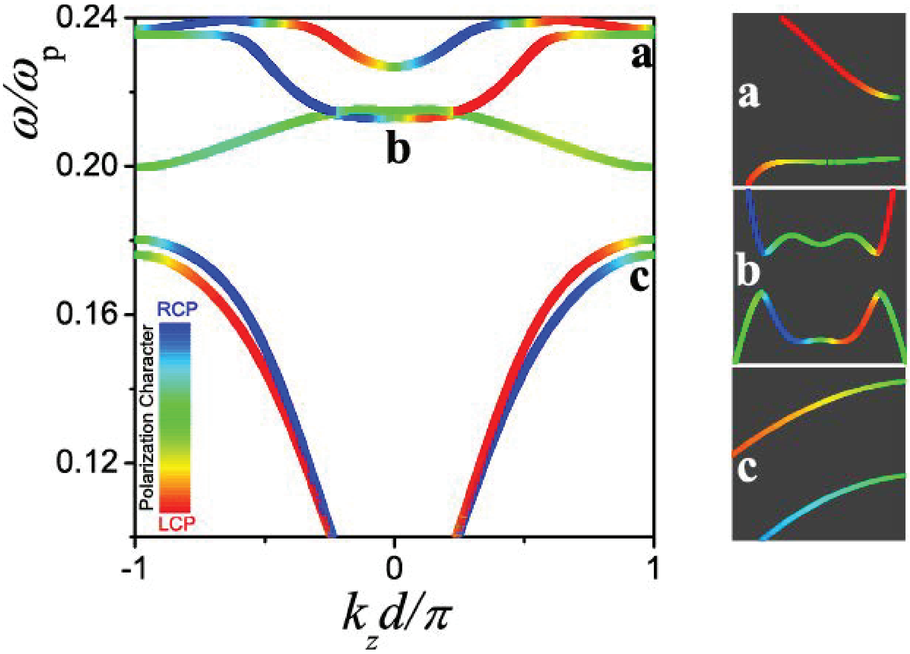
Θα μελετήσουμε τώρα ένα παράδειγμα κρυστάλλου fcc, παρόμοιο με αυτό του προηγούμενου εδαφίου, όπου όμως οι σφαίρες είναι καλυμμένες με μεταλλικό φλοιό με τα ίδια χαρακτηριστικά όπως στη σχετική εφαρμογή του Εδαφίου 4.1 (ϵ_p δίνεται από την Εξ. (4.1) με $\tau^{-1} = 0$ και $\mu_p = 1$· $\epsilon_c = 2$, $\mu_c = 1$, και $\beta_c = 1.5c/\omega_p$· $S = 3.3c/\omega_p$, $S_c = 3c/\omega_p$ και $D = 0.3c/\omega_p$). Για την πλεγματική σταθερά του κρυστάλλου επιλέγουμε την τιμή $a = 10c/\omega_p$. Οι φωτονικές ζώνες που υπολογίζουμε με τη στρωματική μέθοδο πολλαπλής σκέδασης, παίρνοντας $l_{max} = 5$ και $g_{max} = 37$ ώστε να έχουμε ικανοποιητική σύγκλιση, απεικονίζονται στο Σχ. 4.6 και έχουν τις ίδιες συμμετρίες που περιγράψαμε λεπτομερώς στο αντίστοιχο παράδειγμα του προηγούμενου εδαφίου. Σε χαμηλές συχνότητες ($\omega/\omega_p \lesssim 0.17$), βρίσκουμε δύο μη εκφυλισμένες εκτεταμένες ζώνες καταστάσεων LCP και RCP, συμμετρίας E_1 και E_2, αντίστοιχα. Στην περιοχή περί τη συχνότητα $0.2\omega_p$, η φωτονική δομή ζωνών χαρακτηρίζεται από την παρουσία τριών επιπλέον



Σχήμα 4.6: Η φωτονική δομή ζωνών ενός κρυστάλλου fcc, πλεγματικής σταθεράς $a = 10c/\omega_p$, από χειρόμορφες σφαίρες ($\epsilon_c = 2$, $\mu_c = 1$, $\beta_c = 1.5c/\omega_p$) ακτίνας $S_c = 3c/\omega_p$, καλυμμένες με μεταλλικό φλοιό, πάχους $D = 0.3c/\omega_p$ που περιγράφεται από τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude χωρίς απώλειες και $\mu_p = 1$, κατά τη διεύθυνση [001].

στενών ζωνών, μία συμμετρίας E_1, μία E_2, και μία A που προέρχονται από τις διπολικές πλασμονικές καταστάσεις τύπου σωματιδίου των σφαιρών, που αλληλεπιδρούν ασθενώς μεταξύ τους. Οι στενές ζώνες συμμετρίας E_1 και E_2 υβριδοποιούνται με τις εκτεταμένες ζώνες της ίδιας συμμετρίας για να δώσουν το διάγραμμα ζωνών του Σχ. 4.6. Φαίνεται καθαρά ότι η αλληλεπίδραση στα σημεία διασταύρωσης των ζωνών προκαλεί την ισχυρή κάμψη τους καθώς και αρνητική κλίση στην καμπύλη διασποράς στο εσωτερικό της $1^{ης}$ ZB, ταυτόχρονα με ένα χάσμα συχνοτήτων εκτεινόμενο από $0.179\omega_p$ έως $0.211\omega_p$ κατά τη συγκεκριμένη διεύθυνση.

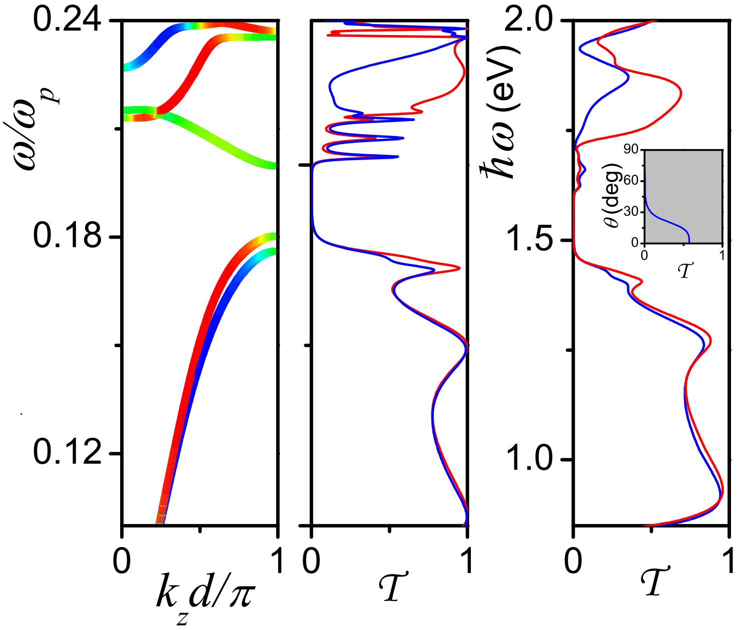
Όπως έχει ήδη τονιστεί, σε μια τυχαία διεύθυνση της $1^{ης}$ ZB, όλες οι ζώνες έχουν τη συμμετρία της ταυτοτικής αναπαράστασης της τετριμμένης σημειακής ομάδας και έτσι μπορούν να διεγερθούν από κατάλληλα προσπίπτον κύμα οποιασδήποτε πόλωσης. Επίσης, στην περίπτωση αυτή, οι ζώνες πάντα αλληλεπιδρούν στα σημεία διασταύρωσης και οι εκφυλισμοί αίρονται σε μικρό ή μεγάλο βαθμό ανάλογα με τη μορφή των αντίστοιχων κυματοσυναρτήσεων. Στο Σχ. 4.7 δείχνουμε το φωτονικό διάγραμμα ζωνών του συγκεκριμένου κρυστάλλου κατά μια τυχαία διεύθυνση που αντιστοιχεί σε $\mathbf{k}_\parallel = (0.15, 0)2\pi/a_0$. Στην περίπτωση αυτή, οι ζώνες δεν έχουν αμιγώς συμμετρία LCP ή RCP αλλά το μίγμα των χαρακτήρων LCP-RCP μεταβάλλεται σε μια συγκεκριμένη ζώνη όπως δείχνουμε με χρωματική κλίμακα στο Σχ. 4.7. Χαρακτηρίζοντας τις ιδιοκαταστάσεις των ζωνών με αυτό τον τρόπο μπορούμε να ερμηνεύσουμε με συνέπεια αντίστοιχα φάσματα διέλευσης πεπερασμένων πλακιδίων του κρυστάλλου, για συγκεκριμένη τιμή του $\mathbf{k}_\parallel$. Καταστάσεις με κάποιο κυρίαρχο χαρακτήρα κυκλικής πόλω-



Σχήμα 4.7: Η φωτονική δομή ζωνών του υπό μελέτη κρυστάλλου για $\mathbf{k}_{\|} = (0.15, 0)2\pi/a_0$. Στο περιθώριο φαίνονται σε μεγέθυνση οι καμπύλες διασποράς στις περιοχές a, b, c.

σης και θετική (αρνητική) ταχύτητα ομάδας συζεύγνυνται κυρίως με ένα επίπεδο ΗΜ κύμα της ίδιας πόλωσης, που προσπίπτει κατά τη θετική (αρνητική) κατεύθυνση z σε πεπερασμένο πλακίδιο του κρυστάλλου κομμένο παράλληλα στο κρυσταλλογραφικό επίπεδο (001). Όπως φαίνεται στο Σχ. 4.8, στην περιοχή ενός χάσματος για κάποια κατάσταση κυκλικής πόλωσης, μόνο προσπίπτοντα κύματα αντίθετης πόλωσης επιτρέπεται να διέλθουν. Στο ένθετο του Σχ. 4.8 απεικονίζεται η μεταβολή της διελευσιμότητας ενός πλακιδίου από χειρόμορφες σφαίρες καλυμμένες με άργυρο, συναρτήσει της γωνίας πρόσπτωσης, θ, για προσπίπτον φως RCP με συχνότητα εντός ενός χάσματος που ανοίγει για τη συμμετρία αυτή καθώς απομακρυνόμαστε από την κάθετη πρόσπτωση. Φαίνεται καθαρά ότι για $\theta \geqslant 15°$ η συνιστώσα RCP μιας προσπίπτουσας δέσμης φωτός αποσβένυται.

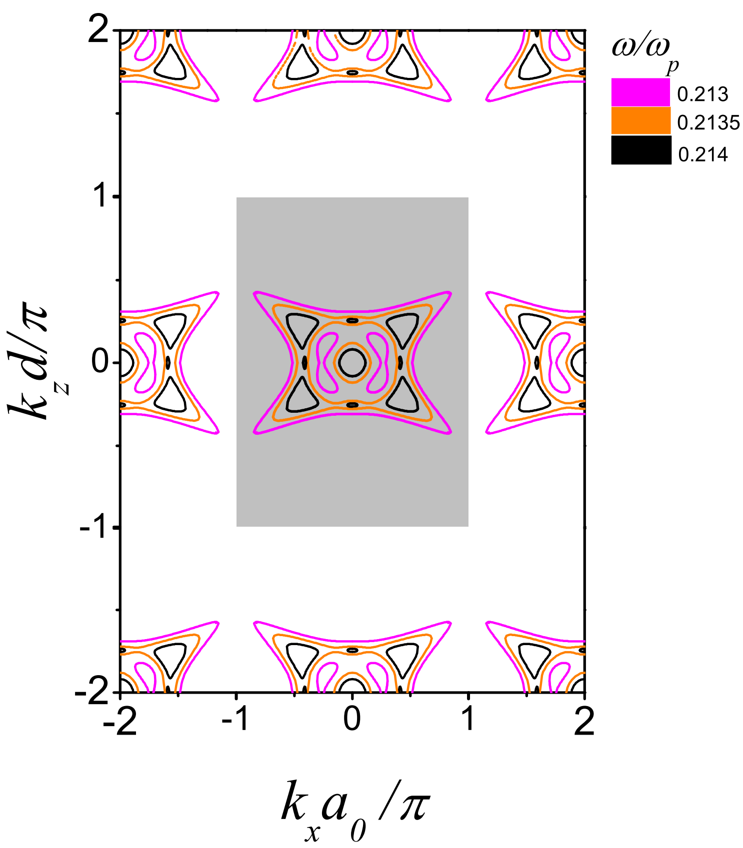
Θα μελετήσουμε τώρα τη δυνατότητα αρνητικής διάθλασης στον υπό μελέτη κρύσταλλο εξετάζοντας τη διεύθυνση των κατάλληλων ταχυτήτων κυματικής διάδοσης που παίρνουμε από την ακριβή μορφή των επιφανειών σταθερής συχνότητας που υπολογίζουμε. Όπως φαίνεται από το Σχ. 4.6, η χειρομορφία διαχωρίζει τις συνιστώσες LCP και RCP των εκφυλισμένων εγκάρσιων ιδιοκαταστάσεων, με επακόλουθο σε μια στενή περιοχή συχνοτήτων αμέσως κάτω από το σημείο διασταύρωσης των ζωνών στο κέντρο της $1^{ης}$ ZB, στη συχνότητα $0.21\omega_p$, η ταχύτητα ομάδας και η ταχύτητα φάσης να έχουν αντίθετο πρόσημο ($k_z \partial\omega/\partial k_z < 0$) για μια συγκεκριμένη πόλωση, κάτι που υποδηλώνει αρνητική διάθλαση. Ο μηχανισμός αυτός για αρνητική διάθλαση λόγω χειρομορφίας είναι γενικός και έχει ήδη αναφερθεί στη βιβλιογραφία [44, 50]. Οι μόνες προϋποθέσεις που απαιτούνται είναι χειρομορφία και παρουσία συντονισμών που δημιουργούν χάσμα. Αξίζει να σημειωθεί ότι οι χαρακτηριστικές διαστάσεις της



Σχήμα 4.8: Η φωτονική δομή ζωνών του Σχ. 4.7 για θετικές τιμές του k_z (αριστερό διάγραμμα) και τα αντίστοιχα φάσματα διεύλευσης ενός πλακιδίου (001) του κρυστάλλου, πάχους τεσσάρων πλεγματικών επιπέδων, για LCP (κόκκινη γραμμή) και RCP (μπλέ γραμμή) προσπίπτον φως (μεσαίο διάγραμμα). Το δεξί διάγραμμα απεικονίζει τα αντίστοιχα φάσματα διέλευσης για την περίπτωση όπου ο μεταλλικός φλοιός περιγράφεται από πειραματικές τιμές της διηλεκτρικής συνάρτησης του αργύρου, η οποία λαμβάνει υπόψη της και απώλειες. Στο ένθετο φαίνεται η μεταβολή της διέλευσης RCP προσπίπτοντος φωτός, συχνότητας $\hbar\omega = 1.8$ eV, μέσω του πλακιδίου, συναρτήσει της γωνίας πρόσπτωσης, θ.

υπό μελέτη δομής, δηλαδή μέγεθος σωματιδίων και αποστάσεις μεταξύ τους, είναι $4-5$ φορές μικρότερες από το μήκος κύματος ($\lambda \approx 30c/\omega_p$). Στο Σχ. 4.9 απεικονίζονται οι καμπύλες σταθερής συχνότητας $\omega(\mathbf{k}) = \sigma\tau\alpha\vartheta\varepsilon\rho\acute{\alpha}$, στο επίπεδο $k_x - k_z$ ($k_y = 0$), στην περιοχή συχνοτήτων που μας ενδιαφέρει, βάση των οποίων μπορούμε να μελετήσουμε τις ιδιότητες διάθλασης του κρυστάλλου όταν έχουμε πρόσπτωση στο επίπεδο $x-z$. Αυτό αντιστοιχεί σε πρόσπτωση στις επιφάνειες $x-y$ και $y-z$, με $k_y = 0$.

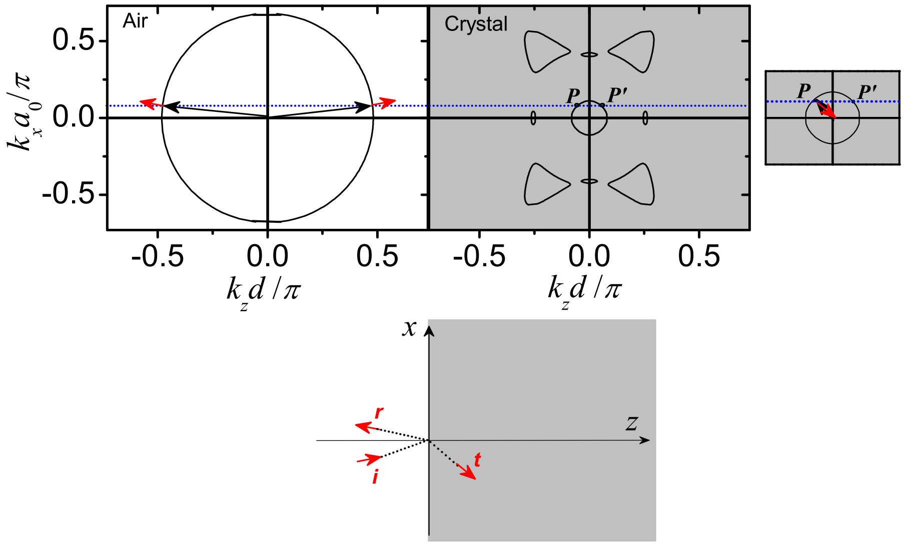
Αν ένα επίπεδο ΗΜ κύμα γωνιακής συχνότητας ω προσπέσει στην επιφάνεια $x-y$ του κρυστάλλου με $\mathbf{q}_{\|} = \mathbf{k}_{\|} = (k_x, 0)$, η παράλληλη στην επιφάνεια συνιστώσα του κυματανύσματος, k_x, διατηρείται και συνεπώς τα σημεία των αντίστοιχων καμπυλών σταθερής συχνότητας με την ίδια συγκεκριμένη τιμή της συντεταγμένης τους k_x προσδιορίζουν όλα τα δυνατά κυματανύσματα για τα διερχόμενα κύματα. Τα διερχόμενα κύματα προσδιορίζονται τελικά από την κατάλληλη διεύθυνση της αντίστοιχης ταχύτητας ομάδας, $\mathbf{v} = \nabla_k\omega(\mathbf{k})$, η οποία εκφράζει τη ροή ενέργειας και πρέπει να κατευθύνεται προς το εσωτερικό του κρυστάλλου λόγω αιτιότητας. Για παράδειγμα, αν ο κρύσταλλος καταλαμβάνει τον ημιχώρο $z > 0$, η υ_z πρέπει να είναι θετική. Με μια προσεκτική ανάλυση του Σχ. 4.10 φαίνεται ότι για φως γωνιακής



Σχήμα 4.9: Καμπύλες σταθερής συχνότητας στο επίπεδο $k_x - k_z$ ($k_y = 0$) για τον υπό μελέτη κρύσταλλο. Το σκιασμένο ορθογώνιο δείχνει την προβολή της $1^{ης}$ ZB σε αυτό το επίπεδο.

συχνότητας $\omega = 0.214\omega_p$ που προσπίπτει από τον αέρα, μπορούμε να έχουμε $k_x \upsilon_x < 0$, δηλαδή αρνητική διάθλαση. Πιο συγκεκριμένα, παίρνουμε μία μόνο διαθλόμενη δέσμη για $0.04 < k_x a_0/\pi < 0.11$, που αντιστοιχεί σε γωνίες πρόσπτωσης από $5°$ έως $13°$. Επιλέγοντας μια συγκεκριμένη τιμή $k_x a_0/\pi = 0.05$, η ευθεία που περιγράφει τη διατήρηση του k_x τέμνει την κατάλληλη καμπύλη σταθερής συχνότητας του κρυστάλλου σε δύο σημεία, P και P'. Το κύμα Bloch που αντιστοιχεί στο σημείο P' διαδίδεται προς τα πίσω σε σχέση με τη διεπιφάνεια και συνεπώς δεν είναι ένα φυσικά αποδεκτό διερχόμενο κύμα. Επομένως παίρνουμε μόνο μία αρνητικά διαθλόμενη δέσμη από το σημείο P, όπως φαίνεται στο Σχ. 4.10. Για μικρότερες γωνίες πρόσπτωσης η ευθεία που περιγράφει τη διατήρηση του k_x τέμνει και τη δεύτερη οικογένεια των καμπυλών σταθερής συχνότητας του κρυστάλλου (σε μεγαλύτερες τιμές του k_z) και έτσι μπορούμε να έχουμε επιπλέον θετικά και αρνητικά διαθλόμενες δέσμες. Για μεγαλύτερες γωνίες πρόσπτωσης, διεγείρονται επίσης ταυτόχρονα θετικά και αρνητικά διαθλόμενες δέσμες.

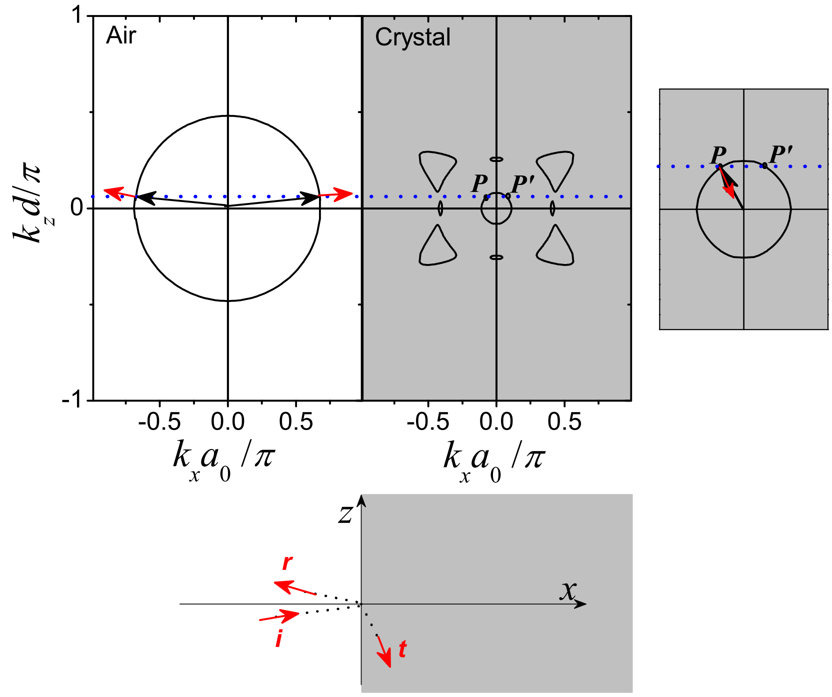
Αν θεωρήσουμε πρόσπτωση στο επίπεδο $y - z$ του κρυστάλλου με $\mathbf{q}_\parallel = \mathbf{k}_\parallel = (0, k_z)$, τότε η παράλληλη συνιστώσα του κυματανύσματος που διατηρείται είναι η k_z, και συνεπώς



Σχήμα 4.10: Ανάλυση της διάθλασης φωτός συχνότητας $\omega = 0.214\omega_p$, το οποίο προσπίπτει από τον αέρα στο επίπεδο $x - y$ του υπό μελέτη κρυστάλλου με $k_y = 0$, με τη βοήθεια των καμπυλών σταθερής συχνότητας. Τα κυματανύσματα και οι ταχύτητες ομάδος των προσπιπτόντων (i), ανακλωμένων (r), και διερχομένων (t) κυμάτων δίνονται από μακριά (μαύρα) και κοντά (κόκκινα) βέλη, αντίστοιχα. Στο περιθώριο φαίνεται μια μεγέθυνση του κυματανύσματος διάδοσης και της ταχύτητας ομάδας. Η οριζόντια εστιγμένη γραμμή στα πάνω διαγράμματα παρέχει τη συνθήκη διατήρησης της παράλληλης συνιστώσας του κυματανύσματος στη διαδικασία σκέδασης. Στο κάτω διάγραμμα απεικονίζεται, σε πραγματικό χώρο, το φαινόμενο της αρνητικής διάθλασης.

μπορούμε να έχουμε $k_z v_z < 0$, δηλαδή αρνητική διάθλαση, όπως φαίνεται και στο Σχ. 4.11 για φως γωνιακής συχνότητας $\omega = 0.214\omega_p$ που προσπίπτει από τον αέρα. Σε αυτή την περίπτωση έχουμε μία μόνο αρνητικά διαθλόμενη δέσμη για $0.037 < k_z d/\pi < 0.086$, που αντιστοιχεί σε ένα πολύ μικρό εύρος γωνιών πρόσπτωσης από $3°$ έως $7°$. Εάν επιλέξουμε μία συγκεκριμένη τιμή $k_z d/\pi = 0.05$, η ευθεία που περιγράφει τη διατήρηση του k_z τέμνει την κατάλληλη καμπύλη σταθερής συχνότητας του κρυστάλλου σε δύο σημεία, P και P'. Το κύμα Bloch που αντιστοιχεί στο σημείο P' διαδίδεται προς τα πίσω σε σχέση με τη διεπιφάνεια και συνεπώς δεν είναι ένα φυσικά αποδεκτό διερχόμενο κύμα. Επομένως παίρνουμε μόνο μία αρνητικά διαθλόμενη δέσμη από το σημείο P, όπως φαίνεται στο Σχ. 4.11. Αξίζει να σημειωθεί ότι, για μικρότερες γωνίες πρόσπτωσης η ευθεία που περιγράφει τη διατήρηση του k_z τέμνει και τους δεύτερους κλάδους των καμπυλών σταθερής συχνότητας του κρυστάλλου (σε μεγαλύτερες τιμές του k_x) και έτσι έχουμε επιπλέον μία θετικά διαθλόμενη δέσμη. Για μεγαλύτερες γωνίες πρόσπτωσης, έχουμε πάντα κανονική (θετική) διάθλαση.

Ενόψει των αυστηρών διαστημάτων στις γωνίες πρόσπτωσης για τις οποίες έχουμε μία μόνο αρνητικά διαθλόμενη δέσμη, θα πρέπει να τονιστεί ότι η εμφάνιση του φαινομένου της αρνητικής διάθλασης δεν μπορεί να συναχθεί απλά και μόνο από την ύπαρξη μιας ζώνης



Σχήμα 4.11: Ανάλυση της διάθλασης φωτός συχνότητας $\omega = 0.214\omega_p$ το οποίο προσπίπτει από τον αέρα στο επίπεδο $y - z$ του υπό μελέτη κρυστάλλου με $k_y = 0$, με τη βοήθεια των καμπυλών σταθερής συχνότητας. Τα κυματανύσματα και οι ταχύτητες ομάδας των προσπιπτόντων (i), ανακλωμένων (r), και διερχομένων (t) κυμάτων δίνονται από μακριά (μαύρα) και κοντά (κόκκινα) βέλη, αντίστοιχα. Στο περιθώριο φαίνεται μια μεγέθυνση του κυματανύσματος διάδοσης και της ταχύτητας ομάδας. Η οριζόντια εστιγμένη γραμμή στα πάνω διαγράμματα παρέχει τη συνθήκη διατήρησης της παράλληλης συνιστώσας του κυματανύσματος στη διαδικασία σκέδασης. Στο κάτω διάγραμμα απεικονίζεται, σε πραγματικό χώρο, το φαινόμενο της αρνητικής διάθλασης.

με αρνητική κλίση και ενός βαθμωτού δείκτη διάθλασης για συγκεκριμένη κατάσταση και κατεύθυνση διάδοσης, παρά μόνο μετά από μια ανάλυση που λαμβάνει υπόψη της το πλήρες διάγραμμα ζωνών βασισμένη, π.χ., στην ακριβή μορφή των επιφανειών σταθερής συχνότητας.

Κεφάλαιο 5

Ελικοειδείς αρχιτεκτονικές μεταλλικών νανοκυλίνδρων

Το γεγονός ότι η χειρόμορφη διάταξη στοιχειωδών μονάδων μιας δομής (δομική χειρομορφία) ή η εγγενής χειρόμορφη δομή των ιδίων των μορίων μιας ουσίας (μοριακή χειρομορφία) ευθύνεται για την παρατηρούμενη οπτική ενεργότητα ορισμένων υλικών [61] αποτέλεσε από παλιά το κίνητρο για μελέτες ανάλογων φαινομένων σε μακροσκοπικά σώματα με ελικοειδή συμμετρία στην περιοχή των μικροκυμάτων [62–65]. Σε μικροσκοπικό επίπεδο, τα φυσικά χειρόμορφα μόρια όπως πρωτεΐνες και DNA εκδηλώνουν σημαντική οπτική ενεργότητα στο υπέρυθρο και υπεριώδες λόγω των ηλεκτρονικών και ταλαντωτικών διεγέρσεων της δομής τους [66]. Επίσης, χοληστερικοί υγροί κρύσταλλοι εμφανίζουν ισχυρό κυκλικό διχρωισμό και ιδιάζουσα διασπορά της στροφικής ικανότητας λόγω ισχυρής ανάκλασης Bragg μόνο για κυκλικά πολωμένο φως της ίδιας φοράς όπως η φυσική δομή του χειρόμορφου μέσου [67]. Το φαινόμενο αυτό υπόσχεται εφαρμογές όπως laser χαμηλού κατωφλίου χωρίς κάτοπτρα, εκπομπή κυκλικά πολωμένης ακτινοβολίας [68], και συμπαγείς οπτικές διόδους λεπτού υμενίου [69].

Πιο πρόσφατα, στο πλαίσιο των φωτονικών κρυστάλλων [70], τρισδιάστατες χειρόμορφες διηλεκτρικές δομές προτάθηκαν αρχικά ως σύνθετα τεχνητά υλικά που εμφανίζουν ισχυρή οπτική ενεργότητα [71, 72]. Στη συνέχεια, βρέθηκε ότι τέτοιες δομές μπορεί να έχουν μεγάλα απόλυτα φωτονικά χάσματα [73, 74] καθώς και χάσματα για μία μόνο κατάσταση κυκλικής πόλωσης [75, 76] με αποτέλεσμα την εμφάνιση ισχυρού κυκλικού διχρωισμού [77–79]. Εξάλλου, έχει δειχθεί ότι χειρόμορφες αρχιτεκτονικές από μεταλλικές δομικές μονάδες μπορούν να εκδηλώσουν τεράστια οπτική ενεργότητα, που υπερβαίνει πολλές τάξεις μεγέθους αυτή των φυσικών υλικών [46, 80–89], ανοίγοντας έτσι νέες προοπτικές στο σχεδιασμό μικροσκοπικών οπτικών διατάξεων, υποπολλαπλάσιων του μήκους κύματος, για εφαρμογές ελέγχου της πόλωσης [90]. Τεχνητές πλασμονικές αρχιτεκτονικές, είτε από χειρόμορφα μεταλλικά στοιχεία [81–83, 85, 87, 91–93] είτε από μη χειρόμορφα μεταλλικά σωματίδια σε χειρόμορφη διάταξη όπως πυραμίδες, τετράεδρα, έλικες, κλπ. [94–98] προσφέρουν μοναδικές δυνατότητες να επιτύχουμε ισχυρά φαινόμενα οπτικής ενεργότητας, που μπορούν να ρυθμιστούν κατά βούληση σε μια ευρεία περιοχή συχνοτήτων από το υπέρυθρο έως το υπεριώδες. Στην περίπτωση συμπλεγμάτων νανοσωματιδίων, τα ισχυρά αυτά φαινόμενα προέρχονται συνήθως από αλληλεπιδράσεις μεταξύ πλασμονίων των νανοσωματιδίων, ενώ συνθέτοντας περιοδικές δομές με τέτοια χειρόμορφα πλασμονικά μεταμόρια [99–101] διευρύνονται οι δυνατότητες που έχουμε για να ρυθμίσουμε την οπτική τους απόκριση. Πιο συγκεκριμένα έχει αναφερθεί ότι έντονος κυκλικός διχρωισμός μέσω σωματιδιακών πλασμονίων εμφανίζεται σε χειρόμορφα συμπλέγματα επιμήκων σωματιδίων σε ελικοειδή διάταξη [97]. Η έρευνα των χειρόμορφων πλασμονικών αρχιτεκτονικών βρίσκεται στο μέτωπο της νανοφωτονικής επίσης λόγω εν δυνάμει εφαρμογών στη βιολογία [102] και τη χημεία [103, 104]. Οι δομές αυτές μπορούν να παρασκευαστούν στο εργαστήριο με σύγχρονες μεθόδους όπως λιθογραφία [81–83, 85, 87, 91–93, 99–101], μοριακή αυτοοργάνωση [105, 106] και σύνθεση κατευθυνόμενη από DNA ή πεπτίδια [107–109], ενώ πρόσφατα εφαρμόστηκαν και μέθοδοι 'DNA origami' για προγραμματιζόμενο σχεδιασμό ελικοειδών συγκροτημάτων μεταλλικών νανοσωματιδίων με ακρίβεια νανομέτρου [110, 111].

Χειρόμορφες μεταλλοδιηλεκτρικές αρχιτεκτονικές προσελκύουν αυξανόμενο ενδιαφέρον σε σχέση επίσης με τα μεταϋλικά αρνητικού δείκτη διάθλασης [42–45, 47–50, 101, 112–118]. Στις περισσότερες από τις σχετικές μελέτες, τεχνητές γυροτροπικές δομές υλοποιούνται με ένα ή δύο στρώματα χειρόμορφων στοιχείων συντονισμού, και οι εξωτικές οπτικές τους ιδιότητες ερμηνεύονται μέσω αριθμητικών υπολογισμών υποθέτοντας ότι ισχύει η θεωρία ενεργού μέσου και εξάγοντας ισοδύναμες ΗΜ παραμέτρους από φάσματα ανάκλασης και διέλευσης, συνήθως για κάθετη πρόσπτωση. Οι δομές αυτές όμως είναι ισχυρά ανισοτροπικές και η οπτική τους απόκριση δεν μπορεί πάντα να περιγραφεί με τοπικές ισοδύναμες ΗΜ παραμέτρους [119]. Επίσης, ακόμα και αν αποδοθούν ισοδύναμες ΗΜ παράμετροι για συγκεκριμένο κύμα, όπως ένας βαθμωτός δείκτης διάθλασης για συγκεκριμένη κατάσταση και κατεύθυνση διάδοσης, μπορεί να υπάρχουν προβλήματα, ειδικά στο όριο ισχυρής σύζευξης [120]. Οι ιδιότητες διάθλασης του μέσου δεν μπορούν να περιγραφούν από το δείκτη διάθλασης και συνεπώς είναι αναγκαίο να δειχθεί απευθείας η αρνητική διάθλαση σε τέτοια χειρόμορφα μεταϋλικά.

5.1 Σχηματισμός υβριδικών πλασμονικών καταστάσεων

Θεωρούμε μια δομή από επίπεδα μεταλλικών νανοκυλίνδρων μήκους L, με κυκλική διατομή διαμέτρου D, αναπτυγμένη κατά τη διεύθυνση z. Σε κάθε επίπεδο, οι κύλινδροι έχουν τα κέντρα τους στα σημεία ενός τετραγωνικού πλέγματος, πλεγματικής σταθεράς a, με τους άξονές τους ευθυγραμμισμένους σε διεύθυνση κάθετη στον άξονα z. Οι νανοκύλινδροι διαδοχικών επιπέδων σχηματίζουν μεταξύ τους γωνία φ ($\varphi = \pi/2,\ \pi/3,\ \pi/4$) και απέχουν απόσταση h, ίση με το ένα δέκατο της διαμέτρου τους, όπως φαίνεται στο Σχ. 5.1. Επομένως, η περίοδος d της δομής κατά μήκος του άξονα z συμπεριλαμβάνει $N = \pi/\varphi$ επίπεδα και $d = 1.1ND$. Στη συνέχεια θα θεωρήσουμε ότι το μεταλλικό υλικό περιγράφεται από τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude της Εξ. (4.1) και ότι $D = c/\omega_p$, $L = 2.5c/\omega_p$, και $a = 7.5c/\omega_p$. Σημειώνεται ότι, αν θεωρήσουμε $\hbar\omega_p \cong 10$ eV, η διάμετρος των νανοκυλίνδρων, D, αντιστοιχεί σε περίπου 20 nm και το μήκος τους, L, σε περίπου 50 nm.

Η φύση των ιδιοκαταστάσεων του ΗΜ πεδίου σε τέτοιες δομές μπορεί να γίνει καλύτερα κατανοητή εάν κάνει κανείς αναφορά στις κατάλληλες υβριδικές πλασμονικές καταστάσεις της δομικής μονάδας βάσης των στραμμένων νανοκυλίνδρων. Ο μηχανισμός δημιουργίας αυτών των καταστάσεων μπορεί να εξηγηθεί με ένα απλό μοντέλο αλληλεπιδρώντων σημειακών διπόλων, ως εξής. Η οπτική απόκριση ενός μεταλλικού νανοκυλίνδρου χαρακτηρίζεται από έναν κυρίαρχο συντονισμό που προέρχεται από τη διέγερση της θεμελιώδους πλασμονικής κατάστασης, κυρίως διπολικού χαρακτήρα, η οποία σχετίζεται με ταλαντώσεις του ηλεκτρονικού νέφους κατά μήκος του άξονα του νανοκυλίνδρου (διαμήκης κατάσταση). Στην ιδιοσυχνότητα της διαμήκους, διπολικής πλασμονικής αυτής κατάστασης, ο μεταλλικός νανοκύλινδρος μπορεί να εξομοιωθεί σε ένα σημειακό δίπολο που ταλαντώνεται κατά μήκος του άξονά του. Ξέρουμε ότι το ηλεκτρικό πεδίο στο σημείο $\mathbf{r} = r\hat{\mathbf{r}}$ από ένα σημειακό δίπολο $\mathbf{p}$ που ταλαντώνεται με συχνότητα ω, εάν θεωρήσουμε χρονική εξάρτηση $\exp(-i\omega t)$, είναι [1]

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \left[\left(1 - \frac{i\omega r}{c}\right)\frac{(\widehat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{p})\widehat{\mathbf{r}} - \mathbf{p}}{r^3} + \frac{\omega^2}{c^2}\frac{\mathbf{p} - (\widehat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{p})\widehat{\mathbf{r}}}{r}\right]\exp(i\omega r/c)\ . \tag{5.1}$$

Συνεπώς, για μια συλλογή από N δίπολα $\mathbf{p}_j$ στα σημεία $\mathbf{R}_j = (0, 0, z_j)$, $j = 1, \ldots, N$, που ταλαντώνονται κάθετα στον άξονα z, το ηλεκτρικό πεδίο στο i-οστό δίπολο, που δημιουργείται από όλα τα άλλα δίπολα, δίνεται από τη σχέση

$$\mathbf{E}_i = \sum_{\substack{j \\ j\neq i}} f(\omega, |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|)\mathbf{p}_j\ , \tag{5.2}$$

όπου

$$f(\omega, R) = -\frac{1}{R^3}\left[1 - \frac{i\omega R}{c} - \frac{\omega^2 R^2}{c^2}\right]\exp(i\omega R/c). \tag{5.3}$$

Η διπολική ροπή κατά τον άξονα του κυλίνδρου δίνεται από το γινόμενο του διαμήκους στοιχείου του τανυστή ηλεκτρικής πολωσιμότητας του σωματιδίου, $\alpha_{\|}$, και της συνιστώσας του ηλεκτρικού πεδίου κατά τη διεύθυνση αυτή

$$p_i = \alpha_{\|}\mathbf{E}_i \cdot \widehat{\mathbf{p}}_i\ . \tag{5.4}$$

Αν και δεν υπάρχει κλειστή έκφραση για την πολωσιμότητα του κυλίνδρου έχει δειχθεί με αριθμητικούς υπολογισμούς ότι είναι σχεδόν ίδια με αυτήν ενός σφαιροειδούς με τον ίδιο λόγο αξόνων και ίδια διαπερατότητα, δηλαδή [121]

$$\alpha_{\|}(\omega) = \frac{V}{4\pi}\frac{\epsilon_p(\omega) - 1}{1 + L_{\|}[\epsilon_p(\omega) - 1]}\ , \tag{5.5}$$

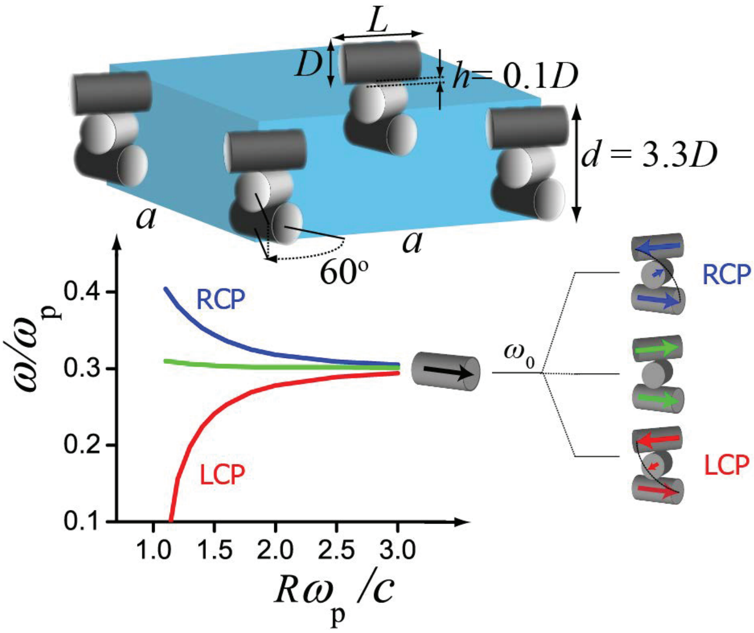
όπου V ο όγκος του σωματιδίου και $L_{\|}$ $(0 < L_{\|} < 1)$ ο διαμήκης παράγοντας αποπόλωσης. Η ιδιοσυχνότητα, ω_0, της διαμήκους πλασμονικής ιδιοκατάστασης του μεμονωμένου κυλίνδρου προσδιορίζεται από τη συνθήκη $\alpha_{\|}^{-1}(\omega_0) = 0$. Για παράδειγμα, αν υποθέσουμε ότι η $\epsilon_p(\omega)$ δίνεται από την Εξ. (4.1), χωρίς απώλειες ($\tau^{-1} = 0$), παίρνουμε $\omega_0 = \sqrt{L_{\|}}\omega_p$. Οι ενεργές διατομές σκέδασης και απορρόφησης ενός μεμονωμένου νανοκυλίνδρου από μέταλλο Drude με $D = c/\omega_p$ και $L = 2.5c/\omega_p$ καθώς επίσης και ενός αντίστοιχου νανοκυλίνδρου από πραγματικό άργυρο ($D = 20$ nm και $L = 50$ nm) χαρακτηρίζονται από έναν ισχυρό συντονισμό στη συχνότητα $\omega_0 = 0.3\omega_p$ ή $\hbar\omega_0 = 2.5$ eV αντίστοιχα, που προέρχεται από τη διέγερση της θεμελιώδους διαμήκους πλασμονικής κατάστασης [122], από όπου συνάγουμε $L_{\|} = 0.09$.

Για τρείς αλληλεπιδρώντες νανοκυλίνδρους, σε απόσταση $R = D + h$ $(= 1.1c/\omega_p)$ μεταξύ τους, και στραμμένους ο ένας ως προς τον άλλον κατά γωνία $\varphi = \pi/3$ όπως φαίνεται στο Σχ. 5.1, από τις Εξ. (5.1) και (5.4), καταλήγουμε σε ένα γραμμικό σύστημα, το οποίο μπορούμε να γράψουμε σε μορφή εξίσωσης ιδιοτιμών ως εξής

$$\begin{pmatrix} 0 & f_1(\omega) & f_2(\omega) \\ f_1(\omega) & 0 & f_1(\omega) \\ f_2(\omega) & f_1(\omega) & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix} = \left[L_{\|} - \left(\frac{\omega}{\omega_p}\right)^2\right]\begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix}\ , \tag{5.6}$$

όπου $f_1(\omega) = \frac{V}{4\pi} f(\omega, R)\cos\varphi$ και $f_2(\omega) = \frac{V}{4\pi} f(\omega, 2R)\cos 2\varphi$. Οι ιδιοτιμές και τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα υπολογίζονται αναλυτικά και είναι $[f_2(\omega) - \sqrt{8f_1^2(\omega) + f_2^2(\omega)}]/2$, $-f_2(\omega)$, $[f_2(\omega) + \sqrt{8f_1^2(\omega) + f_2^2(\omega)}]/2$ και $(1, [-f_2(\omega) - \sqrt{8f_1^2(\omega) + f_2^2(\omega)}]/2f_1(\omega), 1)^T$, $(1, 0, -1)^T$, $(1, [-f_2(\omega) + \sqrt{8f_1^2(\omega) + f_2^2(\omega)}]/2f_1(\omega), 1)^T$, αντίστοιχα. Θέτοντας αυτές τις ιδιοτιμές ίσες με $0.09 - (\omega/\omega_p)^2$, βρίσκουμε τις ιδιοσυχνότητες και τις αντίστοιχες υβριδικές πλασμονικές καταστάσεις του ελικοειδούς μεταμορίου των τριών νανοκυλίνδρων του Σχ. 5.1. Μπορούμε να δούμε ότι λόγω της αλληλεπίδρασης μεταξύ των νανοκυλίνδρων σχηματίζονται τρείς διακριτές υβριδικές καταστάσεις: Μία με χαρακτήρα LCP, μία με RCP και μία χωρίς συγκεκριμένο χαρακτήρα κυκλικής πόλωσης. Σημειωτέον ότι αυτές οι καταστάσεις έχουν πεπερασμένο χρόνο ζωής λόγω απωλειών ακτινοβολίας.

Παρομοίως, για τέσσερεις αλληλεπιδρώντες νανοκυλίνδρους στραμμένους ο ένας ως προς τον άλλο κατά γωνία $\varphi = \pi/4$, βρίσκουμε τέσσερις υβριδικές καταστάσεις: Μία χαρακτήρα LCP, μία RCP και δύο χωρίς συγκεκριμένο χαρακτήρα κυκλικής πόλωσης, ενώ για ένα ζεύγος νανοκυλίνδρων στραμμένους ο ένας ως προς τον άλλο κατά γωνία $\varphi = \pi/2$, καμιά από τις δύο καταστάσεις που σχηματίζονται δεν έχει συγκεκριμένο χαρακτήρα κυκλικής πόλωσης.



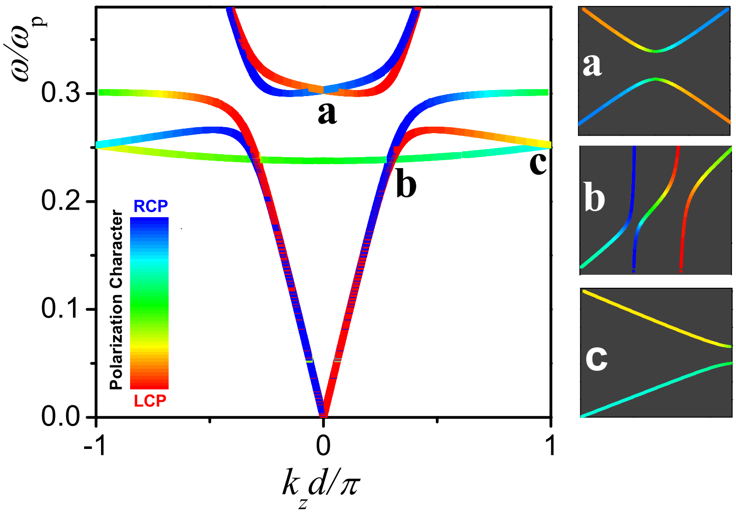
Σχήμα 5.1: Μοναδιαία κυψελίδα τετραγωνικής δομής με βάση τριών μεταλλικών νανοκυλίνδρων στραμμένων ο ένας ως προς τον άλλο και σχηματική εικόνα του σχηματισμού υβριδικών πλασμονικών καταστάσεων στο ελικοειδές αυτό μεταμόριο από τους τρεις νανοκυλίνδρους. Το κάτω αριστερά διάγραμμα δείχνει τη μεταβολή στις ιδιοσυχνότητες αυτών των καταστάσεων συναρτήσει της απόστασης μεταξύ των σωματιδίων, όπως υπολογίζονται από το μοντέλο σημειακών διπόλων που περιγράφουμε στο κείμενο. Το φανταστικό μέρος των ιδιοσυχνοτήτων υπολογίζεται ότι είναι της τάξης του $10^{-3}\omega_p$.

5.2 Φωτονική δομή ζωνών και φάσματα διέλευσης

Θα υπολογίσουμε τώρα τη φωτονική δομή ζωνών μιας στρωματικής περιοδικής δομής τριών στραμμένων νανοκυλίνδρων, όπως αυτή του Σχ. 5.1, υποθέτοντας ότι το μεταλλικό υλικό περιγράφεται από τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude, Εξ. (4.1), αγνοώντας τις απώλειες ($\tau^{-1} = 0$). Ο κρύσταλλος αυτός δεν έχει προφανώς συμμετρία αντιστροφής χώρου λόγω της ελικοειδούς διάταξης των νανοκυλίνδρων και έτσι η σημειακή ομάδα συμμετρίας που τον περιγράφει είναι η D_2, που περιλαμβάνει μόνο αμιγείς στροφές, και όχι η D_{2h} που θα είχαμε αν οι νανοκύλινδροι ήταν ευθυγραμμισμένοι. Παίρνοντας $l_{max} = 8$, $g_{max} = 69$ και υπολογίζοντας τον πίνακα σκέδασης T των μεμονωμένων κυλίνδρων με $l_{cut} = 15$ και μια μέθοδο ολοκλήρωσης Gauss με 1024 σημεία έχουμε πολύ καλή σύγκλιση στα αποτελέσματά μας με τη μέθοδο στρωματικής πολλαπλής σκέδασης.

Το Σχ. 5.2 απεικονίζει τη φωτονική δομή ζωνών αυτού του κρυστάλλου κατά τη διεύθυνση [001]. Κατά τη διεύθυνση αυτή οι ζώνες είναι μη εκφυλισμένες και έχουν τη συμμετρία των μη αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων (A, B) της ομάδας C_2 που είναι υποομάδα της D_2, δηλαδή οι αντίστοιχες ιδιοκαταστάσεις είναι άρτιες (A) ή περιττές (B) σε στροφή κατά $180°$ περί τον άξονα z. Μόνο η συμμετρία των ζωνών B είναι συμβατή με αυτή ενός ΗΜ κύματος που προσπίπτει κάθετα στην επιφάνεια (001) του κρυστάλλου επιτρέποντας έτσι τη διέλευση. Οι ζώνες A (τέτοιες ζώνες δεν υπάρχουν στην περιοχή συχνοτήτων που θεωρούμε αλλά εμφανίζονται σε υψηλότερες συχνότητες) δεν μπορούν να διεγερθούν από εξωτερικά προσπίπτον κύμα διότι δεν έχουν την κατάλληλη συμμετρία. Αντιστοιχούν σε δέσμιες καταστάσεις του ΗΜ πεδίου σε ένα πεπερασμένο πλακίδιο κομμένο παράλληλα στις επιφάνειες (001) του κρυστάλλου, που φθίνουν εκθετικά στον περιβάλλοντα χώρο. Σημειώνεται ότι η συμμετρία C_2 δεν επιτρέπει την ύπαρξη ιδιοκαταστάσεων αμιγώς LCP και RCP χαρακτήρα, όπως π.χ. στην περίπτωση που υπάρχει άξονας συμμετρίας τέταρτης τάξης (C_4). Στο παράδειγμα που εξετάζουμε, η κάθε οπτικά ενεργή ζώνη (B) έχει ένα μίγμα χαρακτήρα LCP και RCP σε διαφορετικό βαθμό που μεταβάλλεται κατά μήκος της όπως δείχνουμε στο Σχ. 5.2. Εφόσον όμως όλες οι ζώνες στο διάγραμμα διασποράς του Σχ. 5.2 έχουν την ίδια συμμετρία (B) με όρους θεωρίας ομάδων, πάντοτε υπάρχει αλληλεπίδραση μεταξύ των ζωνών στα σημεία τομής τους που αίρει τον εκφυλισμό σε μικρό ή μεγάλο βαθμό ανάλογα με τη μορφή των αντίστοιχων κυματοσυναρτήσεων.

Μια προσεκτική ανάλυση του διαγράμματος διασποράς του Σχ. 5.2 δείχνει την ύπαρξη (α) δύο εκτεταμένων ζωνών, μία κυρίαρχου χαρακτήρα LCP και μία RCP, που περιγράφουν διάδοση σε ένα ενεργό μέσο και (β) τριών στενών ζωνών, δηλαδή όσες και ο αριθμός των νανοκυλίνδρων στη μοναδιαία κυψελίδα, που προέρχονται από τις θεμελιώδεις διαμήκεις διπολικές πλασμονικές καταστάσεις των νανοκυλίνδρων στη συχνότητα $0.30\omega_p$. Η χαμηλότερη από αυτές, περί τη συχνότητα $0.25\omega_p$, έχει ένα μικτό χαρακτήρα LCP-RCP και αλληλεπιδρά ασθενώς με τις άλλες ζώνες, δίνοντας πολύ μικρά χάσματα υβριδισμού περί τα σημεία τομής, που είναι δυσδιάκριτα στο σχήμα [βλ. ένθετα (b) και (c) στο Σχ. 5.2]. Οι άλλες δύο στενές ζώνες, μία με κυρίαρχο χαρακτήρα LCP και μία με RCP, που εκτείνονται από $0.25\omega_p$ έως $0.30\omega_p$, αλληλεπιδρούν ισχυρά με τις αντίστοιχες ζώνες ενεργού μέσου δημιουργώντας σημαντικά χάσματα υβριδισμού για συγκεκριμένη πόλωση. Λόγω της (ασθενούς) αλληλεπίδρασης μεταξύ αυτών των δύο στενών ζωνών στο κέντρο της $1^{ης}$ ΖΒ αντιστρέφεται ο κυρίαρχος χαρακτήρας της πόλωσης των καμπυλών διασποράς που προκύπτουν περί το $k_z = 0$ με απότομο

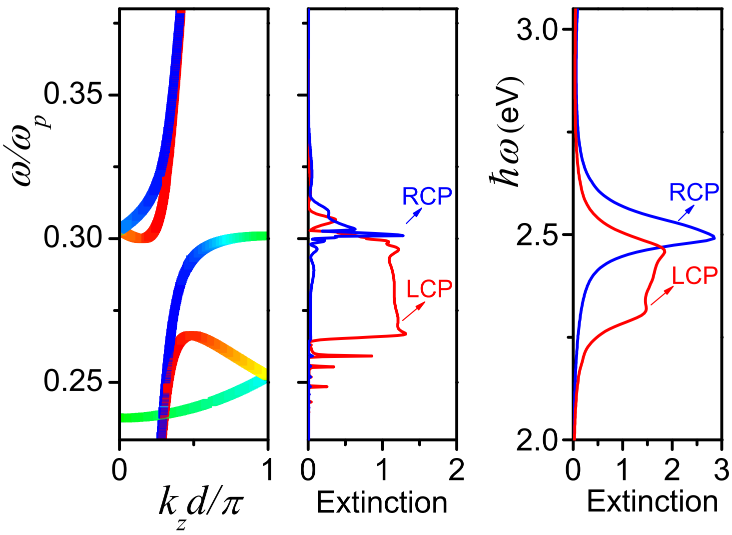


Σχήμα 5.2: Φωτονική δομή ζωνών του κρυστάλλου του Σχ. 5.1 κατά τη διεύθυνση [001]. Οι μεταλλικοί νανοκύλινδροι περιγράφονται από τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude χωρίς απώλειες και οι γεωμετρικές παράμετροι της δομής είναι: $D = c/\omega_p$, $L = 2.5c/\omega_p$, και $a = 7.5c/\omega_p$. Στο περιθώριο δείχνουμε μια μεγέθυνση του διαγράμματος διασποράς περί τα σημεία τομής (a, b, c).

αλλά συνεχή τρόπο, όπως δείχνουμε στο αντίστοιχο ένθετο (a) του Σχ. 5.2. Η φωτονική δομή ζωνών του συγκεκριμένου κρυστάλλου είναι παρόμοια με αυτή των δομών μεταλλικών ελίκων που μελέτησαν οι Wu *et al.* [50]. Συνεπώς, η αυστηρή ανάλυση θεωρίας ομάδων που κάναμε εφαρμόζεται σε μια μεγάλη κατηγορία χειρόμορφων μεταϋλικών και ερμηνεύει ιδιάζοντα χαρακτηριστικά των αντίστοιχων διαγραμμάτων διασποράς σε βαθμό που υπερβαίνει υπάρχουσες αναλύσεις.

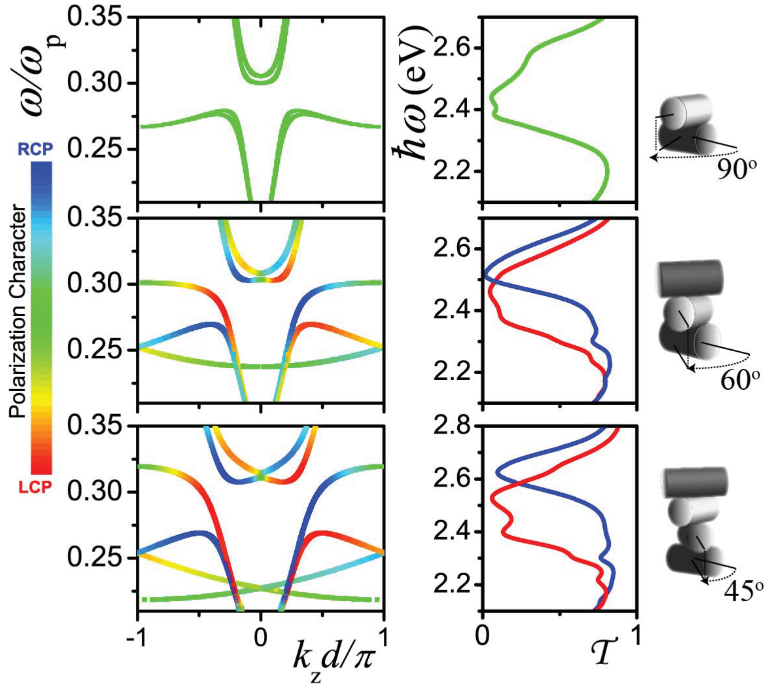
Η πιο πάνω ανάλυση των ιδιοκαταστάσεων είναι συμβατή και με αντίστοιχα φάσματα απόσβεσης πεπερασμένων πλακιδίων του κρυστάλλου. Η απόσβεση ορίζεται ως $-\ln\mathcal{T}$, όπου $\mathcal{T}$ η διελευσιμότητα του πλακιδίου. Καταστάσεις με κυρίαρχο χαρακτήρα κυκλικής πόλωσης και θετική (αρνητική) ταχύτητα ομάδας συζεύγνυνται κυρίως με επίπεδο ΗΜ κύμα της ίδιας πόλωσης, που προσπίπτει κατά τη θετική (αρνητική) κατεύθυνση z σε ένα πλακίδιο (001) του κρυστάλλου. Όπως φαίνεται στο Σχ. 5.3, στην περιοχή ενός χάσματος για καταστάσεις συγκεκριμένης κυκλικής πόλωσης, διέρχονται μόνο προσπίπτοντα κύματα με αντίθετη πόλωση. Τέτοιες περιοχές επιλεκτικής, ως προς την πόλωση, διέλευσης έχουν παρατηρηθεί επίσης σε δομές μεταλλικών ελίκων.

Στο Σχ. 5.4 δείχνουμε τη φωτονική δομή ζωνών τριών διαφορετικών κρυστάλλων με δύο, τρείς και τέσσερεις στραμμένους νανοκυλίνδρους στη μοναδιαία κυψελίδα, για $\mathbf{k}_{\parallel} = (0.25, 0)2\pi/a$. Κατά μια τυχαία διεύθυνση της $1^{\eta\varsigma}$ ΖΒ, όπως η συγκεκριμένη που θεωρούμε, όλες οι ζώνες έχουν τη συμμετρία της ταυτοτικής αναπαράστασης της τετριμμένης ομάδας και συνεπώς δεν έχουν αμιγώς LCP ή RCP χαρακτήρα. Έχουν ένα μικτό χαρακτήρα LCP και RCP που αλλάζει κατά μήκος μιας συγκεκριμένης ζώνης (βλ. μεσαίο και κάτω διάγραμμα του Σχ. 5.4), εκτός από την περίπτωση με $\phi = \pi/2$ (πάνω διάγραμμα του Σχ. 5.4) όπου δεν



Σχήμα 5.3: Η φωτονική δομή ζωνών του Σχ. 5.2 για θετικές τιμές του k_z (αριστερό διάγραμμα) και η απόσβεση φωτός LCP και RCP που προσπίπτει κατά τη θετική κατεύθυνση z σε πεπερασμένο πλακίδιο από 24 επίπεδα (001) νανοκυλίνδρων (μεσαίο διάγραμμα). Στο δεξί διάγραμμα απεικονίζονται τα αντίστοιχα φάσματα απόσβεσης αν οι νανοκύλινδροι περιγράφονται από την πειραματική διηλεκτρική συνάρτηση του αργύρου και οι γεωμετρικές παράμετροι της δομής είναι: $D = 20$ nm, $L = 50$ nm, και $a = 150$ nm.

υπάρχει χειρομορφία και οι ζώνες δεν έχουν κάποιον κυρίαρχο χαρακτήρα κυκλικής πόλωσης. Σημειώνουμε ότι ο χαρακτήρας κυκλικής πόλωσης μιας κατάστασης Bloch, που παριστάνεται με χρωματική διαβάθμιση στα σχετικά σχήματα, προκύπτει αν προβάλουμε το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα στη βάση που ορίζουν οι καταστάσεις LCP και RCP, οι οποίες αντιστοιχούν στα μοναδιαία διανύσματα $\widehat{\mathbf{e}}_L$ και $\widehat{\mathbf{e}}_R$, αντίστοιχα. Σε όλα τα διαγράμματα διασποράς του Σχ. 5.4 υπάρχουν δύο εκτεταμένες ζώνες, για φως δύο εγκάρσιων ορθογώνιων καταστάσεων πόλωσης που διαδίδονται σε ένα ενεργό ομοιογενές υπόβαθρο, και ένας αριθμός σχετικά στενών ζωνών (όσος και ο αριθμός των νανοκυλίνδρων ανά μοναδιαία κυψελίδα), οι οποίες δημιουργούνται από τα αλληλεπιδρώντα μοριακά πλασμονικά τροχιακά που προέρχονται από τις θεμελιώδεις διαμήκεις διπολικές πλασμονικές καταστάσεις των μεμονωμένων νανοκυλίνδρων, όπως περιγράψαμε στο προηγούμενο εδάφιο. Η συμβατότητα συμμετρίας επιτρέπει αλληλεπίδραση στα σημεία διασταύρωσης των ζωνών, η οποία λαμβάνει χώρα πάντοτε σε μικρό ή μεγάλο βαθμό ανάλογα με τη μορφή των αντίστοιχων κυματοσυναρτήσεων και οδηγεί στο άνοιγμα χασμάτων συχνοτήτων. Σε μια χειρόμορφη δομή, οι δύο εκτεταμένες ζώνες ενεργού μέσου και δύο από τις στενές πλασμονικές ζώνες έχουν ένα συγκεκριμένο κυρίαρχο χαρακτήρα κυκλικής πόλωσης, μία LCP και μία RCP. Ο υβριδισμός μεταξύ εκτεταμένων και στενών ζωνών του ιδίου χαρακτήρα οδηγεί σε ισχυρή άπωση των σταθμών και συνεπακόλουθα σε ευρέα χάσματα για συγκεκριμένη πόλωση, όπως φαίνεται στο μεσαίο και στο κάτω διάγραμμα διασποράς του Σχ. 5.4. Όπως δείχνουν τα αντίστοιχα διαγράμματα διέλευσης στο Σχ. 5.4, στην περιοχή



Σχήμα 5.4: Φωτονική δομή ζωνών των κρυστάλλων με βάση δύο (πάνω διάγραμμα), τριών (μεσαίο διάγραμμα), και τεσσάρων (κάτω διάγραμμα) μεταλλικών νανοκυλίνδρων ανά μοναδιαία κυψελίδα, σε ελικοειδή διάταξη, για $\mathbf{k}_{\|} = (0.25, 0)2\pi/a$. Οι μεταλλικοί νανοκύλινδροι περιγράφονται από τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude χωρίς απώλειες και οι γεωμετρικές παράμετροι της δομής είναι: $D = c/\omega_p$, $L = 2.5c/\omega_p$, και $a = 7.5c/\omega_p$. Δίπλα από τα διαγράμματα ζωνών δείχνουμε αντίστοιχα φάσματα διέλευσης πεπερασμένων πλακιδίων από 12 επίπεδα παράλληλα στην επιφάνεια (001), για φως LCP και RCP που προσπίπτει κατά τη θετική κατεύθυνση z αν θεωρήσουμε ότι οι νανοκύλινδροι περιγράφονται από την πειραματική διηλεκτρική συνάρτηση του αργύρου και οι γεωμετρικές παράμετροι της δομής είναι: $D = 20$ nm, $L = 50$ nm, και $a = 150$ nm.

ενός χάσματος για συγκεκριμένη κυκλική πόλωση, διέρχονται μόνον προσπίπτοντα κύματα αντίθετης πόλωσης. Φυσικά, στον κρύσταλλο με βάση δύο νανοκυλίνδρων όπου δεν υπάρχει χειρομορφία, τα φάσματα διέλευσης για LCP και RCP προσπίπτον φως είναι τα ίδια. Σε ορολογία παρόμοια με αυτή που εισήγαγαν οι Hodgkinson *et al.* [123] αναφορικά με χειρόμορφες στρωματικές δομές ομοιογενών ανισοτροπικών πλακιδίων, ο κρύσταλλος αυτός κατατάσσεται στην κατηγορία των ισοχειρόμορφων στρωματικών δομών ενώ οι κρύσταλλοι με βάση τριών και τεσσάρων νανοκυλίνδρων κατατάσσονται στις αμφοχειρόμορφες στρωματικές δομές. Αξίζει να σημειωθεί ότι η θέση των φασματικών χασμάτων κυκλικής πόλωσης που συζητάμε προσδιορίζεται από τις εντοπισμένες πλασμονικές καταστάσεις και έτσι μπορεί να ρυθμιστεί εύκολα αλλάζοντας το μήκος των κυλίνδρων, αντίθετα με τα χάσματα κυκλικής πόλωσης Bragg, για παράδειγμα σε χοληστερικούς υγρούς κρυστάλλους ή σε ανάγλυφα χειρόμορφα λεπτά υμένια, τα οποία εμφανίζονται σε μήκη κύματος συμβατά με την πλεγματική σταθερά.

5.3 Οπτική ενεργότητα

Η πόλωση ενός κύματος που διέρχεται από ένα πεπερασμένο πλακίδιο του υπό μελέτη κρυστάλλου μπορεί να βρεθεί απευθείας από τον αντίστοιχο πίνακα διέλευσης. Αξίζει να σημειωθεί ότι, στην περιοχή συχνοτήτων που μας ενδιαφέρει, είμαστε κάτω από το όριο περίθλασης για φως που προσπίπτει στην επιφάνεια (001) αυτών των κρυστάλλων, υπό οποιαδήποτε γωνία, όπως απαιτείται για ένα μεταϋλικό. Επομένως, μόνο το κανάλι περίθλασης μηδενικής τάξης δίνει διαδιδόμενη δέσμη και το πλάτος του διερχόμενου κύματος μπορεί να υπολογιστεί από αυτό του προσπίπτοντος μέσω ενός μιγαδικού πίνακα διέλευσης, t, 2×2 ως εξής

$$[E_{\rm tr}]_{\rm p} = \sum_{\rm p'} t_{\rm pp'} [E_0]_{\rm p'} \ , \tag{5.7}$$

όπου $\rm p(p') = 1, 2$ αναφέρεται στα γραμμικά πολωμένα κύματα με το ηλεκτρικό πεδίο να ταλαντώνεται παράλληλα ή κάθετα στη διεύθυνση του επιπέδου πρόσπτωσης, αντίστοιχα, σύμφωνα με τη βάση επιπέδων κυμάτων της μεθόδου στρωματικής πολλαπλής σκέδασης. Για κάθετη πρόσπτωση στην επιφάνεια (001) του κρυστάλλου, αυτές οι κατευθύνσεις πόλωσης συμπίπτουν με τους άξονες x και y, αντίστοιχα. Μπορεί κανείς να μεταβεί εύκολα από αυτή τη βάση γραμμικά πολωμένων κυμάτων ($\rm p(p') = 1, 2$) στη βάση κυκλικά πολωμένων κυμάτων με το μετασχηματισμό ομοιότητας

$$\begin{pmatrix} t_{LL} & t_{LR} \\ t_{RL} & t_{RR} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{pmatrix} \right]^{-1} . \tag{5.8}$$

όπου $\rm p(p') = L, R$ δηλώνει πόλωση LCP και RCP αντίστοιχα. Ένα προσπίπτον επίπεδο κύμα πλάτους E_0, το οποίο διαδίδεται κατά τη θετική κατεύθυνση του άξονα z, γραμμικά πολωμένο κατά μια γωνία ϕ_0 ως προς τον άξονα $\widehat{\mathbf{e}}_1$, μπορεί να αναλυθεί σε κύματα LCP και RCP πλατών $[E_0]_L = E_0 \exp(-i\phi_0)/\sqrt{2}$ και $[E_0]_R = E_0 \exp(i\phi_0)/\sqrt{2}$, αντίστοιχα. Τα αντίστοιχα διαδιδόμενα πεδία έχουν πλάτη

$$[E_{\rm tr}]_L = \frac{E_0}{\sqrt{2}} [t_{LL} \exp(-i\phi_0) + t_{LR} \exp(i\phi_0)] \tag{5.9}$$

$$[E_{\rm tr}]_R = \frac{E_0}{\sqrt{2}} [t_{RL} \exp(-i\phi_0) + t_{RR} \exp(i\phi_0)] \ , \tag{5.10}$$

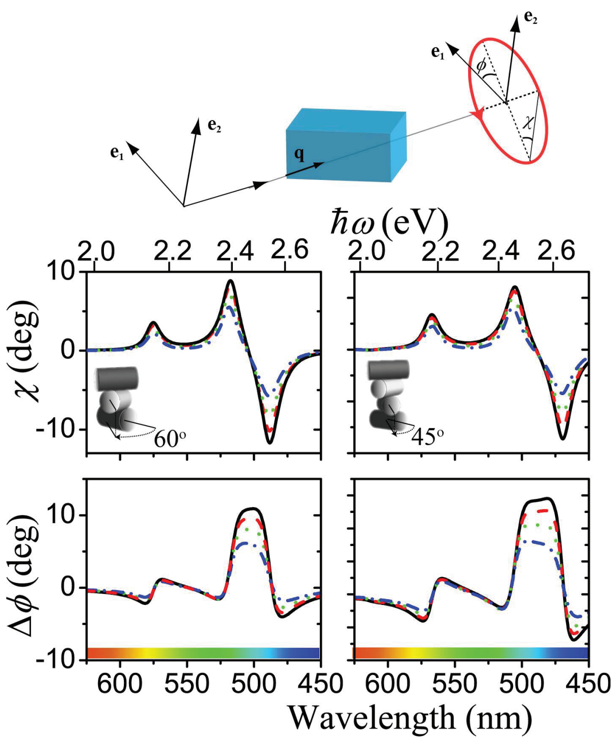
τα οποία αντιστοιχούν, εν γένει, σε ελλειπτικά πολωμένο κύμα με το μεγάλο άξονα της έλλειψης να σχηματίζει γωνία

$$\phi = \frac{1}{2} \Big(\arg[E_{\rm tr}]_R - \arg[E_{\rm tr}]_L \Big) \tag{5.11}$$

με τον άξονα $\widehat{\mathbf{e}}_1$ και γωνία ελλειπτικότητας

$$\chi = \arctan \frac{|[E_{\rm tr}]_R| - |[E_{\rm tr}]_L|}{|[E_{\rm tr}]_R| + |[E_{\rm tr}]_L|} \ , \tag{5.12}$$

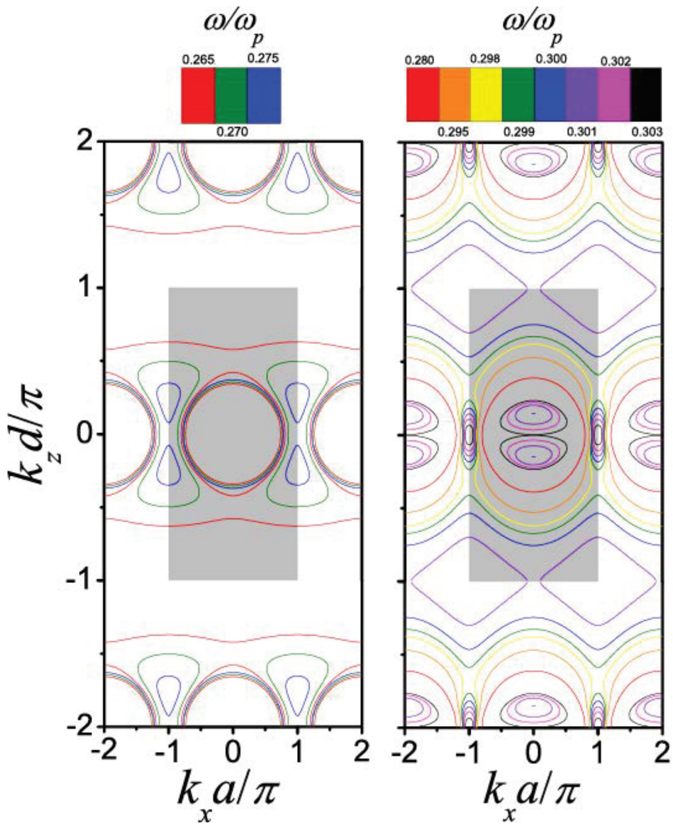
όπως δείχνει το Σχ. 5.5. Υιοθετούμε τη γωνία στροφής του επιπέδου πόλωσης $\Delta\phi = \phi - \phi_0$ ως μέτρο της κυκλικής διπλοθλαστικότητας και τη γωνία ελλειπτικότητας χ ως μέτρο του κυκλικού διχρωισμού.



Σχήμα 5.5: Μεταβολή του μέσου όρου ως προς τις γωνίες πόλωσης της γωνίας ελλειπτικότητας (πάνω διαγράμματα) και της γωνίας στροφής του επιπέδου πόλωσης (κάτω διαγράμματα) ενός κύματος που διέρχεται από ένα μοναδιαίο πλακίδιο (001) των κρυστάλλων με βάση τρεις (αριστερά διαγράμματα) και τέσσερεις (δεξιά διαγράμματα) νανοκυλίνδρους αργύρου για γωνίες πρόσπτωσης: 0° (συνεχής γραμμή), 30° (διακεκομμένη γραμμή), 45° (εστιγμένη γραμμή), 60° (διακεκομμένη-εστιγμένη γραμμή) στο ορατό φάσμα. Οι νανοκύλινδροι περιγράφονται από την πειραματική διηλεκτρική συνάρτηση του αργύρου και οι γεωμετρικές παράμετροι των δομών είναι: $D = 20$ nm, $L = 50$ nm, $a = 150$ nm.

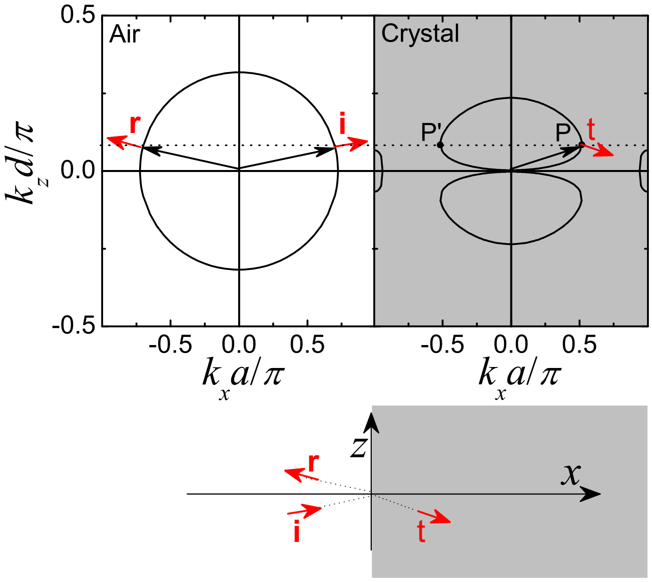
Αξίζει να σημειωθεί ότι εδώ, σε αντίθεση με την περίπτωση που υπάρχει άξονας συμμετρίας τέταρτης τάξης, εμφανίζεται μίξη των πολώσεων αφού τα στοιχεία t_{LR} και t_{RL} είναι μη μηδενικά. Σαν αποτέλεσμα, τα $\Delta\phi$ και χ μεταβάλλονται με τη γωνία πόλωσης, ϕ_0, με ταλαντωτικό τρόπο με περίοδο 180°. Στο Σχ. 5.5, δείχνουμε το μέσο όρο ως προς τις γωνίες πόλωσης της γωνίας ελλειπτικότητας και της γωνίας στροφής του επιπέδου πόλωσης ενός κύματος που διέρχεται από ένα μοναδιαίο πλακίδιο (001) των κρυστάλλων με βάση τρεις και τέσσερεις νανοκυλίνδρους (πάχους τριών και τεσσάρων επιπέδων, αντίστοιχα) για διάφορες γωνίες πρόσπτωσης. Στην πρώτη (δεύτερη) περίπτωση, ο μέσος όρος ως προς τις γωνίες πόλωσης της γωνίας ελλειπτικότητας μηδενίζεται για $\hbar\omega = 2.46$ (2.54) eV, για όλες τις διαφορετικές γωνίες πρόσπτωσης, γεγονός το οποίο υποδηλώνει ένα καθαρό φαινόμενο οπτικής ενεργότητας. Σε αυτή τη συχνότητα, η γωνία στροφής του επιπέδου πόλωσης του διερχόμενου κύματος μειώνεται από 10.8° (14.4°) σε κάθετη πρόσπτωση σε 6° (8°) για πρόσπτωση υπό γωνία 60°. Με όρους στροφικής ικανότητας ανά πάχος υλικού ίσο με ένα μήκος κύματος, η οπτική ενεργότητα των υπό μελέτη μοναδιαίων πλακιδίων μπορεί να φτάσει τις 83° (80°)και είναι κατά πολλές τάξεις μεγέθους μεγαλύτερη από αυτή των φυσικά οπτικά ενεργών υλικών και συγκρίσιμη με άλλες που παρατηρούνται σε άλλα χειρόμορφα μεταϋλικά. Υψηλότερες τιμές οπτικής ενεργότητας μπορούν να επιτευχθούν για πιο πυκνές δομές. Για παράδειγμα, η στροφική ικανότητα διπλασιάζεται εάν η σταθερά πλέγματος a μειωθεί από 150 nm στα 100 nm. Να σημειωθεί επίσης ότι η φασματική απόκριση μπορεί να ρυθμιστεί επιλέγοντας το μήκος του κυλίνδρου έτσι ώστε να μετακινήσουμε κατάλληλα τον πλασμονικό συντονισμό.

5.4 Επιφάνειες σταθερής συχνότητας και αρνητική διάθλαση



Σχήμα 5.6: Καμπύλες σταθερής συχνότητας στο επίπεδο $k_x - k_z$ ($k_y = 0$) για τον κρύσταλλο του Σχ. 5.1. Η οπτική απόκριση των μεταλλικών νανοκυλίνδρων περιγράφεται από τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude, Εξ. (4.1), χωρίς απώλειες ($\tau^{-1} = 0$) και οι γεωμετρικές παράμετροι της δομής είναι $D = c/\omega_p$, $L = 2.5c/\omega_p$, και $a = 7.5c/\omega_p$. Το σκιασμένο ορθογώνιο δείχνει την προβολή της $1^{ης}$ ΖΒ στο επίπεδο αυτό.

Η ιδέα ότι αρνητική διάθλαση και συναφή φαινόμενα θα ήταν πιο εύκολο να εμφανιστούν σε χειρόμορφα μέσα για μια συγκεκριμένη κατάσταση κυκλικής πόλωσης [42–44] πυροδότησε εκτεταμένη έρευνα στο σχεδιασμό τεχνητών χειρόμορφων δομών. Στις περισσότερες από αυτές τις μελέτες, το συμπέρασμα ότι θα μπορούσε να παρατηρηθεί αρνητική διάθλαση εξαγόταν από τον υπολογισμό ενεργών καταστατικών παραμέτρων από φάσματα διέλευσης και ανάκλασης για κάθετη πρόσπτωση σε ένα πεπερασμένο πλακίδιο του μεταϋλικού, πάχους ενός ή δύο επιπέδων [47–49, 101, 114–118]. Ωστόσο, επειδή τέτοιες χειρόμορφες δομές είναι πολύ ανισοτροπικές, μια απευθείας μελέτη του φαινομένου της αρνητικής διάθλασης για φως που προσπίπτει υπό συγκεκριμένη γωνία σε μια επιφάνεια του ημιάπειρου μεταϋλικού θα ήταν πιο ενδεδειγμένη. Στο εδάφιο αυτό δείχνουμε την ύπαρξη αρνητικής διάθλασης στον υπό μελέτη χειρόμορφο κρύσταλλο εξετάζοντας τις κατευθύνσεις των σχετικών ταχύτητων ομάδας, οι οποίες υπολογίζονται από την ακριβή μορφή των επιφανειών σταθερής συχνότητας. Η οπτική απόκριση των μεταλλικών νανοκυλίνδρων περιγράφεται και εδώ από τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude, Εξ. (4.1), αγνοώντας τις απώλειες ($\tau^{-1} = 0$) και οι γεωμετρικές παράμετροι της δομής είναι $D = c/\omega_p$, $L = 2.5c/\omega_p$, και $a = 7.5c/\omega_p$.



Σχήμα 5.7: Ανάλυση του φαινομένου της διάθλασης φωτός συχνότητας $\omega = 0.303\omega_p$, το οποίο προσπίπτει από τον αέρα στην επιφάνεια $y - z$ του κρυστάλλου του Σχ. 5.1 με $\mathbf{k}_{\parallel} = (0, k_z)$, με τις καμπύλες σταθερής συχνότητας. Η οπτική απόκριση των μεταλλικών νανοκυλίνδρων περιγράφεται από τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude, Εξ. (4.1) χωρίς απώλειες ($\tau^{-1} = 0$) και οι γεωμετρικές παράμετροι της δομής είναι $D = c/\omega_p$, $L = 2.5c/\omega_p$, και $a = 7.5c/\omega_p$. Τα κυματανύσματα και οι ταχύτητες ομάδας των προσπιπτόντων (i), ανακλωμένων (r), και διαδιδομένων (t) κυμάτων δίνονται από μακριά (μαύρα) και κοντά (κόκκινα) βέλη, αντίστοιχα. Η οριζόντια εστιγμένη γραμμή στα πάνω διαγράμματα παρέχει τη συνθήκη διατήρησης της παράλληλης συνιστώσας του κυματανύσματος, k_z, στη διαδικασία σκέδασης. Στο κάτω διάγραμμα απεικονίζεται σε πραγματικό χώρο το φαινόμενο της αρνητικής διάθλασης στην περίπτωση που εξετάζουμε.

Το Σχ. 5.6 δείχνει τις καμπύλες σταθερής συχνότητας $\omega(\mathbf{k}) = const.$, στο επίπεδο $k_x - k_z$ ($k_y = 0$), στην περιοχή συχνοτήτων που μας ενδιαφέρει, οι οποίες είναι κατάλληλες για την περιγραφή των διαθλαστικών ιδιοτήτων του κρυστάλλου όταν το επίπεδο πρόσπτωσης είναι το $x-z$. Αυτό αντιστοιχεί σε πρόσπτωση στις κρυσταλλογραφικές επιφάνειες $x-y$ και $y-z$, με $k_y = 0$. Αν ένα επίπεδο ΗΜ κύμα γωνιακής συχνότητας ω προσπέσει στο επίπεδο $x-y$ του κρυστάλλου με $\mathbf{q}_{\|} = \mathbf{k}_{\|} = (k_x, 0)$, η παράλληλη στην επιφάνεια συνιστώσα του κυματανύσματος, k_x, διατηρείται, οπότε τα σημεία της καμπύλης σταθερής συχνότητας με την ίδια τιμή για το k_x δίνουν όλα τα πιθανά διερχόμενα κύματα. Τα πραγματικά όμως διερχόμενα κύματα καθορίζονται από την κατάλληλη κατεύθυνση των αντίστοιχων ταχυτήτων ομάδας, $\mathbf{v} = \nabla_{\mathbf{k}}\omega(\mathbf{k})$, οι οποίες θα πρέπει να δείχνουν προς το εσωτερικό του κρυστάλλου. Για παράδειγμα, αν ο κρύσταλλος καταλαμβάνει τον ημιχώρο $z > 0$, η συνιστώσα v_z πρέπει να είναι θετική. Μια προσεκτική παρατήρηση του Σχ. 5.6 δείχνει ότι, για κάθε τιμή των ω και k_z στη συγκεκριμένη περιοχή συχνοτήτων, οι ταχύτητες ομάδας των διερχομένων κυμάτων είναι τέτοιες ώστε, $v_x k_x > 0$, δηλαδή έχουμε πάντα κανονική (θετική) διάθλαση. Αντιθέτως, εάν θεωρήσουμε πρόσπτωση στην επιφάνεια $y-z$ του κρυστάλλου με $\mathbf{q}_{\|} = \mathbf{k}_{\|} = (0, k_z)$, η διατηρούμενη συνιστώσα του κυματανύσματος παράλληλη στην επιφάνεια είναι η k_z και τότε μπορούμε να έχουμε $v_z k_z < 0$, δηλαδή αρνητική διάθλαση, όπως δείχνουμε στο Σχ. 5.7 για φως γωνιακής συχνότητας $\omega = 0.303\omega_p$ που προσπίπτει από τον αέρα. Στην περίπτωση αυτή εμφανίζεται αρνητική διάθλαση για $k_z d/\pi < 0.1$, δηλαδή για γωνίες πρόσπτωσης μικρότερες από 9°. Θεωρώντας $k_z d/\pi = 0.07$, η ευθεία που δείχνει τη διατήρηση του k_z τέμνει την κατάλληλη καμπύλη σταθερής συχνότητας του κρυστάλλου σε δύο σημεία, P και P'. Το κύμα Bloch που αντιστοιχεί στο σημείο P' είναι οπισθοδιαδιδόμενο ως προς την επιφάνεια και συνεπώς δεν είναι φυσικά αποδεκτό διερχόμενο κύμα. Επομένως παίρνουμε μόνο μία αρνητικά διαθλώμενη δέσμη από το σημείο P, όπως δείχνουμε στο Σχ. 5.7. Η προέλευσή της ανάγεται στην αρνητική κλίση της καμπύλης διασποράς κοντά στο σημείο (a) του Σχ. 5.2 ($v_z k_z < 0$) η οποία διατηρείται και για άλλες τιμές του k_x εκτός από $k_x = 0$. Αξίζει να σημειωθεί ότι, για μικρότερες γωνίες πρόσπτωσης, η ευθεία που δείχνει τη διατήρηση του k_z τέμνει και τους επόμενους κλάδους της συγκεκριμένης καμπύλης σταθερής συχνότητας του κρυστάλλου (σε μεγαλύτερες τιμές του k_x) και έτσι διεγείρεται και μια δεύτερη αρνητικά διαθλώμενη δέσμη.

Κεφάλαιο 6

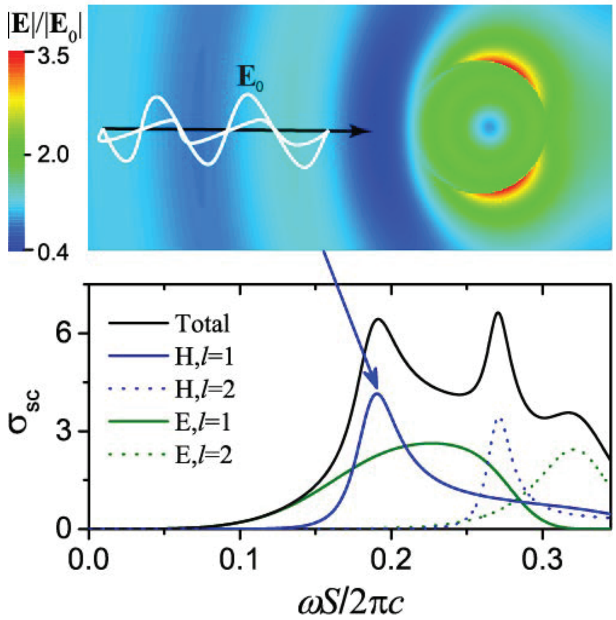
Μαγνητοφωτονικοί κρύσταλλοι

Οι μαγνητοφωτονικοί κρύσταλλοι είναι μακροσκοπικοί κρύσταλλοι που η ΗΜ απόκριση κάποιων δομικών τους μονάδων μεταβάλλεται με ένα στατικό μαγνητικό πεδίο και εκδηλώνουν πολύ ενδιαφέρουσες ιδιότητες. Για παράδειγμα, ισχυρά φαινόμενα Faraday και Kerr, ως αποτέλεσμα του ισχυρού εντοπισμού του πεδίου στο ενεργό μαγνητοοπτικό υλικό, έχουν παρατηρηθεί σε μονοδιάστατες δομές, όπως ένα μαγνητικό υμένιο μεταξύ δύο διηλεκτρικών κατόπτρων Bragg [124] και περιοδικά πολυστρωματικά μαγνητικά/διηλεκτρικά πλακίδια κοντά στις ακμές του φωτονικού τους χάσματος [125, 126]. Κατάλληλοι συνδυασμοί μαγνητικών υλικών και ευγενών μετάλλων σε διάφορες γεωμετρίες, π.χ. πολυστρωματικά υλικά [127–131], νανοσάντουιτς [132–134], σύνθετα σωματίδια από πυρήνα και φλοιό [135–138], και νανοσωματίδια ευγενών μετάλλων συζευγμένα οπτικά με μαγνητικά υμένια ή σωματίδια [139–141], αν και εμφανίζουν απώλειες, μπορούν επίσης να ενισχύσουν τα μαγνητοοπτικά φαινόμενα εξαιτίας των ισχυρών ΗΜ πεδίων που αναπτύσσονται λόγω διέγερσης πλασμονίων στο ευγενές μέταλλο. Εξάλλου, η επίδραση ενός στατικού μαγνητικού πεδίου στη διάδοση φωτός σε μέσα με αταξία και συνεπακόλουθα φαινόμενα, αντίστοιχα αυτών που εκδηλώνονται στη μεταφορά φορτίου υπό την επίδραση μαγνητικού πεδίου, έχουν επίσης μελετηθεί τόσο πειραματικά όσο και θεωρητικά [142].

Η γυροτροπική απόκριση των υλικών, που επάγεται από ένα στατικό ομοιογενές μαγνητικό πεδίο, περιγράφεται από έναν τανυστή ηλεκτρικής επιδεκτικότητας ή/και μαγνητικής διαπερατότητας της μορφής (1.20) και (1.21). Λόγω της απουσίας συμμετρίας αντιστροφής του χρόνου, τοπικά, δηλαδή αν η αντιστροφή εφαρμοστεί μόνο στη διάδοση της ακτινοβολίας και όχι στις πηγές του μαγνητικού πεδίου, τα γυροτροπικά υλικά είναι σημαντικά στη σχεδίαση διατάξεων με μη αντιστρεπτή οπτική απόκριση, που είναι βασικά στοιχεία στις τεχνολογίες οπτικών επικοινωνιών λόγω της ιδιότητάς τους να εξαλείφουν φαινόμενα ανάδρασης. Φασματική μη αντιστρεπτότητα εμφανίζεται εν γένει σε συστήματα που δεν έχουν συμμετρία αντιστροφής χώρου και χρόνου ταυτόχρονα, όπως οι μαγνητοφωτονικές δομές χωρίς κέντρο αντιστροφής, και διάφορες αρχιτεκτονικές έχουν προταθεί και μελετηθεί για το σκοπό αυτό [143–148].

6.1 Κρύσταλλοι μαγνητικών νανοσωματιδίων για ισχυρή στροφή Faraday

Στο εδάφιο αυτό θα δείξουμε πώς, συνδυάζοντας την ισχυρή ένταση του ΗΜ πεδίου που συγκεντρώνεται τοπικά σε νανοσωματίδια μεγάλου δείκτη διάθλασης στις καταστάσεις συν-



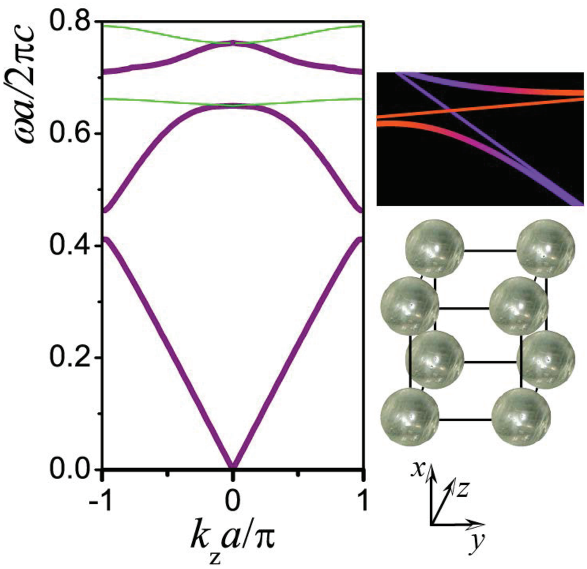
Σχήμα 6.1: Το φάσμα της ενεργού διατομής σκέδασης, κανονικοποιημένης στη γεωμετρική διατομή, και η αντίστοιχη πολυπολική ανάπτυξη, για ένα επίπεδο ΗΜ κύμα που προσπίπτει σε μια σφαίρα μη μαγνητισμένου γρανάτη, ακτίνας S, στον αέρα. Πάνω από το διάγραμμα της ενεργού διατομής σκέδασης απεικονίζεται η κατανομή του σχετικού (ως προς το προσπίπτον επίπεδο κύμα) πλάτους του ηλεκτρικού πεδίου που αντιστοιχεί στη θεμελιώδη διπολική μαγνητική κατάσταση συντονισμού.

τονισμού Mie με την ισχυρή μαγνητοοπτική απόκριση που έχουν οι γρανάτες σε συνδυασμό με χαμηλές απώλειες στην ίδια δομική μονάδα τρισδιάστατου φωτονικού κρυστάλλου, μπορούμε να επιτύχουμε μια τεράστια στροφή του επιπέδου πόλωσης φωτός που διέρχεται από πεπερασμένο πλακίδιο τέτοιου κρυστάλλου, η οποία υπερβαίνει κατά πολύ αυτήν που μπορούμε να επιτύχουμε με άλλες δομές. Στο ορατό και στο υπέρυθρο, η γυροτροπική απόκριση των μαγνητικών υλικών είναι ασθενής και μπορεί να περιγραφεί από σχετική μαγνητική διαπερατότητα $\mu_g = 1$ και ένα διηλεκτρικό τανυστή της μορφής

$$\boldsymbol{\epsilon}_g = \epsilon \begin{pmatrix} 1 & -ig & 0 \\ ig & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{6.1}$$

εάν η μαγνήτιση είναι προσανατολισμένη κατά τον άξονα z. Θα θεωρήσουμε εδώ $\epsilon = 6.25$ και $g = 0.01$, τιμές εφικτές για τους γρανάτες [148–150].

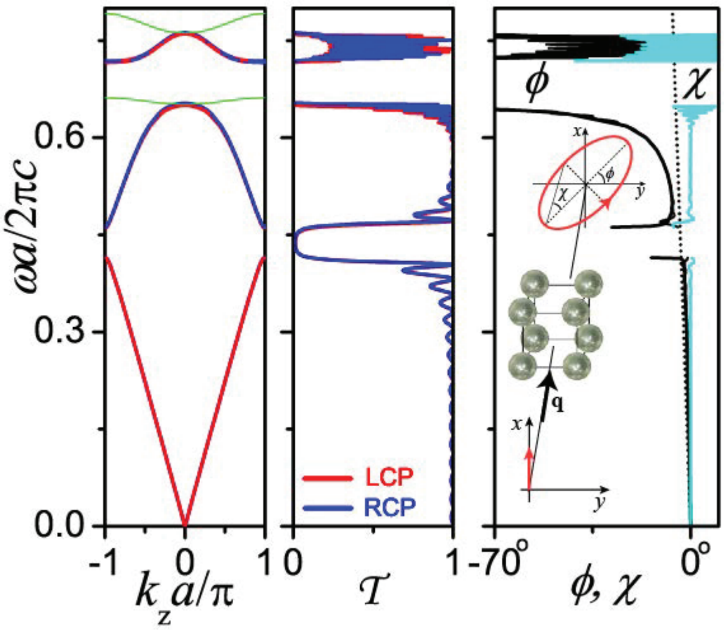
Η οπτική απόκριση μιας σφαίρας μη μαγνητισμένου γρανάτη [$g = 0$ στην Εξ. (6.1)], ακτίνας S, χαρακτηρίζεται από έντονους και φασματικά διαχωρισμένους μαγνητικούς (H) και ηλεκτρικούς (E) πολυπολικούς (2^l-πολικούς, $l = 1, 2, 3, \dots$) συντονισμούς Mie, με αυξημένη ένταση πεδίου στην περιοχή των σφαιρών, όπως φαίνεται στο Σχ. 6.1. Εάν τέτοιες σφαίρες συγκροτήσουν μια αραιή περιοδική δομή, δημιουργούνται στενές φωτονικές ζώνες συλλογικών καταστάσεων Bloch, οι οποίες προέρχονται από τις καταστάσεις συντονισμού των μεμονωμένων σωματιδίων που αλληλεπιδρούν ασθενώς μεταξύ τους. Το πεδίο που αντιστοιχεί σε αυτές τις καταστάσεις διατηρεί έναν ισχυρά εντοπισμένο χαρακτήρα στην περιοχή των σφαιρών. Επιπρόσθετα με τις στενές ζώνες, υπάρχουν φυσικά και οι εκτεταμένες ζώνες των διαδιδόμενων καταστάσεων στο ομοιογενές μέσο. Η αλληλεπίδραση στα σημεία διασταύρωσης στενών και εκτεταμένων ζωνών της ίδιας συμμετρίας οδηγεί στο άνοιγμα χασμάτων συχνοτήτων και στο σχηματισμό υβριδικών ζωνών με έντονο το χαρακτήρα των εντοπισμένων καταστάσεων στα οριζόντια τμήματά τους, κοντά στα όρια και στο κέντρο της $1^{ης}$ ΖΒ. Ένα τέτοιο διάγραμμα ζωνών, κατά τη διεύθυνση [001] ενός απλού κυβικού κρυστάλλου σφαιρών μη μαγνητισμένου γρανάτη με λόγο ακτίνας προς σταθερά πλέγματος $S/a = 0.3$, στον αέρα, όπως το υπολογίσαμε με τη μέθοδο στρωματικής πολλαπλής σκέδασης που αναπτύξαμε σε προηγούμενα κεφάλαια, φαίνεται στο Σχ. 6.2. Κατά την κρυσταλλογραφική διεύθυνση [001], οι ζώνες έχουν τη συμμετρία των μη αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων της σημειακής ομάδας συμμετρίας C_{4v} [151], οπότε είναι είτε μη εκφυλισμένες (A_1, A_2, B_1, B_2) είτε διπλά εκφυλισμένες (E). Αξίζει να σημειωθεί ότι μόνο οι διπλά εκφυλισμένες ζώνες μπορούν να διεγερθούν από φως που προσπίπτει κάθετα σε ένα πεπερασμένο πλακίδιο κομμένο παράλληλα στην επιφάνεια (001) του κρυστάλλου. Οι μη εκφυλισμένες ζώνες είναι οπτικά ανενεργές, επειδή δεν έχουν την



Σχήμα 6.2: Η φωτονική δομή ζωνών ενός απλού κυβικού κρυστάλλου σφαιρών μη μαγνητισμένου γρανάτη, με λόγο ακτίνας προς σταθερά πλέγματος $S/a = 0.3$, στον αέρα, κατά τη διεύθυνση [001]. Οι χοντρές και λεπτές γραμμές δείχνουν τις διπλά εκφυλισμένες και μη εκφυλισμένες ζώνες, αντίστοιχα. Στο περιθώριο φαίνεται σχηματικά ο υβριδισμός μεταξύ εκτεταμένων και στενών ζωνών στην περιοχή των διπολικών μαγνητικών καταστάσεων συντονισμού των μεμονωμένων σφαιρών.

κατάλληλη συμμετρία, και σε ένα πεπερασμένο πλακίδιο (001) του κρυστάλλου αντιστοιχούν σε δέσμιες καταστάσεις του ΗΜ πεδίου οι οποίες φθίνουν εκθετικά στον περιβάλλοντα χώρο.

Εάν οι σφαίρες είναι από γρανάτη μαγνητισμένο κατά τη διεύθυνση z, δηλαδή σε γεωμετρία Faraday [$g = 0.01$ στην Εξ. (6.1)], η συμμετρία είναι χαμηλότερη (C_4) και κάθε διπλά εκφυλισμένη ζώνη (E) του διαγράμματος ζωνών του Σχ. 6.2 διαχωρίζεται σε δύο μη εκφυλισμένες ζώνες, E_1 και E_2. Αυτές οι ζώνες έχουν τη συμμετρία διαδιδόμενων κυμάτων LCP και RCP, αντίστοιχα, και έτσι μπορούν να διεγερθούν από κατάλληλα πολωμένο φως, που προσπίπτει κάθετα σε ένα πεπερασμένο πλακίδιο (001) του κρυστάλλου, όπως φαίνεται στο Σχ. 6.3. Ένα γραμμικά πολωμένο ΗΜ κύμα γωνιακής συχνότητας ω μέσα σε αυτές τις ζώνες,



Σχήμα 6.3: Αριστερό διάγραμμα: Το φωτονικό διάγραμμα ζωνών ενός απλού κυβικού κρυστάλλου σφαιρών μαγνητισμένου γρανάτη, με λόγο ακτίνας προς σταθερά πλέγματος $S/a = 0.3$, στον αέρα, κατά τη διεύθυνση [001], η οποία συμπίπτει με τη διεύθυνση της μαγνήτισης. Μεσαίο διάγραμμα: Αντίστοιχα φάσματα διέλευσης ενός πλακιδίου (001) του κρυστάλλου, πάχους 16 επιπέδων, για LCP και RCP κάθετα προσπίπτον φως. Οι διαφορές μεταξύ συνιστωσών LCP και RCP στα διαγράμματα διασποράς και διέλευσης δεν διακρίνονται στην κλίμακα του σχήματος. Δεξί διάγραμμα: Οι γωνίες ελλειπτικότητας και στροφής Faraday του κύματος που διέρχεται από το συγκεκριμένο πλακίδιο για φως πολωμένο κατά τον άξονα x που προσπίπτει κατά τη διεύθυνση [001] όπως φαίνεται στο ένθετο. Με εστιγμένη γραμμή δείχνουμε την αντίστοιχη γωνία στροφής Faraday σε ένα ομοιογενές πλακίδιο μαγνητισμένου γρανάτη, όγκου ίσου με τον ολικό όγκο των σφαιρών στο συγκεκριμένο πλακίδιο του κρυστάλλου.

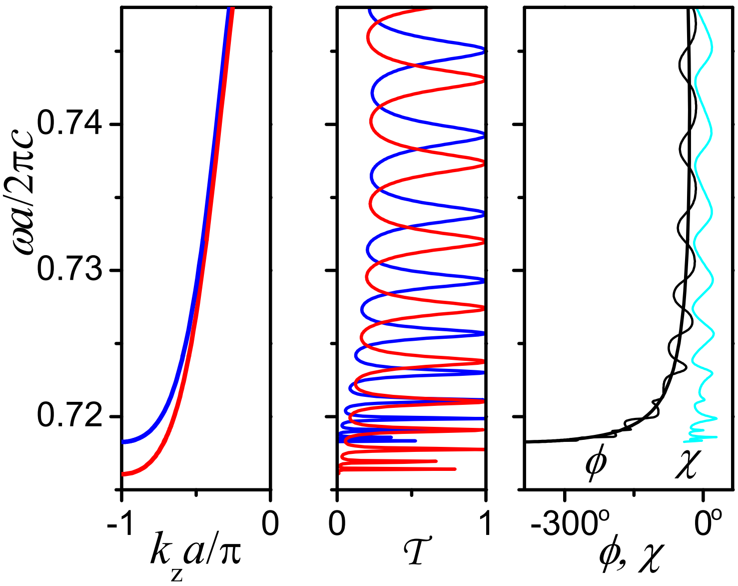
που προσπίπτει κάθετα στο πλακίδιο, διαχωρίζεται σε ένα κύμα LCP και ένα RCP, τα οποία διαδίδονται μέσα στο πλακίδιο με διαφορετικές ταχύτητες φάσης: ω/k_z^L και ω/k_z^R, αντίστοιχα, όπου $k_z^R - k_z^L \equiv \Delta k_z$ είναι η απόσταση μεταξύ των ζωνών σε συγκεκριμένη συχνότητα. Αν οι συνιστώσες LCP και RCP του διερχόμενου κύματος έχουν το ίδιο πλάτος, τότε το κύμα αυτό είναι γραμμικά πολωμένο με διεύθυνση πόλωσης σε γωνία

$$\phi = \frac{1}{2}\Delta k_z D \tag{6.2}$$

ως προς τη διεύθυνση πόλωσης του προσπίπτοντος κύματος, όπου D είναι το πάχος του πλακιδίου. Θετική τιμή της ϕ σημαίνει αριστερόστροφη γωνία. Εν γένει, το διερχόμενο κύμα είναι ελλειπτικά πολωμένο με το μεγάλο άξονα της έλλειψης να σχηματίζει γωνία ϕ, που δίδεται από την Εξ. (5.11), με τη διεύθυνση πόλωσης του προσπίπτοντος κύματος και με γωνία ελλειπτικότητας, χ, που δίδεται από την Εξ. (5.12).

Όπως μπορεί κανείς να δει από το δεξί διάγραμμα του Σχ. 6.3, η γωνία ελλειπτικότητας ταλαντώνεται γύρω από το μηδέν. Να σημειωθεί επίσης ότι γραμμικά πολωμένο διερχόμενο κύμα έχουμε όταν $\chi = 0$. Στο ίδιο διάγραμμα φαίνεται και η φασματική μεταβολή της γωνίας στροφής Faraday, ϕ, υπολογισμένη από τις Εξ. (6.2) και (5.11). Τα αποτελέσματα των δύο εξισώσεων είναι σε πολύ καλή συμφωνία μεταξύ τους, με την καμπύλη που υπολογίστηκε από την Εξ. (5.11) να ταλαντώνεται γύρω από την ομαλή συνάρτηση $\phi(\omega)$ της Εξ. (6.2). Ως γενικός κανόνας, η στροφή Faraday αυξάνεται απότομα καθώς πλησιάζουμε ένα χάσμα και γίνεται πολύ μεγαλύτερη από ότι σε ένα αντίστοιχο ομοιογενές πλακίδιο μαγνητισμένου γρανάτη του ίδιου όγκου με αυτόν των σφαιρών σε συγκεκριμένο πλακίδιο του κρυστάλλου. Αυτό έχει παρατηρηθεί και εξηγηθεί και από άλλους, σε σχέση με μονοδιάστατους μαγνητοφωτονικούς κρυστάλλους που αποτελούνται από μια περιοδική εναλλαγή μαγνητικών και μη μαγνητικών ομοιογενών πλακιδίων [125, 126]. Ωστόσο, στην περίπτωσή μας, το ενδιαφέρον αποτέλεσμα είναι ότι ο διαχωρισμός των ζωνών Δk_z, και η συνακόλουθη στροφή Faraday, μεγαλώνουν πολύ σε οριζόντιες περιοχές ζωνών, οι οποίες αντιστοιχούν σε καταστάσεις που προέρχονται από σωματιδιακούς συντονισμούς και είναι ισχυρά εντοπισμένες στο εσωτερικό των σφαιρών. Συγκεκριμένα, μπορούμε να εστιάσουμε στις οριζόντιες περιοχές ζωνών κάτω από το δεύτερο χάσμα, περίπου στη συχνότητα $\omega a/2\pi c \approx 0.65$ κοντά στο κέντρο της $1^{\eta\varsigma}$ ZB, και πάνω από αυτό το χάσμα, περίπου στη συχνότητα $\omega a/2\pi c \approx 0.72$ κοντά στα όρια της $1^{\eta\varsigma}$ ZB.

Στο Σχ. 6.4, φαίνεται μια μεγέθυνση του Σχ. 6.3 στη δεύτερη περίπτωση, όπου τα φαινόμενα είναι σχετικά πιο ισχυρά. Είναι ενδιαφέρον ότι υπολογίζουμε μια στροφή Faraday περίπου $-300°$ για το συγκεκριμένο πάχος πλακιδίου, η οποία είναι περίπου 50 φορές μεγαλύτερη από αυτή για το αντίστοιχο ομοιογενές πλακίδιο μαγνητισμένου γρανάτη. Η στροφή Faraday που προκαλείται από αυτό το ομοιογενές πλακίδιο αναφοράς μπορεί να υπολογιστεί απλά από την Εξ. (6.2) ως εξής. Σε ένα ομοιογενές γυροτροπικό μέσο που περιγράφεται από σχετική μαγνητική διαπερατότητα μ_g (=1) και διηλεκτρικό τανυστή που δίνεται από την Εξ. (6.1), κατά μήκος της διεύθυνσης z, οι ιδιοκαταστάσεις του ΗΜ πεδίου είναι διαδιδόμενα επίπεδα κύματα RCP και LCP με κυματαριθμούς $k_z^R = \sqrt{\mu_g \epsilon (1-g)}\omega/c$ και $k_z^L = \sqrt{\mu_g \epsilon (1+g)}\omega/c$, αντίστοιχα. Έτσι, σε προσέγγιση πρώτης τάξης, η Εξ. (6.2) δίνει $\phi \approx -\frac{1}{2}\sqrt{\mu_g \epsilon} g D\omega/c$. Για ένα πλακίδιο του κρυστάλλου που αποτελείται από 16 επίπεδα (001), το πάχος του ομοιογενούς πλακιδίου αναφοράς είναι $D = 16af$, όπου $f = \frac{4}{3}\pi(S/a)^3$ το ποσοστό του όγκου που καταλαμβάνουν οι σφαίρες στον κρύσταλλο ($S/a = 0.3$), το οποίο δίνει $\phi = -8.143\omega a/2\pi c$ (σε μοίρες). Επομένως, στη φασματική περιοχή που θεωρούμε, $\omega a/2\pi c$ από 0 έως 0.8, η στροφή

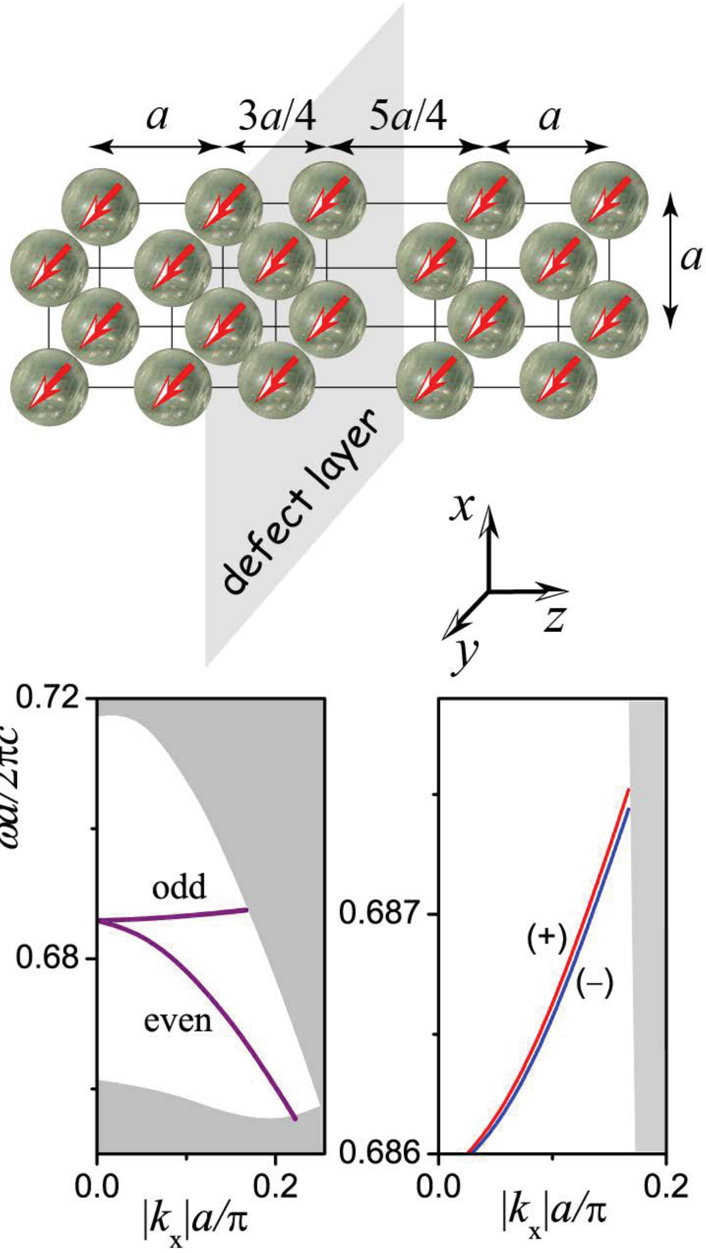


Σχήμα 6.4: Μεγέθυνση του Σχ. 6.3 στην περιοχή συχνοτήτων πάνω από το δεύτερο χάσμα. Η γωνία στροφής Faraday, ϕ, υπολογίστηκε από την Εξ. (6.2) (ομαλή καμπύλη) και την Εξ. (5.11) (ταλαντούμενη καμπύλη).

Faraday που προκαλείται από το ομοιογενές πλακίδιο αναφοράς μεταβάλλεται γραμμικά από $0°$ έως $-6.5°$.

Η απορρόφηση μπορεί να ληφθεί υπόψη εάν προσθέσουμε ένα φανταστικό μέρος στη διηλεκτρική συνάρτηση του γρανάτη. Εάν θέσουμε $\epsilon = 6.25 + i0.001$, που είναι μια λογική τιμή για μαγνητισμένους γρανάτες, τα αποτελέσματα δεν επηρεάζονται αισθητά. Παρόμοια επίσης αποτελέσματα περιμένει κανείς για πιο αραιές δομές άλλων μαγνητικών σωματιδίων, σε περιβάλλον μέσο χαμηλού δείκτη διάθλασης, υπό την προϋπόθεση ότι τα σωματίδια αυτά έχουν μεγάλο δείκτη διάθλασης και χαμηλές απώλειες έτσι ώστε να υποστηρίζουν ισχυρά εντοπισμένους συντονισμούς. Τέλος, αξίζει να σημειωθεί ότι οι πυκνές δομές δεν ευνοούν την ενίσχυση της στροφής Faraday με το μηχανισμό που περιγράψαμε, δηλαδή κύματα διαδιδόμενα μέσω ζωνών καταστάσεων συντονισμού, λόγω του ασθενέστερου πεδίου μέσα στα σωματίδια εξαιτίας της ισχυρότερης αλληλεπίδρασης των καταστάσεων συντονισμού μεταξύ τους.

Στο αριστερό διάγραμμα του Σχ. 6.5 δείχνουμε την προβολή της φωτονικής δομής ζωνών του συγκεκριμένου κρυστάλλου στη διεύθυνση k_x, στην περιοχή του δεύτερου χάσματος συχνοτήτων. Οι γκρίζες περιοχές αντιστοιχούν σε φωτονικές ζώνες, δηλαδή για κάθε συχνότητα εντός μιας γκρίζας περιοχής, για δεδομένη τιμή του k_x, υπάρχει τουλάχιστον μία διαδιδόμενη κατάσταση του ΗΜ πεδίου στον άπειρο κρύσταλλο. Η λευκή περιοχή παριστάνει φωτονικό χάσμα για συγκεκριμένο k_x. Όπως μπορεί κανείς να δει, το φωτονικό χάσμα στενεύει καθώς αυξάνεται το k_x και τελικά κλείνει. Αν ένα πλεγματικό επίπεδο (001) μετατοπιστεί κάθετα προς τα γειτονικά του κατά, π.χ., 25%, δημιουργείται στον κρύσταλλο μια επίπεδη ατέλεια, η οποία εισάγει εντοπισμένες καταστάσεις εντός του φωτονικού χάσματος. Με συνεχείς γραμμές στο Σχ. 6.5 δείχνουμε τις καμπύλες διασποράς τέτοιων ενδοεπιφανειακών καταστάσεων



Σχήμα 6.5: Προβολή, στη διεύθυνση k_x, της φωτονικής δομής ζωνών ενός απλού κυβικού κρυστάλλου από σφαίρες γρανάτη, μαγνητισμένες κατά τον άξονα y, με λόγο ακτίνας προς σταθερά πλέγματος $S/a = 0.3$, στον αέρα. Ο κρύσταλλος αναπτύσσεται κατά τη διεύθυνση [001] και έχει μια επίπεδη ατέλεια: Ένα πλεγματικό επίπεδο (001) είναι μετατοπισμένο κατά 25% κάθετα προς τα γειτονικά του, όπως δείχνει το σχήμα της δομής. Οι γκρίζες και οι λευκές περιοχές στο αριστερό διάγραμμα αντιστοιχούν σε περιοχές ζωνών και χασμάτων, αντίστοιχα. Οι συνεχείς γραμμές σε περιοχές χασμάτων δείχνουν τις ενδοεπιφανειακές καταστάσεις, οι οποίες είναι άρτιες ή περιττές κατά την ανάκλαση ως προς το επίπεδο $x-z$. Στο δεξί διάγραμμα απεικονίζεται μια μεγέθυνση αυτών των καμπυλών διασποράς, για τις περιττές καταστάσεις, με τα πρόσημα (+) και (−) να υποδηλώνουν θετικές και αρνητικές τιμές του k_x, αντίστοιχα.

κατά τη διεύθυνση k_x, αν οι σφαίρες είναι μαγνητισμένες κατά τον άξονα y. Ας σημειωθεί ότι, στην περίπτωση που εξετάζουμε, το στατικό μαγνητικό πεδίο δε διευθύνεται κατά τον άξονα z, που είναι εξ ορισμού η διεύθυνση ανάπτυξης του κρυστάλλου στη μέθοδο στρωματικής πολλαπλής σκέδασης. Επομένως, στους υπολογισμούς, ο πίνακας σκέδασης T πρέπει να μετασχηματιστεί σύμφωνα με την Εξ. (2.24) χρησιμοποιώντας τις κατάλληλες γωνίες Euler $\alpha = 90°$, $\beta = 90°$, $\gamma = 0°$ (βλ. Κεφάλαιο 2). Σημειακή ομάδα συμμετρίας της δομής των μαγνητισμένων σφαιρών που μελετάμε είναι η C_{1h}, η οποία περιλαμβάνει μόνο την ταυτότητα και ανάκλαση ως προς το επίπεδο $x-z$ [151], και οι ιδιοκαταστάσεις διαχωρίζονται σε άρτιες και περιττές κατά την ανάκλαση ως προς το επίπεδο $x-z$. Οι ενδοεπιφανειακές αυτές καταστάσεις εκδηλώνονται ως οξείες κορυφές συντονισμού στο φάσμα διέλευσης πεπερασμένου πλακιδίου του κρυστάλλου με την ατέλεια, για παράδειγμα, ένα πλακίδιο με δύο επίπεδα (001) σφαιρών και από τις δυο πλευρές της ατέλειας (βλ. Σχ. 6.5), για φως πολωμένο κατά τις διευθύνσεις $\widehat{\mathbf{e}}_1$ (στο επίπεδο πρόσπτωσης $x-z$) και $\widehat{\mathbf{e}}_2$ (κάθετα στο επίπεδο πρόσπτωσης $x-z$), αντίστοιχα, που προσπίπτει με κατάλληλη τιμή του k_x. Αν και η φασματική αντιστρεπτότητα κατά τη διεύθυνση k_y, $\omega(-k_y) = \omega(k_y)$, εξασφαλίζεται από την κατοπτρική συμμετρία ως προς το επίπεδο $x-z$, $\omega(-k_x) \neq \omega(k_x)$, (βλ. δεξί διάγραμμα στο Σχ. 6.5) διότι δεν υπάρχει στοιχείο της C_{1h} που μετασχηματίζει το $(k_x, 0, 0)$ στο $(-k_x, 0, 0)$, δεδομένης φυσικά και της απουσίας αντιστροφής χρόνου λόγω μαγνήτισης. Αν οι σφαίρες είναι μαγνητισμένες κατά τη διεύθυνση z, η σημειακή ομάδα συμμετρίας είναι η C_4 [151] και η φασματική αντιστρεπτότητα $\omega(-\mathbf{k}_{\|}) = \omega(\mathbf{k}_{\|})$ εξασφαλίζεται πάντοτε από τη στροφή κατά γωνία π περί τον άξονα z, που είναι στοιχείο της C_4. Επομένως, μη αντιστρεπτότητα των ενδοεπιφανειακών καταστάσεων εμφανίζεται στη γεωμετρία Voigt (Cotton-Mouton) και όχι Faraday[1], για μαγνήτιση παράλληλη στο επίπεδο της ατέλειας.

6.2 Χειρομαγνητικός διχρωισμός ελικοειδών δομών μαγνητικών σωματιδιών

Ένα στατικό μαγνητικό πεδίο παράλληλο στη διεύθυνση διάδοσης μιας προσπίπτουσας δέσμης φωτός μπορεί να προκαλέσει μια μικρή αλλαγή στη διηλεκτρική σταθερά μιας χειρόμορφης δομής ή ουσίας. Η αλλαγή αυτή είναι ανεξάρτητη της πόλωσης του φωτός και αλλάζει πρόσημο είτε αν αντικαταστήσουμε τη χειρόμορφη δομή/ουσία με την κατοπτρική εναντιομερή της είτε αν αντιστρέψουμε τις σχετικές κατευθύνσεις του μαγνητικού πεδίου και της διάδοσης της δέσμης φωτός. Επακόλουθα χειρομαγνητικά ανισοτροπικά φαινόμενα έχουν προβλεφθεί θεωρητικά, στη διάθλαση (διπλοθλαστικότητα) ή στην απορρόφηση/εκπομπή (διχρωισμός) [152–158]. Πρέπει να τονιστεί ότι τα φαινόμενα αυτά είναι μη αντιστρεπτά, διότι εμφανίζονται λόγω της ταυτόχρονης απουσίας συμμετρίας αντιστροφής στο χώρο και στο χρόνο σε ένα υλικό με μαγνητική ροπή και χωρική ασυμμετρία, και είναι διαφορετικά από τα αντίστοιχα αντιστρεπτά φαινόμενα, τα οποία επάγονται μόνο από τη χειρόμορφη δομή ή το μαγνητικό πεδίο. Η χειρομαγνητική ανισοτροπία, εκτός του ότι είναι ενδιαφέρουσα από μόνη της διότι σχετίζεται με θεμελιώδεις αρχές συμμετρίας που διέπουν την αλληλεπίδραση ακτινοβολίας ύλης, έχει προταθεί επίσης ως πιθανή ερμηνεία για την ομοχειρομορφία των έμβιων

[1] Στη γεωμετρία Faraday το μαγνητικό πεδίο εφαρμόζεται κατά τη διεύθυνση διάδοσης ενώ στη γεωμετρία Voigt ή (Cotton-Mouton) εφαρμόζεται κάθετα στη διεύθυνση διάδοσης.

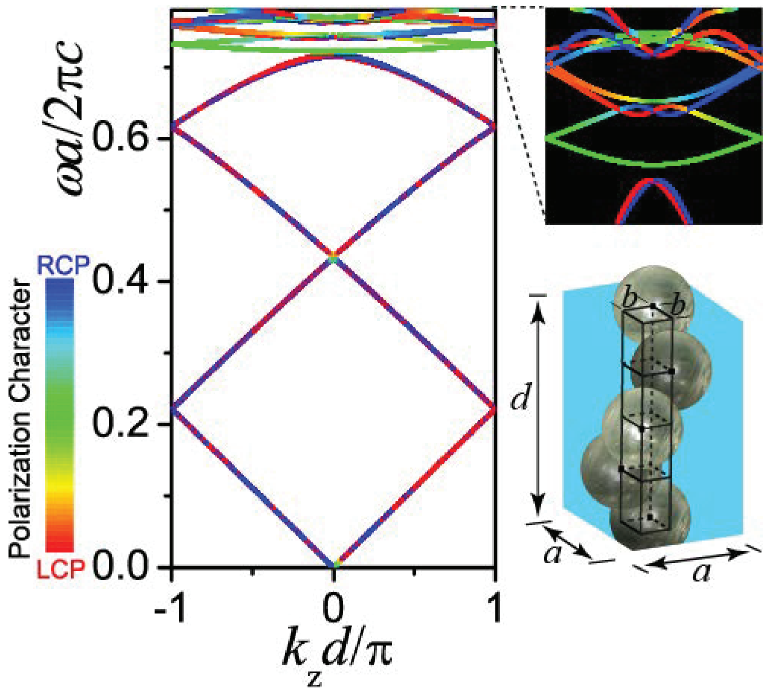
όντων[2] διότι επιτρέπει να γίνονται φωτοχημικές διεργασίες με μη πολωμένο φως, επιλεκτικά, σε συγκεκριμένο εναντιομερές παρουσία μαγνητικού πεδίου [159].

Διπλοθλαστικότητα και διχρωισμός τέτοιας προέλευσης, ως φαινόμενα δεύτερης τάξης, είναι εν γένει ασθενή και επομένως απαιτούνται καλά σχεδιασμένα πειράματα σε προσεκτικά επιλεγμένα συστήματα για την αδιαμφισβήτητη παρατήρησή τους. Μέχρι τώρα, πειραματικές ενδείξεις έχουν αναφερθεί σε υγρά μοριακά συστήματα, οργανικές ενώσεις, μονοαξονικά χειρόμορφα κρυσταλλικά υλικά, και χειρόμορφους σιδηρομαγνήτες [159–167]. Πρόσφατα, επιτρεπτές δομές όπου μπορούν να εμφανιστούν τέτοια φαινόμενα προσδιορίστηκαν με ανάλυση της συμμετρίας και προβλέφθηκε ο σχεδιασμός μαγνητικών μεταϋλικών και φωτονικών κρυστάλλων που θα μπορούσαν να διευρύνουν την εμβέλεια ισχύος αυτών των φαινομένων [168].

Στο εδάφιο αυτό προτείνουμε ένα φωτονικό κρύσταλλο από σωματίδια μαγνητισμένου γρανάτη σε ελικοειδή διάταξη, εμβαπτισμένα σε μη μαγνητικό διηλεκτρικό μέσο χαμηλού δείκτη διάθλασης, ως μια πρότυπη δομή που εμφανίζει ισχυρό χειρομαγνητικό διχρωισμό. Σωματίδια μαγνητισμένου γρανάτη μπορούν να παρασκευαστούν στο εργαστήριο [169–171] και να οργανωθούν σε ελικοειδής δομές, π.χ. με τεχνικές κατευθυνόμενης οργάνωσης, ενώ η φασματική απόκριση του φωτονικού κρυστάλλου μπορεί να ρυθμιστεί κατά βούληση στην περιοχή του ορατού και του υπερύθρου επιλέγοντας κατάλληλα τις γεωμετρικές παραμέτρους της δομής. Στην περιοχή του ορατού και του υπερύθρου, η γυροτροπική απόκριση των υλικών είναι ασθενής και μπορεί να περιγραφεί από (σχετική) μαγνητική διαπερατότητα $\mu_g = 1$ και ένα διηλεκτρικό τανυστή της μορφής (6.1) αν το μαγνητικό πεδίο διευθύνεται κατά τον άξονα z. Στην Εξ. (6.1) θέτουμε $\epsilon = 6.25+0.001i$, που είναι μια τυπική τιμή για μαγνητισμένο γρανάτη με χαμηλές απώλειες, και παράμετρο γυροτροπίας $g = 0.01$, που είναι επίσης μια ρεαλιστική τιμή [148–150]. Θεωρούμε έναν τετραγωνικό κρύσταλλο που ορίζεται από τα θεμελιώδη πλεγματικά διανύσματα $\mathbf{a}_1 = (a, 0, 0)$, $\mathbf{a}_2 = (0, a, 0)$, $\mathbf{a}_3 = (0, 0, d)$ και μια βάση τεσσάρων σφαιρών μαγνητισμένου γρανάτη ακτίνας S, τοποθετημένες στα σημεία (0,0,0), $(b, 0, d/4)$, $(b, b, d/2)$, και $(0, b, 3d/4)$, όπως φαίνεται στο Σχ. 6.6, εμβαπτισμένες σε ομοιογενές μέσο σχετικής διηλεκτρικής σταθεράς $\epsilon_h = 1$ και μαγνητικής διαπερατότητας $\mu_h = 1$. Αυτή η χειρόμορφη δομή με μη μαγνητικές διηλεκτρικές σφαίρες προτάθηκε αρχικά ως ένα ισχυρά οπτικά ενεργό τεχνητό υλικό [71]. Στις εφαρμογές του παρόντος εδαφίου υπολογίζουμε τις οπτικές ιδιότητες ενός τέτοιου κρυστάλλου, θεωρώντας $d/a = 2$, $b/a = 0.25$, και $S/a = 0.25$.

Αρχικά θα μελετήσουμε τα βασικά χαρακτηριστικά του φωτονικού διαγράμματος ζωνών του κρυστάλλου που εξετάζουμε αλλά με σφαίρες μη μαγνητισμένου γρανάτη [$g = 0$ στην Εξ. (6.1)], αγνοώντας τις απώλειες έτσι ώστε η σχέση διασποράς να ερμηνεύεται με σαφή τρόπο. Όπως δείχνει το Σχ. 6.6, κατά τη διεύθυνση [001], σε χαμηλές συχνότητες (χαμηλότερα από $\omega a/2\pi c \cong 0.7$) έχουμε δύο μη εκφυλισμένες εκτεταμένες ζώνες, αναδιπλωμένες μέσα στην 1^{η} ΖΒ, τόσο κοντά η μια στην άλλη που δεν είναι ευδιάκριτος ο διαχωρισμός τους στην κλίμακα του σχήματος, οι οποίες περιγράφουν διάδοση σε ομοιογενές ενεργό μέσο. Σε υψηλότερες συχνότητες, το διάγραμμα διασποράς χαρακτηρίζεται από την παρουσία επιπρόσθετων στενών ζωνών, οι οποίες προέρχονται από την ασθενή αλληλεπίδραση των καταστάσεων συντονισμού Mie των μεμονωμένων σφαιρών στις συχνότητες $\omega a/2\pi c = 0.76$ (διπολική μαγνητική κατάσταση), $\omega a/2\pi c = 0.91$ (διπολική ηλεκτρική κατάσταση), $\omega a/2\pi c = 1.09$ (τετραπολική μαγνητική κατάσταση), κλπ. Η αλληλεπίδραση μεταξύ στενών και εκτεταμένων

[2] Η ζωή στη γη βασίζεται σχεδόν αποκλειστικά σε αριστερόστροφες πρωτεΐνες.

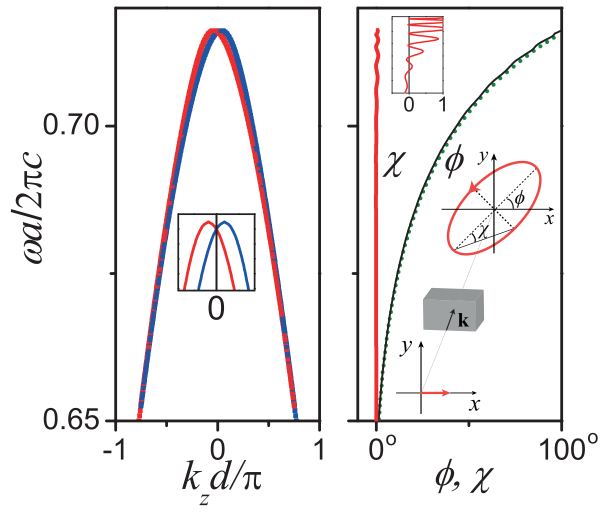


Σχήμα 6.6: Φωτονική δομή ζωνών κατά τη διεύθυνση [001] τετραγωνικού κρυστάλλου με βάση τεσσάρων σφαιρών μη μαγνητισμένου γρανάτη χωρίς απώλειες, ακτίνας S, σε ελικοειδή διάταξη στη μοναδιαία κυψελίδα, η οποία απεικονίζεται στο περιθώριο ($d/a = 2$, $b/a = 0.25$, και $S/a = 0.25$). Στο περιθώριο φαίνεται επίσης μια μεγέθυνση του διαγράμματος διασποράς στην περιοχή των στενών ζωνών.

ζωνών οδηγεί στο σχηματισμό χασμάτων συχνότητας και υβριδισμένων ζωνών οι οποίες έχουν έντονη συνεισφορά των εντοπισμένων καταστάσεων συντονισμού στα επίπεδα τμήματά τους, π.χ., στην κορυφή των ζωνών κάτω από το μικρό χάσμα στη συχνότητα $\omega a/2\pi c = 0.72$ (βλ. τη μεγέθυνση του διαγράμματος στο περιθώριο του Σχ. 6.6). Αξίζει να σημειωθεί ότι, παρόλο που ο κρύσταλλος δεν έχει συμμετρία αντιστροφής χώρου, η συμμετρία $\omega(-\mathbf{k}) = \omega(\mathbf{k})$ υπάρχει εξαιτίας της συμμετρίας αντιστροφής χρόνου. Η θεωρία ομάδων προβλέπει ότι οι ζώνες κατά τη διεύθυνση που εξετάζουμε είναι μη εκφυλισμένες και καμία από αυτές δεν έχει αμιγώς συμμετρία LCP ή RCP[3]. Κατά μήκος μιας ζώνης υπάρχει διαφορετικός βαθμός συνεισφοράς των καταστάσεων LCP και RCP, που δείχνεται με τη χρωματική κλίμακα στο Σχ. 6.6. Αυτός ο χαρακτήρας πόλωσης υπολογίζεται από την προβολή των αντίστοιχων ιδιοδιανυσμάτων (καταστάσεις Bloch) στη βάση των καταστάσεων LCP και RCP.

Μέχρι τη συχνότητα $\omega a/2\pi c = 0.72$, για κάθε τιμή της συχνότητας έχουμε δύο καταστάσεις, μία με κυρίως χαρακτήρα LCP και μία με RCP, που διαδίδονται προς τη θετική κατεύθυνση z και αντίστοιχα άλλες δύο που διαδίδονται προς την αντίθετη κατεύθυνση. Επομένως, ένα γραμμικά πολωμένο ΗΜ κύμα με γωνιακή συχνότητα ω σε αυτή τη φασματική περιοχή, που προσπίπτει κάθετα σε ένα πεπερασμένο πλακίδιο κομμένο παράλληλα στην επιφάνεια (001)

[3]Για μια αυστηρή ανάλυση βασισμένη στη θεωρία των μη σύμμορφων ομάδων χώρου βλ. Εδάφιο 7.1.

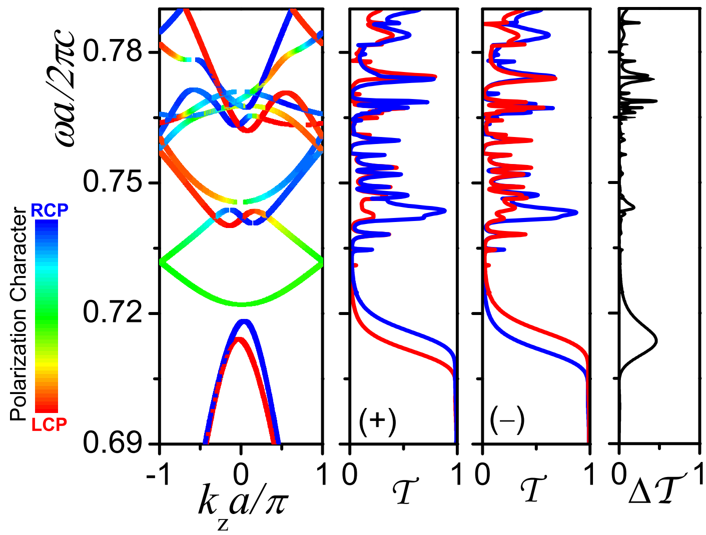


Σχήμα 6.7: Αριστερό διάγραμμα: Μεγέθυνση του διαγράμματος διασποράς του Σχ. 6.6 κάτω από το χάσμα που διαχωρίζει τις εκτεταμένες από τις στενές ζώνες. Δεξί διάγραμμα: Γωνίες ελλειπτικότητας και στροφής επιπέδου πόλωσης του διερχόμενου κύματος για φως πολωμένο γραμμικά κατά τον άξονα x, που προσπίπτει κάθετα σε ένα πλακίδιο (001) του κρυστάλλου που αποτελείται από 64 στρώματα σφαιρών, παρουσία απορρόφησης. Η γωνία στροφής του επιπέδου πόλωσης υπολογίστηκε από το διάγραμμα διασποράς (εστιγμένη γραμμή) και απευθείας από το διερχόμενο κύμα (συνεχής γραμμή).

του κρυστάλλου, αναλύεται σε ένα κύμα LCP και ένα RCP, τα οποία διαδίδονται στο πλακίδιο με διαφορετικές ταχύτητες φάσης: ω/k_z^L και ω/k_z^R, αντίστοιχα, όπου $k_z^R - k_z^L \equiv \Delta k_z$ είναι η απόσταση μεταξύ των ζωνών σε δεδομένη συχνότητα. Αν οι συνιστώσες LCP και RCP του διερχόμενου κύματος έχουν τα ίδια πλάτη, τότε το κύμα αυτό θα είναι γραμμικά πολωμένο με διεύθυνση πόλωσης που σχηματίζει γωνία $\phi = \Delta k_z D/2$ ως προς τη διεύθυνση πόλωσης του προσπίπτοντος κύματος (οπτική ενεργότητα), όπου D είναι το πάχος του πλακιδίου και θετική τιμή της ϕ σημαίνει αριστερόστροφη γωνία. Γενικά, το διερχόμενο κύμα είναι ελλειπτικά πολωμένο με το μεγάλο άξονα της έλλειψης να σχηματίζει γωνία ϕ που δίδεται από την Εξ. (5.11) με τη διεύθυνση πόλωσης του προσπίπτοντος κύματος και με γωνία ελλειπτικότητας χ που δίδεται από την Εξ. (5.12).

Όπως μπορεί να δει κανείς, στο δεξί διάγραμμα του Σχ. 6.7, η γωνία ελλειπτικότητας είναι πολύ μικρή και κοντά στην κορυφή των ζωνών εμφανίζει μικρές διακυμάνσεις. Σημειώνεται ότι το διερχόμενο κύμα είναι γραμμικά πολωμένο όταν $\chi = 0$. Στο ίδιο διάγραμμα φαίνεται επίσης η μεταβολή της ϕ, όπως υπολογίστηκε από το διάγραμμα διασποράς του άπειρου κρυστάλλου καθώς και από το διερχόμενο κύμα από το πεπερασμένο πλακίδιό του. Τα δύο αποτελέσματα είναι σε πολύ καλή συμφωνία μεταξύ τους, που δείχνει ότι έχουμε ήδη συμπεριφορά άπειρου κρυστάλλου όπου η γωνία ϕ μεταβάλλεται γραμμικά με το πάχος του πλακιδίου. Βλέπουμε ότι η οπτική ενεργότητα μεγαλώνει καθώς πλησιάζουμε την επίπεδη περιοχή στην κορυφή των ζωνών, όπου αυτές διαχωρίζονται πολύ μεταξύ τους (φαινόμενο ακμής ζώνης).

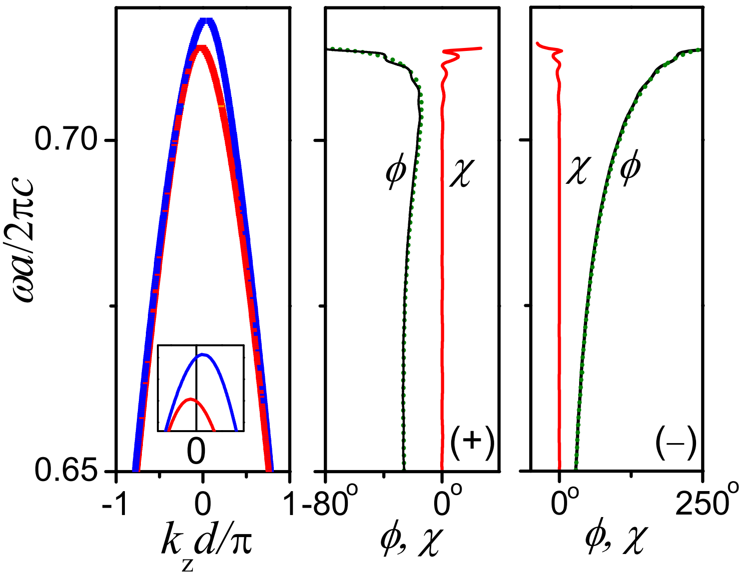
Εάν έχουμε σφαίρες από γρανάτη μαγνητισμένο κατά τη διεύθυνση z, η φασματική μη



Σχήμα 6.8: Φωτονική δομή ζωνών κατά τη διεύθυνση [001] τετραγωνικού κρυστάλλου με βάση τεσσάρων σφαιρών γρανάτη, μαγνητισμένων κατά τον άξονα z, στην περιοχή συχνοτήτων των στενών ζωνών. Οι σφαίρες, ακτίνας S, βρίσκονται σε ελικοειδή διάταξη στη μοναδιαία κυψελίδα, όπως περιγράφεται στο Σχ. 6.6 ($d/a = 2$, $b/a = 0.25$, και $S/a = 0.25$). Δίπλα από το διάγραμμα ζωνών δείχνουμε τα αντίστοιχα φάσματα διέλευσης ενός πλακιδίου (001) του κρυστάλλου, αποτελούμενου από 16 στρώματα σφαιρών για φως LCP και RCP που προσπίπτει κατά τη θετική (+) και αρνητική (−) διεύθυνση z. Στο δεξί διάγραμμα απεικονίζεται η απόλυτη τιμή της διαφοράς στη διελευσιμότητα κατά τις δύο κατευθύνσεις, $\Delta\mathcal{T}$, που είναι πρακτικά η ίδια για φως LCP και RCP.

αντιστρεπτότητα φαίνεται καθαρά στο διάγραμμα ζωνών του Σχ. 6.8 και είναι αποτέλεσμα της άρσης συμμετρίας αντιστροφής του χρόνου σε συνδυασμό με την απουσία συμμετρίας αντιστροφής του χώρου. Στο Σχ. 6.8, δίπλα από το διάγραμμα ζωνών δείχνουμε τα αντίστοιχα φάσματα διέλευσης ενός πλακιδίου (001) του κρυστάλλου από 16 στρώματα σφαιρών, για φως LCP και RCP που προσπίπτει κατά (+) και αντίθετα προς (−) την κατεύθυνση της μαγνήτισης. Αν και δεν υπάρχει περιοχή συχνοτήτων με καταστάσεις μόνο θετικής ή αρνητικής ταχύτητας ομάδας, στην περιοχή $\omega a/2\pi c$ από 0.714 έως 0.719 έχουμε διέλευση επιλεκτική ως προς την πόλωση κατά μία μόνο κατεύθυνση, όπου κύματα RCP διέρχονται προς την κατεύθυνση της μαγνήτισης ενώ κύματα LCP διέρχονται μόνο προς την αντίθετη κατεύθυνση. Ο βαθμός της μη αντιστρεπτότητας μπορεί να ποσοτικοποιηθεί από την απόλυτη τιμή της διαφοράς στη διελευσιμότητα κατά τις δύο κατευθύνσεις. Η ποσότητα αυτή, η οποία μηδενίζεται αν οι σφαίρες είναι μη μαγνητισμένες, παριστάνεται στο δεξί διάγραμμα του Σχ. 6.8 και είναι πρακτικά η ίδια για φως LCP και RCP στη φασματική περιοχή που εξετάζουμε.

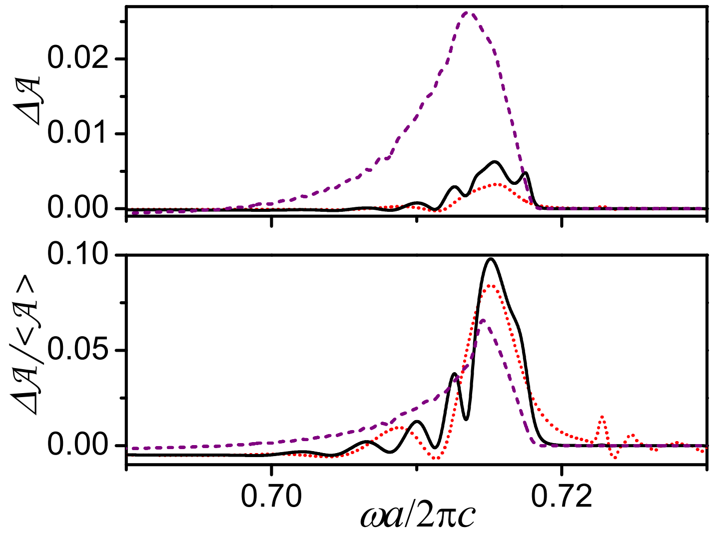
Στο Σχ. 6.9 δείχνουμε μια μεγέθυνση του διαγράμματος διασποράς του Σχ. 6.8 στην περιοχή της έντονης μη αντιστρεπτής απόκρισης, κάτω από το χάσμα που διαχωρίζει τις εκτεταμένες από τις στενές ζώνες, καθώς και τις αντίστοιχες μεταβολές των γωνιών ελλειπτικότητας



Σχήμα 6.9: Το ίδιο όπως το Σχ. 6.7, για σφαίρες γρανάτη μαγνητισμένου κατά τη διεύθυνση z. Οι αντίστοιχες μεταβολές των γωνιών ελλειπτικότητας και στροφής του επιπέδου πόλωσης δείχνονται τόσο για τα εμπροσθοδιαδιδόμενα (+) όσο και για τα οπισθοδιαδιδόμενα (−) κύματα.

και στροφής του επιπέδου πόλωσης για εμπροσθοδιαδιδόμενα και οπισθοδιαδιδόμενα κύματα. Κατά τη θετική διεύθυνση z η οπτική ενεργότητα που επάγεται από την ελικοειδή δόμηση (φυσική οπτική ενεργότητα) αντισταθμίζει εν μέρει τη μαγνητική οπτική ενεργότητα (στροφή Faraday) ενώ κατά την αντίθετη διεύθυνση χειρομορφία και μαγνητισμός συμβάλλουν ενισχυτικά και αυξάνουν πολύ τη στροφή του επιπέδου πόλωσης. Λόγω της έντονης φυσικής και μαγνητικής οπτικής ενεργότητας που εκδηλώνει ο συγκεκριμένος κρύσταλλος, αναμένονται επίσης ισχυρά φαινόμενα χειρομαγνητικής ανισοτροπίας, π.χ., στην οπτική απορρόφηση, εντός της περιοχής συχνοτήτων που εξετάζουμε. Ως ποσοτικό μέτρο του χειρομαγνητικού διχρωισμού, υιοθετούμε τον κανονικοποιημένο παράγοντα ανισοτροπίας $\Delta\mathcal{A}/\langle\mathcal{A}\rangle$ [161], με $\Delta\mathcal{A} \equiv \mathcal{A}_+ - \mathcal{A}_-$ και $\langle\mathcal{A}\rangle \equiv (\mathcal{A}_+ + \mathcal{A}_-)/2$ όπου $\mathcal{A}_{+(-)}$ είναι η απορρόφηση μη πολωμένου (φυσικού) φωτός που προσπίπτει σε ένα πλακίδιο του κρυστάλλου κατά (αντίθετα από) τη διεύθυνση μαγνήτισης των σφαιρών. Το μη πολωμένο φως μπορεί να θεωρηθεί ως ασύμφωνη επαλληλία καταστάσεων LCP και RCP ή, εν γένει, δύο οποιωνδήποτε ορθογώνιων καταστάσεων πόλωσης. Όπως φαίνεται στο Σχ. 6.10, κοντά στην κορυφή των ζωνών του Σχ. 6.9 όπου εκδηλώνεται αυξημένη φυσική και μαγνητική οπτική ενεργότητα, εμφανίζεται έντονος χειρομαγνητικός διχρωισμός, που αντιστοιχεί σε τιμές του κανονικοποιημένου παράγοντα ανισοτροπίας της τάξης του 0.1. Η μεταβολή της απορρόφησης, $\Delta\mathcal{A}$, αυξάνεται με το πάχος του πλακιδίου, το ίδιο όμως συμβαίνει και για τη μέση απορρόφηση, $\langle\mathcal{A}\rangle$, έτσι ώστε η βέλτιστη τιμή του παράγοντα ανισοτροπίας χειρομαγνητικού διχρωισμού, $\Delta\mathcal{A}/\langle\mathcal{A}\rangle$, επιτυγχάνεται για πλακίδια μεσαίου πάχους, για παράδειγμα πάχους 64 στρωμάτων.

Πρέπει να τονιστεί ότι η δομή που εξετάσαμε εκδηλώνει ισχυρό χειρομαγνητικό διχρωι-



Σχήμα 6.10: Χειρομαγνητικός διχρωισμός διαφόρων πλακιδίων (001) του κρυστάλλου από σφαίρες μαγνητισμένου γρανάτη που μελετάμε, για κάθετη πρόσπτωση, κοντά στην κορυφή των ζωνών του Σχ. 6.9. Εστιγμένες γραμμές: Πλακίδιο πάχους 32 στρωμάτων. Συνεχείς γραμμές: Πλακίδιο πάχους 64 στρωμάτων. Διακεκομμένες γραμμές: Πλακίδιο πάχους 1024 στρωμάτων.

σμό, που υπερβαίνει τουλάχιστον κατά μία τάξη μεγέθους αυτόν που εμφανίζεται στα φυσικά υλικά που έχουν μελετηθεί στη βιβλιογραφία. Η συμπεριφορά αυτή απορρέει από την έντονη φυσική και μαγνητική οπτική ενεργότητα που εκδηλώνει ο κρύσταλλος αυτός σε ορισμένες περιοχές συχνοτήτων, οι οποία και μπορεί να ρυθμιστεί κατά βούληση στην ορατή και υπέρυθρη περιοχή του φάσματος επιλέγοντας κατάλληλα τις γεωμετρικές παραμέτρους της δομής. Σημειώνεται ότι αν χρησιμοποιηθούν σφαίρες με διαφορετική οπτική απόκριση το φαινόμενο αλλάζει ανάλογα. Για παράδειγμα, αν $g = 0.005$, βρίσκουμε μικρότερες τιμές του $\Delta\mathcal{A}/\langle\mathcal{A}\rangle$ που δεν υπερβαίνουν την τιμή 0.05. Η βελτιστοποίηση της δομής είναι όμως δυνατό να οδηγήσει και σε εντονότερο φαινόμενο. Επομένως η μελέτη μας μπορεί να ανοίξει το δρόμο για το σχεδιασμό τεχνητών νανοδομών με πολυ ισχυρή χειρομαγνητική ανισοτροπία, για πρακτικές εφαρμογές σε μικροσκοπικές μη αντιστρεπτές φωτονικές διατάξεις.

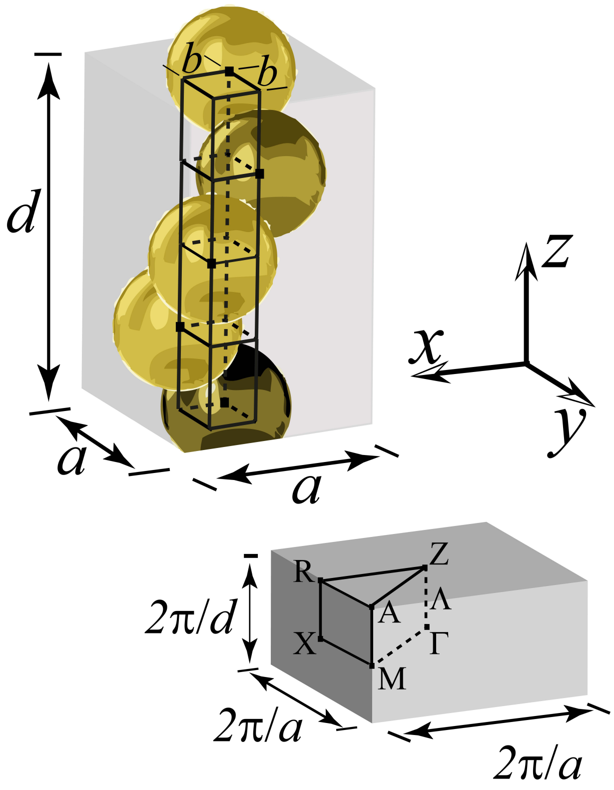
Κεφάλαιο 7

Μαγνητοπλασμονικοί κρύσταλλοι

Καταστάσεις του ΗΜ πεδίου σε δομές από πλασμονικά υλικά (μέταλλα ή ημιαγωγούς) χωρίς συμμετρία αντιστροφής χώρου, υπό την επίδραση εξωτερικού στατικού ομοιογενούς μαγνητικού πεδίου, μπορούν να εκδηλώσουν μη αντιστρεπτή συμπεριφορά λόγω ταυτόχρονης άρσης της συμμετρίας αντιστροφής χρόνου. Τέτοια συμπεριφορά παρατηρήθηκε για παράδειγμα στην ανάκλαση φωτός από επιφάνεια κρυστάλλου InSb, τύπου n, ως προς την αντιστροφή της κατεύθυνσης του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου και της διάδοσης του φωτός [172]. Πιο πρόσφατα μελετήθηκαν επίσης καταστάσεις κυματοδηγού στην διεπιφάνεια φωτονικού κρυστάλλου με μεταλλικό υλικό, οι οποίες διαδίδονται προς μία μόνο κατεύθυνση υπό την επίδραση εξωτερικού στατικού ομοιογενούς μαγνητικού πεδίου [144]. Πλασμονικές νανοδομές μπορούν να εμφανίσουν έντονη μαγνητοοπτική ενεργότητα λόγω διέγερσης εντοπισμένων καταστάσεων συντονισμού [173] και δομές από νανοσωματίδια πλάσματος προσφέρουν μια πιο ευέλικτη πλατφόρμα για τη διαμόρφωση τέτοιων πλασμονικών καταστάσεων, μεταβάλλοντας το σχήμα και τη διάταξη των σωματιδίων ή ακόμη και το περιβάλλον τους, σε σύγκριση με αντίστοιχες συνεχείς ομοιογενείς διαμορφώσεις [122,174–179]. Στο παρόν κεφάλαιο μελετάται η μη αντιστρεπτή οπτική απόκριση 3Δ ελικοειδών και επιφανειακών αρχιτεκτονικών από σφαίρες πλάσματος, καθώς και πλασμονίων σε επίπεδες επιφάνειες, υπό την επίδραση εξωτερικού στατικού μαγνητικού πεδίου.

7.1 Μη αντιστρεπτές μαγνητοπλασμονικές δομές σφαιρών σε ελικοειδή διάταξη

Θα μελετήσουμε την ίδια ελικοειδή δομή που θεωρήσαμε στο Εδάφιο 6.2 με σφαίρες όμως πλάσματος αντί για γρανάτη (βλ. Σχ. 7.1), στην οποία έχουν βρεθεί φωτονικές ζώνες με αρνητική κλίση [45] κάθως και ένα σημείο Dirac στο κέντρο της $1^{ης}$ ΖΒ [180]. Τέτοιες δομές μπορούν να παρασκευαστούν στο εργαστήριο με σύγχρονες τεχνικές λιθογραφίας [100, 181], κατευθυνόμενης οργάνωσης [108, 182] καθώς και με τη μέθοδο 'DNA origami' [110, 111]. Θεωρούμε ότι οι σφαίρες πλάσματος περιγράφονται από σχετική μαγνητική διαπερατότητα $\mu_p = 1$ και τη σχετική διηλεκτρική συνάρτηση Drude που δίνεται από την Εξ. (4.1) με τ το χρόνο αποκατάστασης των ελεύθερων φορέων και ω_p τη συχνότητα πλάσματος: $\omega_p^2 = ne^2/(m\epsilon_0)$, όπου n, $-e$, και m είναι η πυκνότητα, το φορτίο, και η μάζα των ελεύθερων φορέων, αντίστοιχα. Στα μέταλλα, $\hbar\omega_p \cong 10$ eV και η χαρακτηριστική κλίμακα μήκους c/ω_p αντιστοιχεί σε περίπου 20 nm. Στους ημιαγωγούς όμως, καθώς οι πυκνότητες των φορέων



Σχήμα 7.1: Η μοναδιαία κυψελίδα του υπό μελέτη κρυστάλλου: Ένα τετραγωνικό πλέγμα με βάση τεσσάρων σφαιρών πλάσματος που περιγράφονται από τη σχετική διηλεκτρική συνάρτηση Drude της Εξ. (4.1), ακτίνας $S = 0.2c/\omega_p$, σε ελικοειδή διάταξη κατά τη διεύθυνση z ($a = c/\omega_p, d = 2c/\omega_p, b = 0.3c/\omega_p$), και η αντίστοιχη 1^{η} ΖΒ.

μπορούν να μεταβληθούν εύκολα σε ένα μεγάλο εύρος τιμών και είναι πολύ χαμηλότερες από ότι στα μέταλλα, η συχνότητα πλάσματος είναι πολύ μικρότερη (τυπικά στο μέσο και άπω υπέρυθρο) και η μονάδα μήκους c/ω_p αυξάνεται αντίστοιχα. Στον κρύσταλλο που θα μελετήσουμε θεωρούμε $a = c/\omega_p$, $d = 2c/\omega_p$, $S = 0.2c/\omega_p$, και $b = 0.3c/\omega_p$.

Παρουσία ενός στατικού μαγνητικού πεδίου, $\mathbf{B}$, η απόκριση του πλάσματος σε ένα αρμονικό ΗΜ κύμα γωνιακής συχνότητας ω με συνιστώσα του ηλεκτρικού πεδίου $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t)$, περιγράφεται από την εξίσωση κίνησης των ηλεκτρονίων: $m\ddot{\mathbf{r}} = -m\tau^{-1}\dot{\mathbf{r}} - e\mathbf{E} - e\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}$. Η επαγόμενη πυκνότητα πόλωσης, $\mathbf{P} = -ne\mathbf{r}$, προσδιορίζει το διάνυσμα διηλεκτρικής μετατόπισης $\mathbf{D} = \epsilon_0\mathbf{E} + \mathbf{P}$ και τελικά ορίζεται ένας διηλεκτρικός τανυστής $\boldsymbol{\epsilon}_g$ για το μαγνητισμένο πλάσμα από τη σχέση $\mathbf{D} = \epsilon_0\boldsymbol{\epsilon}_g\mathbf{E}$. Αν το μαγνητικό πεδίο διευθύνεται κατά τον άξονα z, ύστερα από πράξεις βρίσκουμε ότι ο $\boldsymbol{\epsilon}_g$ έχει τη γυροτροπική μορφή της Εξ. (1.20) με

$$\begin{aligned} \epsilon_r &= 1 - \frac{\omega_p^2\xi}{\omega^2\xi^2 - \omega_c^2} \\ \epsilon_z &= 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2\xi} \end{aligned} \tag{7.1}$$

	$\Lambda_{1(\phi)}$	$\Lambda_{2(\phi)}$	$\Lambda_{3(\phi)}$	$\Lambda_{4(\phi)}$
$\{\widehat{E}\|\mathbf{0}\}\mathcal{T}(\mathbf{k})$	1	1	1	1
$\{\widehat{C}_{2z}\|2\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k})$	w_1	w_1	$-w_1$	$-w_1$
$\{\widehat{C}_{4z}\|\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k})$	w_2^*	$-w_2^*$	iw_2^*	$-iw_2^*$
$\{\widehat{C}_{4z}^{-1}\|-\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k})$	w_2	$-w_2$	$-iw_2$	iw_2

Πίνακας 7.1: Πίνακας χαρακτήρων της παραγοντικής ομάδας $\mathcal{G}(\mathbf{k})/\mathcal{T}(\mathbf{k})$ στη διεύθυνση Λ $[\mathbf{k} = (0, 0, k_z)]$ για τις ομάδες χώρου D_4^7 και C_4^4 ($w_1 = \exp(-i\phi)$, $w_2 = \exp(i\phi/2)$ με $\phi = k_z d/2$).

	A_1	B_1	A_2	B_2	E
$\widehat{E}$	1	1	1	1	2
$\widehat{C}_{2z}$	1	1	1	1	-2
$\widehat{C}_{4z}, \widehat{C}_{4z}^{-1}$	1	-1	1	-1	0
$\widehat{C}_{2x}, \widehat{C}_{2y}$	1	1	-1	-1	0
$\widehat{C}_{2a}, \widehat{C}_{2b}$	1	-1	-1	1	0

Πίνακας 7.2: Πίνακας χαρακτήρων της σημειακής ομάδας D_4.

$$\epsilon_\kappa = -\frac{\omega_c}{\omega}\frac{\omega_p^2}{\omega^2\xi^2 - \omega_c^2} ,$$

όπου $\omega_c = eB/m$ είναι η συχνότητα κυκλοτρονικού συντονισμού και $\xi = 1 + i/(\tau\omega)$. Βλέπουμε ότι αν θέσουμε $\omega_c = 0$, ο τανυστής $\boldsymbol{\epsilon}_g$ γίνεται διαγώνιος με όλα τα στοιχεία του ίσα με τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude, ϵ_p, όπως θα ανέμενε κανείς. Στους υπολογισμούς μας με τη μέθοδο της στρωματικής πολλαπλής σκέδασης, που περιγράψαμε σε προηγούμενα κεφάλαια, αγνοούμε τις απώλειες ($\tau^{-1} = 0$).

Αρχικά, συνοψίζουμε τα κύρια χαρακτηριστικά της φωτονικής δομής ζωνών του υπό μελέτη κρυστάλλου, χωρίς το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Όπως δείχνουμε στο Σχ. 7.2, κατά τη διεύθυνση [001], σε χαμηλές συχνότητες ($\omega \lesssim 0.55\omega_p$) βρίσκουμε δύο μη εκφυλισμένες εκτεταμένες ζώνες, τόσο κοντά η μία στην άλλη ώστε δεν διακρίνονται στην κλίμακα του σχήματος, οι οποίες περιγράφουν διάδοση σε ένα ομοιογενές ενεργό μέσο. Σε υψηλότερες συχνότητες, το διάγραμμα διασποράς χαρακτηρίζεται από την παρουσία στενών ζωνών, οι οποίες προέρχονται από τις διπολικές πλασμονικές καταστάσεις των μεμονομένων σφαιρών, στη συχνότητα $\omega_1 = 0.575\omega_p$, που αλληλεπιδρούν ασθενώς μεταξύ τους, και υβριδοποιούνται με τις εκτεταμένες ζώνες δίνοντας χάσματα συχνοτήτων. Ο συνολικός αριθμός αυτών των στενών ζωνών, που φαίνονται σε μια μεγέθυνση του Σχ. 7.2, είναι 12 όπως αναμένεται από τον τριπλό εκφυλισμό των διπολικών πλασμονικών καταστάσεων της σφαίρας και τον αριθμό των σφαιρών στη μοναδιαία κυψελίδα ($12 = 3 \times 4$). Στενές ζώνες που προέρχονται από πλασμονικές καταστάσεις ανώτερης πολυπολικής τάξης βρίσκονται εκτός της περιοχής συχνοτήτων που θεωρούμε. Τονίζεται ότι, αν και ο συγκεκριμένος κρύσταλλος δεν έχει συμμετρία αντιστροφής χώρου, η συμμετρία $\omega(\mathbf{k}) = \omega(-\mathbf{k})$ υφίσταται εξαιτίας της συμμετρίας αντιστροφής χρόνου.

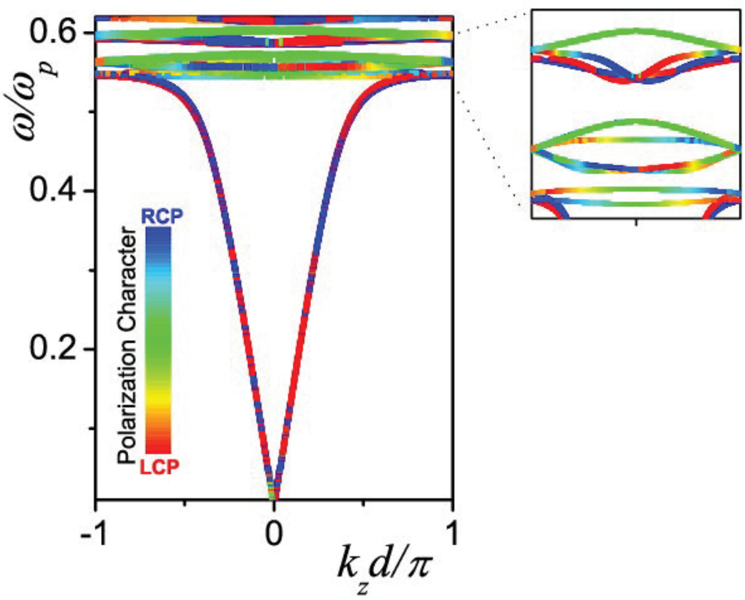
Μια αυστηρή και συνεπής ανάλυση των ιδιοτήτων συμμετρίας της φωτονικής δομής ζω-

	Z_a	Z_b
$\{\widehat{E}\|\mathbf{0}\}\mathcal{T}(\mathbf{k})$	2	2
$\{\widehat{E}\|4\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k})$	-2	-2
$\{\widehat{C}_{4z}\|\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k}), \{\widehat{C}_{4z}^{-1}\|-\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k})$	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$
$\{\widehat{C}_{4z}\|-3\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k}), \{\widehat{C}_{4z}^{-1}\|3\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k})$	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$
$\{\widehat{C}_{2z}\|2\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k}), \{\widehat{C}_{2z}\|-2\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k})$	0	0
$\{\widehat{C}_{2x}\|2\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k}), \{\widehat{C}_{2y}\|4\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k})$, $\{\widehat{C}_{2x}\|-2\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k}), \{\widehat{C}_{2y}\|\mathbf{0}\}\mathcal{T}(\mathbf{k})$	0	0
$\{\widehat{C}_{2a}\|\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k}), \{\widehat{C}_{2a}\|-3\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k})$, $\{\widehat{C}_{2b}\|-\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k}), \{\widehat{C}_{2b}\|3\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k})$	0	0

Πίνακας 7.3: Χαρακτήρες των επιτρεπτών μη αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων της παραγοντικής ομάδας $\mathcal{G}(\mathbf{k})/\mathcal{T}(\mathbf{k})$ στο σημείο Z $[\mathbf{k}=(0,0,\pm\pi/d)]$ για την ομάδα χώρου D_4^7.

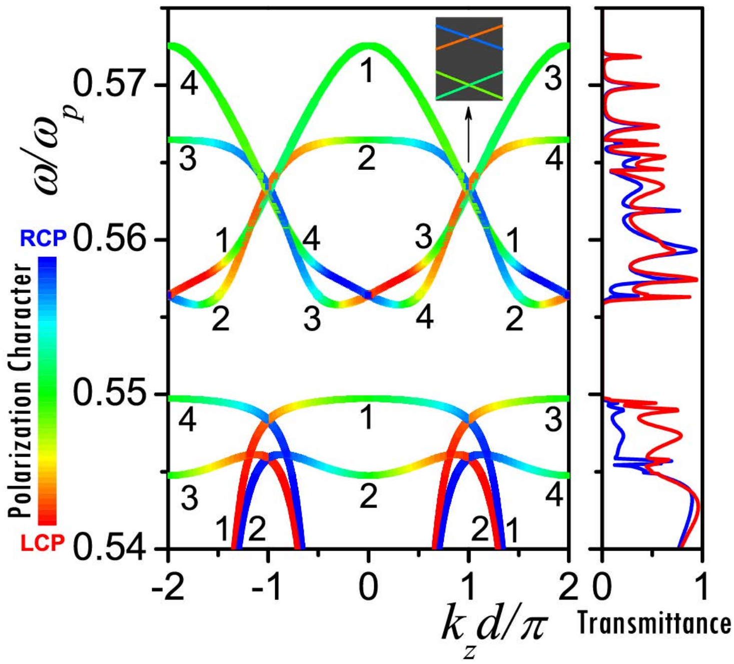
	A	B	E_1	E_2
$\widehat{E}$	1	1	1	1
$\widehat{C}_{2z}$	1	1	-1	-1
$\widehat{C}_{4z}$	1	-1	i	$-i$
$\widehat{C}_{4z}^{-1}$	1	-1	$-i$	i

Πίνακας 7.4: Πίνακας χαρακτήρων της σημειακής ομάδας C_4.



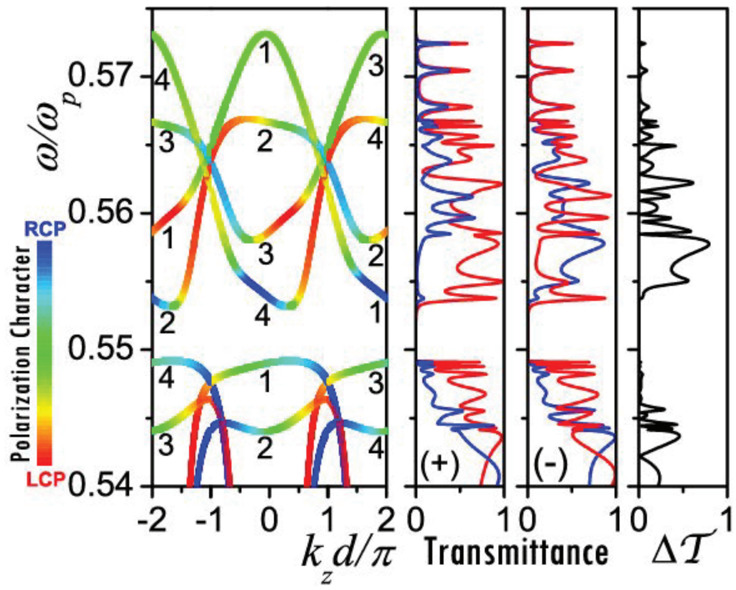
Σχήμα 7.2: Φωτονική δομή ζωνών του κρυστάλλου του Σχ. 7.1 κατά τη διεύθυνση [001], απουσία στατικού μαγνητικού πεδίου. Στο περιθώριο φαίνεται μια μεγέθυνση του διαγράμματος διασποράς στην περιοχή συχνοτήτων των στενών ζωνών.

νών του Σχ. 7.2 μπορεί να γίνει με τη θεωρία των μη σύμμορφων ομάδων χώρου. Απουσία του στατικού μαγνητικού πεδίου, ο κρύσταλλος του Σχ. 7.1 είναι αναλλοίωτος υπό τους μετασχηματισμούς συμμετρίας της μη σύμμορφης ομάδας χώρου D_4^7 που περιγράφεται στο Παράρτημα Ζ′. Κατά μήκος της διεύθυνσης Λ, δηλαδή για $\mathbf{k} = (0, 0, k_z)$ (βλ. Σχ. 7.1), οι ζώνες έχουν τη συμμετρία των μη αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων της κατάλληλης παραγοντικής ομάδας, $\mathcal{G}(\mathbf{k})/\mathcal{T}(\mathbf{k})$, (βλ. Πίνακα 7.1), και όχι μιας σταθερής σημειακής ομάδας όπως στην περίπτωση των σύμμορφων ομάδων χώρου [183, 184]. Οι ζώνες κατά τη διεύθυνση αυτή είναι μη εκφυλισμένες διότι όλες οι μη αναγωγίσιμες αναπαραστάσεις της παραγοντικής ομάδας του Πίνακα 7.1 είναι μονοδιάστατες. Είναι ενδιαφέρον ότι καμιά από αυτές τις ζώνες δεν αντιστοιχεί σε καταστάσεις Bloch αμιγώς LCP ή RCP εφόσον καμιά μη αναγωγίσιμη αναπαράσταση αυτής της παραγοντικής ομάδας δεν έχει συναρτήσεις βάσης συμμετρίας LCP και RCP. Κατά μήκος μιας ζώνης υπάρχει διαφορετικός βαθμός συνεισφοράς των καταστάσεων LCP και RCP, που φαίνεται με τη χρωματική κλίμακα στα Σχ. 7.2 και 7.3. Αυτός ο χαρακτήρας πόλωσης υπολογίζεται από την προβολή των αντίστοιχων καταστάσεων Bloch στη βάση των ιδιοκαταστάσεων LCP και RCP. Είναι επίσης ενδιαφέρον να σημειωθεί ότι η αντιστοιχία μεταξύ των μη αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων: $\Lambda_{1(\phi)} \to \Lambda_{4(\phi-\pi)}$, $\Lambda_{2(\phi)} \to \Lambda_{3(\phi-\pi)}$, $\Lambda_{3(\phi)} \to \Lambda_{1(\phi-\pi)}$, $\Lambda_{4(\phi)} \to \Lambda_{2(\phi-\pi)}$, που μπορεί εύκολα να δειχθεί από τον Πίνακα 7.1, εξηγεί το αναλλοίωτο καταστάσεων Bloch που διαφέρουν κατά ένα διάνυσμα αντιστρόφου πλέγματος στην περίπτωση που εξετάζουμε, δηλαδή κατά $(0, 0, 2\pi n/d)$, $n = 0, \pm1, \pm2, \cdots$, όπως απαιτείται (βλ. Σχ. 7.3). Στο κέντρο Γ της $1^{\eta\varsigma}$ ΖΒ, δηλαδή στο σημείο $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$, η σχετική παραγοντική ομάδα είναι ισόμορφη με τη σημειακή ομάδα D_4 (βλ. Πίνακα 7.2). Συμβατότη-



Σχήμα 7.3: Φωτονική δομή ζωνών του κρυστάλλου του Σχ. 7.1 κατά τη διεύθυνση [001], απουσία στατικού μαγνητικού πεδίου, στην περιοχή συχνοτήτων των χαμηλότερων στενών ζωνών. Οι διαφορετικές ζώνες δεικτοδοτούνται με την κατάλληλη μη αναγωγίσιμη αναπαράσταση της σχετικής παραγοντικής ομάδας $\mathcal{G}(\mathbf{k})/\mathcal{T}(\mathbf{k})$ για $\mathbf{k}=(0,0,k_z)$ (βλ. Πίνακα 7.1). Στο ένθετο φαίνεται μια μεγέθυνση του διαγράμματος διασποράς στην περιοχή διασταύρωσης των ζωνών που δείχνει το βέλος. Δίπλα από το διάγραμμα ζωνών παρουσιάζονται αντίστοιχα φάσματα διέλευσης για φως LCP και RCP που προσπίπτει κάθετα σε ένα πλακίδιο (001) του κρυστάλλου από 16 στρώματα σφαιρών.

τα μεταξύ των μη αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων της D_4 και της παραγοντικής ομάδας του Πίνακα 7.1, για $\phi=0$, προβλέπει ότι οι ζώνες συμμετρίας $\Lambda_{3(\phi)}$ και $\Lambda_{4(\phi)}$ κατά μήκος της διεύθυνσης Λ συγκλίνουν σε ένα διπλά εκφυλισμένο σημείο συμμετρίας E στο κέντρο της $1^{ης}$ ΖΒ. Αυτό παρατηρείται πράγματι στο Σχ. 7.3, στη συχνότητα $\omega=0.557\omega_p$, όπου δύο τέτοιες ζώνες τέμνονται γραμμικά σε ένα σημείο Dirac. Στο σημείο z, δηλαδή για $\mathbf{k}=(0,0,\pm\pi/d)$, όλες οι επιτρεπτές μη αναγωγίσιμες αναπαραστάσεις της σχετικής παραγοντικής ομάδας είναι διδιάστατες (βλ. Πίνακα 7.3) και αυτό εξηγεί γιατί σε αυτό το όριο της ζώνης όλοι οι κλάδοι της σχέσης διασποράς ενώνονται ανά δύο, ορίζοντας επιπλέον σημεία Dirac όπως φαίνονται στο ένθετο του Σχ. 7.3. Συμβατότητα μεταξύ των επιτρεπτών μη αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων της παραγοντικής ομάδας που σχετίζεται με το σημείο Z και αυτών της παραγοντικής ομάδας που σχετίζεται με τη διεύθυνση Λ για $\phi=\pi/2$, επιβάλλει οι ζώνες συμμετρίας $\Lambda_{1(\phi)}$ και $\Lambda_{3(\phi)}$ να συγκλίνουν σε μία διπλά εκφυλισμένη κατάσταση συμμετρίας Z_a και οι ζώνες συμμετρίας $\Lambda_{2(\phi)}$ και $\Lambda_{4(\phi)}$ να συγκλίνουν σε μία διπλά εκφυλισμένη κατάσταση συμμετρίας Z_b στο σημείο $\mathbf{k}=(0,0,\pi/d)$. Αντίστοιχα, οι ζώνες συμμετρίας $\Lambda_{1(\phi)}$ και $\Lambda_{4(\phi)}$ συγκλίνουν σε μία διπλά εκφυλισμένη κατάσταση συμμετρίας Z_a και οι ζώνες συμμετρίας $\Lambda_{2(\phi)}$ και $\Lambda_{3(\phi)}$



Σχήμα 7.4: Φωτονική δομή ζωνών του κρυστάλλου του Σχ. 7.1 κατά τη διεύθυνση [001], παρουσία στατικού μαγνητικού πεδίου που αντιστοιχεί σε $\omega_c = 0.01\omega_p$ και εφαρμόζεται κατά τον άξονα z, στην περιοχή συχνοτήτων των χαμηλότερων στενών ζωνών. Οι διαφορετικές ζώνες δεικτοδοτούνται με την κατάλληλη μη αναγωγίσιμη αναπαράσταση της σχετικής παραγοντικής ομάδας $\mathcal{G}(\mathbf{k})/\mathcal{T}(\mathbf{k})$ για $\mathbf{k} = (0, 0, k_z)$ (βλ. Πίνακα 7.1). Δίπλα από το διάγραμμα ζωνών παρουσιάζονται αντίστοιχα φάσματα διέλευσης για φως LCP και RCP που προσπίπτει κάθετα σε ένα πλακίδιο (001) του κρυστάλλου από 16 στρώματα σφαιρών κατά (+) και αντίθετα προς (−) την κατεύθυνση του στατικού μαγνητικού πεδίου. Στο δεξί διάγραμμα δέιχνεται η απόλυτη τιμή της διαφοράς στη διελευσιμότητα κατά τις δύο κατευθύνσεις, $\Delta\mathcal{T}$, που είναι πρακτικά η ίδια για φως LCP και RCP.

συγκλίνουν σε μία διπλά εκφυλισμένη κατάσταση συμμετρίας Z_b στο σημείο $\mathbf{k} = (0, 0, -\pi/d)$, όπως φαίνεται στο Σχ. 7.3.

Στο Σχ. 7.3, δίπλα από το διάγραμμα ζωνών, δείχνουμε αντίστοιχα φάσματα διέλευσης για φως LCP και RCP, που προσπίπτει κάθετα σε ένα πλακίδιο (001) του κρυστάλλου που αποτελείται από 16 στρώματα σφαιρών. Ο χαρακτηρισμός των ιδιοκαταστάσεων των ζωνών με το βαθμό του χαρακτήρα LCP και RCP που έχουν επιτρέπει μια συνεπή ερμηνεία των φασμάτων διέλευσης. Στην περιοχή συχνοτήτων από $0.546\omega_p$ έως $0.549\omega_p$, βλέπουμε ότι οι καταστάσεις με θετική ταχύτητα ομάδας έχουν κυρίαρχο χαρακτήρα LCP και συνεπώς συζεύγνυνται κυρίως με ένα επίπεδο ΗΜ κύμα της ίδιας κυκλικής πόλωσης που προσπίπτει κάθετα σε ένα πλακίδιο (001) του κρυστάλλου. Αυτό ισχύει για πρόσπτωση από οποιαδήποτε πλευρά του συγκεκριμένου πλακιδίου μια και αντιστρέφοντας τη διεύθυνση διάδοσης αντιστρέφεται και η φορά της κυκλικής πόλωσης του επίπεδου κύματος. Επομένως έχουμε διέλευση επιλεκτική ως προς τη πόλωση, όπου μόνο προσπίπτοντα κύματα με κυρίαρχη πόλωση LCP επιτρέπεται να διέλθουν.

Αν τώρα εφαρμόσουμε ένα στατικό ομοιογενές μαγνητικό πεδίο κατά τον άξονα z, η βαθ-

	Z_1	Z_2	Z_3	Z_4
$\{\widehat{E}\vert\mathbf{0}\}\mathcal{T}(\mathbf{k})$	1	1	1	1
$\{\widehat{E}\vert 4\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k})$	-1	-1	-1	-1
$\{\widehat{C}_{4z}\vert\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k})$	w^*	$-w^*$	w	$-w$
$\{\widehat{C}_{4z}\vert -3\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k})$	$-w^*$	w^*	$-w$	w
$\{\widehat{C}_{4z}^{-1}\vert -\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k})$	w	$-w$	w^*	$-w^*$
$\{\widehat{C}_{4z}^{-1}\vert 3\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k})$	$-w$	w	$-w^*$	w^*
$\{\widehat{C}_{2z}\vert 2\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k})$	$-i$	$-i$	i	i
$\{\widehat{C}_{2z}\vert -2\boldsymbol{\tau}\}\mathcal{T}(\mathbf{k})$	i	i	$-i$	$-i$

Πίνακας 7.5: Χαρακτήρες των επιτρεπτών μη αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων της παραγοντικής ομάδας $\mathcal{G}(\mathbf{k})/\mathcal{T}(\mathbf{k})$ στο σημείο Z $[\mathbf{k} = (0, 0, \pm\pi/d)]$ για την ομάδα χώρου C_4^4 $(w = \exp(i\pi/4))$.

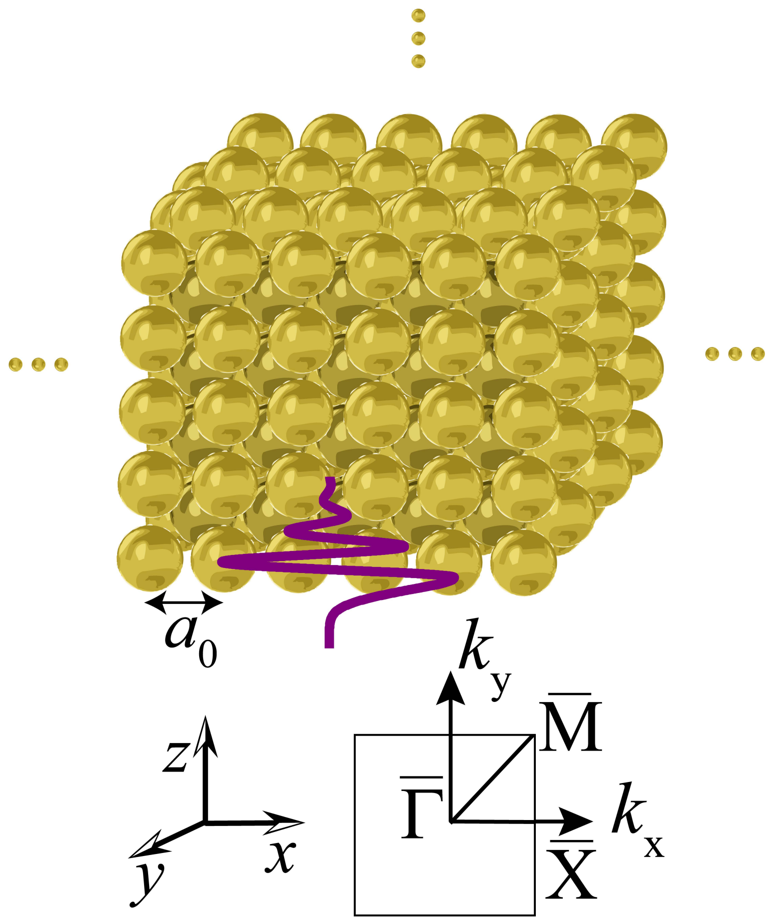
μωτή διηλεκτρική συνάρτηση Drude των σφαιρών πλάσματος γίνεται τανυστής, $\boldsymbol{\epsilon}_g$, που έχει τη γυροτροπική μορφή της Εξ. (1.20), με τα στοιχεία ϵ_r, ϵ_z, ϵ_κ να δίνονται από τις Εξ. (7.1), και η συμμετρία της δομής περιγράφεται από τη μη σύμμορφη ομάδα χώρου C_4^4 (βλ. Παράρτημα Ζ′). Στο Σχ. 7.4 δείχνουμε τη φωτονική δομή ζωνών που υπολογίσαμε στην περίπτωση αυτή θεωρώντας $\omega_c = 0.01\omega_p$. Η τιμή αυτή της κυκλοτρονικής συχνότητας, αν και μια τάξη μεγέθους μικρότερη από αυτή που χρησιμοποίησαν οι Yu *et al.* [144], για μέταλλα αντιστοιχεί σε ένα απαγορευτικά ισχυρό μαγνητικό πεδίο, της τάξης των 10^3 T, αλλά για ημιαγωγούς το πεδίο αυτό είναι πολύ ασθενέστερο, της τάξης του 1 T ή και λιγότερο. Κατά τη διεύθυνση Λ οι διάφορες ζώνες δεικτοδοτούνται από την αντίστοιχη μη αναγωγίσιμη αναπαράσταση της σχετικής παραγοντικής ομάδας $\mathcal{G}(\mathbf{k})/\mathcal{T}(\mathbf{k})$ για $\mathbf{k} = (0, 0, k_z)$, που είναι η ίδια όπως στην περίπτωση χωρίς το μαγνητικό πεδίο (βλ. Πίνακα 7.1). Σύμφωνα με τη θεωρία ομάδων, πάλι, οι ζώνες κατά τη διεύθυνση αυτή είναι μη εκφυλισμένες και οι αντίστοιχες καταστάσεις Bloch χαρακτηρίζονται από διαφορετικό ποσοστό χαρακτήρα LCP και RCP που μεταβάλλεται κατά μήκος μιας ζώνης. Όμως τώρα, αφού οι παραγοντικές ομάδες που περιγράφουν τα σημεία Γ και Ζ έχουν μόνο μονοδιάστατες επιτρεπτές μη αναγωγίσιμες αναπαραστάσεις (βλ. Πίνακες 7.4 και 7.5), αίρονται όλοι οι εκφυλισμοί στα σημεία αυτά. Για παράδειγμα, όπως φαίνεται στο Σχ. 7.4, οι ζώνες 3 και 4 δεν διασταυρώνονται στο σημείο Dirac στο κέντρο της $1^{\eta\varsigma}$ ΖΒ και διαχωρίζονται, όπως μπορεί να προβλέψει κανείς βάσει ενός απλού μοντέλου [180]. Εδώ όμως οι υπολογισμοί μας δείχνουν ότι, εκτός από αυτόν τον διαχωρισμό, εκδηλώνεται σαφώς φασματική μη αντιστρεπτότητα, $\omega(\mathbf{k}) \neq \omega(-\mathbf{k})$, ως αποτέλεσμα της άρσης της συμμετρίας αντιστροφής χρόνου σε συνδυασμό με την έλλειψη συμμετρίας αντιστροφής χώρου στο συγκεκριμένο κρύσταλλο. Ας σημειωθεί ότι το αναλλοίωτο των καταστάσεων Bloch που διαφέρουν κατά ένα διάνυσμα αντιστρόφου πλέγματος, δηλαδή εδώ κατά $(0, 0, 2\pi n/d)$, $n = 0, \pm1, \pm2, \cdots$, δεν παραβιάζεται.

Στο Σχ. 7.4, δίπλα από το διάγραμμα ζωνών δείχνουμε τα αντίστοιχα φάσματα διέλευσης ενός πλακιδίου (001) του κρυστάλλου από 16 στρώματα σφαιρών, για φως LCP και RCP που προσπίπτει κατά (+) και αντίθετα προς (−) την κατεύθυνση του στατικού μαγνητικού πεδίου. Αν και δεν υπάρχει περιοχή συχνοτήτων με καταστάσεις μόνο θετικής ή αρνητικής ταχύτητας ομάδας, στην περιοχή από $0.554\omega_p$ μέχρι $0.558\omega_p$ έχουμε διέλευση επιλεκτική ως προς την πόλωση κατά μία μόνο κατεύθυνση, όπου κύματα LCP διέρχονται κυρίως προς την κατεύθυνση του στατικού μαγνητικού πεδίου ενώ κύματα RCP διέρχονται μόνο προς την αντίθετη κατεύθυνση. Ο βαθμός της μη αντιστρεπτότητας μπορεί να ποσοτικοποιηθεί από την απόλυτη τιμή της διαφοράς στη διελευσιμότητα κατά τις δύο κατευθύνσεις. Η ποσότητα αυτή, η οποία μηδενίζεται αν δεν υπάρχει μαγνητικό πεδίο, παριστάνεται στο δεξί διάγραμμα του Σχ. 7.4 και είναι πρακτικά η ίδια για φως LCP και RCP στη φασματική περιοχή που εξετάζουμε. Αξίζει να τονιστεί ότι περιοχές συχνοτήτων όπου εμφανίζεται έντονη μη αντιστρεπτή απόκριση σχετίζονται με ισχυρό εντοπισμό του ΗΜ πεδίου στις γυροτροπικές σφαίρες [126].

Πρέπει να τονιστεί ότι η ανάλυση που κάναμε βάσει της θεωρίας των μη σύμμορφων ομάδων χώρου εφαρμόζεται σε μια ευρύτερη κατηγορία φωτονικών κρυστάλλων των οποίων η ομάδα συμμετρίας περιλαμβάνει μη θεμελιώδεις μετατοπίσεις και ερμηνεύει με συνέπεια όλα τα χαρακτηριστικά του διαγράμματος διασποράς και ιδιότητες που απορρέουν. Στο πλαίσιο αυτό, ας σημειωθεί ότι, αν και υπάρχουν ενδιαφέρουσες αναλογίες μεταξύ αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς των ηλεκτρονίων και οπτικής χειρομορφίας, υπάρχει μια θεμελιώδης διαφορά ανάμεσα στα ηλεκτρόνια, τα οποία είναι φερμιόνια με σπιν $1/2$ και τα φωτόνια, που είναι μποζόνια με σπιν 1. Για ένα ηλεκτρόνιο, μια στροφή κατά 2π αλλάζει το πρόσημο της κυματοσυνάρτησης σπιν και ο ταυτοτικός μετασχηματισμός αντιστοιχεί σε στροφή κατά γωνία 4π, ενώ το διάνυσμα πόλωσης ενός φωτονίου μένει αναλλοίωτο σε στροφή κατά γωνία 2π. Συνεπώς, η συμμετρία των ενεργειακών ζωνών ηλεκτρονίων σε κρυσταλλικά στερεά, παρουσία αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς, περιγράφεται από την κατάλληλη διπλή ομάδα χώρου, ενώ οι χειρόμορφοι φωτονικοί κρύσταλλοι περιγράφονται από απλές μη σύμμορφες ομάδες χώρου.

7.2 Μη αντιστρεπτές επιφανειακές καταστάσεις σε μαγνητοπλασμονικούς κρυστάλλους

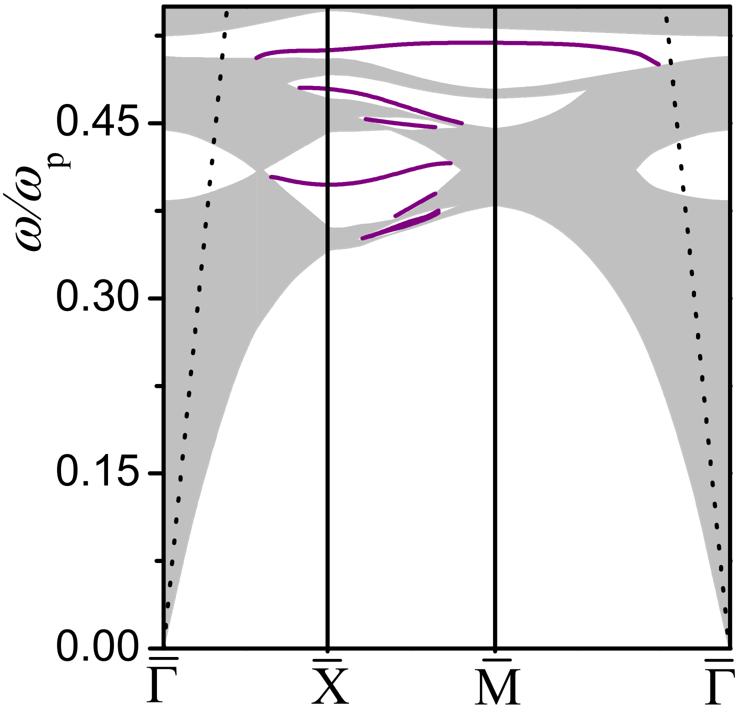
Μη αντιστρεπτές φωτονικές καταστάσεις μπορούν να εμφανιστούν και σε επιφάνειες μαγνητοπλασμονικών δομών. Ας θεωρήσουμε για παράδειγμα έναν ημιάπειρο κρύσταλλο fcc από σφαιρικά σωματίδια πλάσματος, που αναπτύσσεται κατά τη διεύθυνση [001] όπως δείχνουμε στο Σχ. 7.5. Οι σφαίρες έχουν ακτίνα $S = c/\omega_p$ και η απόσταση πλησιεστέρων γειτόνων στο πλέγμα είναι $a_0 = 2.2c/\omega_p$. Πρόσφατα έχει δειχθεί ότι σε αυτόν τον φωτονικό κρύσταλλο εμφανίζονται επιφανειακές καταστάσεις (καταστάσεις Tamm) στην επιφάνεια (001) [38]. Η καμπύλη διασποράς $\omega(\mathbf{k}_\parallel)$, όπου $\mathbf{k}_\parallel$ είναι η συνιστώσα του κυματανύσματος παράλληλη στο επίπεδο $x - y$ ανηγμένη εντός της ΕΖΒ, μιας φωτονικής κατάστασης Tamm βρίσκεται εκτός του κώνου φωτός στο περιβάλλον μέσο και συγχρόνως εντός ενός φωτονικού χάσματος του κρυστάλλου. Αυτό διασφαλίζει ότι το ΗΜ πεδίο φθίνει εκθετικά και από τις δύο πλευρές της επιφάνειας. Η καμπύλη διασποράς αυτών των επιφανειακών καταστάσεων ικανοποιεί τη συνθήκη αντιστρεπτότητας $\omega(-\mathbf{k}_\parallel) = \omega(\mathbf{k}_\parallel)$. Το Σχ. 7.6 απεικονίζει την προβολή της φωτονικής δομής ζωνών του κρυστάλλου του Σχ. 7.5 στις διευθύνσεις υψηλής συμμετρίας της ΕΖΒ για την επιφάνεια (001). Οι γκρίζες περιοχές αντιστοιχούν σε ζώνες συχνοτήτων, δηλαδή για κάθε συχνότητα εντός μιας γκρίζας περιοχής, για δεδομένη τιμή του $\mathbf{k}_\parallel$, υπάρχει τουλάχιστον μία διαδιδόμενη κατάσταση του ΗΜ πεδίου στον άπειρο κρύσταλλο. Οι λευκές περιοχές παριστάνουν φωτονικά χάσματα για το συγκεκριμένο $\mathbf{k}_\parallel$. Οι συνεχείς γραμμές σε περιοχές χασμάτων δείχνουν τις καμπύλες διασποράς των επιφανειακών καταστάσεων ενώ με εστιγμένες γραμμές σημειώνεται ο κώνος φωτός στο περιβάλλον μέσο, που είναι ο αέρας. Όπως



Σχήμα 7.5: Ένας ημιάπειρος κρύσταλλος fcc από σφαίρες πλασμονικού υλικού που περιγράφεται από τη σχετική διηλεκτρική συνάρτηση Drude (απόσταση πλησιεστέρων γειτόνων: $a_0 = 2.2c/\omega_p$, ακτίνα σφαιρών $S = c/\omega_p$), αναπτυγμένος κατά τη διεύθυνση [001], με μια επιφανειακή κατάσταση (σχηματική αναπαράσταση) και η αντίστοιχη ΕΖΒ.

βλέπουμε, οι καταστάσεις αυτές βρίσκονται πράγματι σε περιοχές χασμάτων και εκτός του κώνου φωτός, επομένως είναι πραγματικές επιφανειακές καταστάσεις που φθίνουν εκθετικά τόσο στο εσωτερικό όσο και στο εξωτερικό του κρυστάλλου.

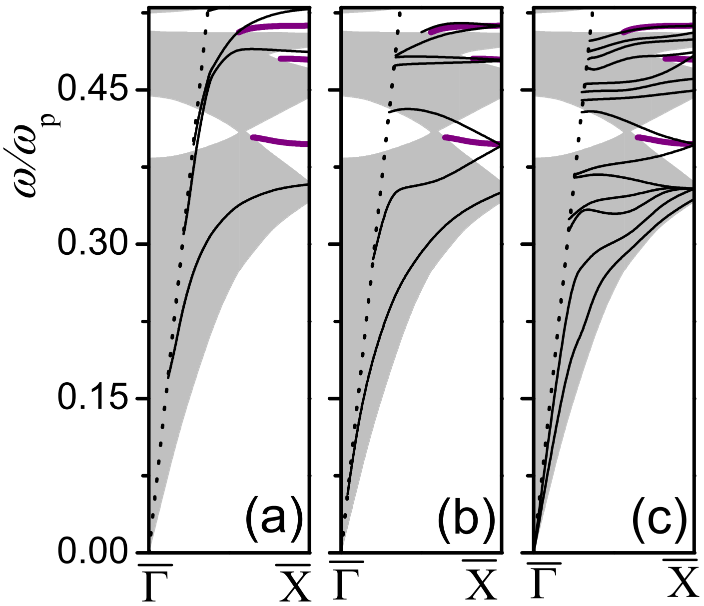
Ο σχηματισμός ζωνών και χασμάτων έξω από τον κώνο φωτός στον αέρα καθώς και των καταστάσεων Tamm στο Σχ. 7.6 μπορεί να γίνει κατανοητός αν θεωρήσουμε αντίστοιχα πεπερασμένα πλακίδια του κρυστάλλου με προοδευτικά αυξανόμενο πάχος. Το Σχ. 7.7 δείχνει τα διαγράμματα διασποράς των ιδιοκαταστάσεων πλακιδίων (001) του κρυστάλλου του Σχ. 7.5, πάχους ενός, δύο, και τεσσάρων στρωμάτων σφαιρών, κατά τη διεύθυνση $\overline{\Gamma\mathrm{X}}$. Το πεδίο που αντιστοιχεί σε αυτές τις ιδιοκαταστάσεις είναι εντοπισμένο στα συγκεκριμένα πλακίδια και φθίνει εκθετικά στον περιβάλλοντα χώρο. Όπως φαίνεται στο Σχ. 7.7, καθώς αυξάνει ο αριθμός των στρωμάτων, οι περιοχές των ζωνών του άπειρου κρυστάλλου έξω από τον κώνο φωτός στον αέρα γεμίζουν προοδευτικά με ιδιοκαταστάσεις του πλακιδίου ενώ οι περιοχές



Σχήμα 7.6: Προβολή της φωτονικής δομής ζωνών του κρυστάλλου του Σχ. 7.5 σε διευθύνσεις συμμετρίας της ΕΖΒ για την επιφάνεια (001). Οι γκρίζες και οι λευκές περιοχές αντιστοιχούν σε περιοχές ζωνών και χασμάτων, αντίστοιχα. Οι συνεχείς γραμμές σε περιοχές χασμάτων δείχνουν τις καμπύλες διασποράς των επιφανειακών καταστάσεων. Με εστιγμένες γραμμές φαίνεται ο κώνος φωτός στο εξωτερικό μέσο που είναι ο αέρας.

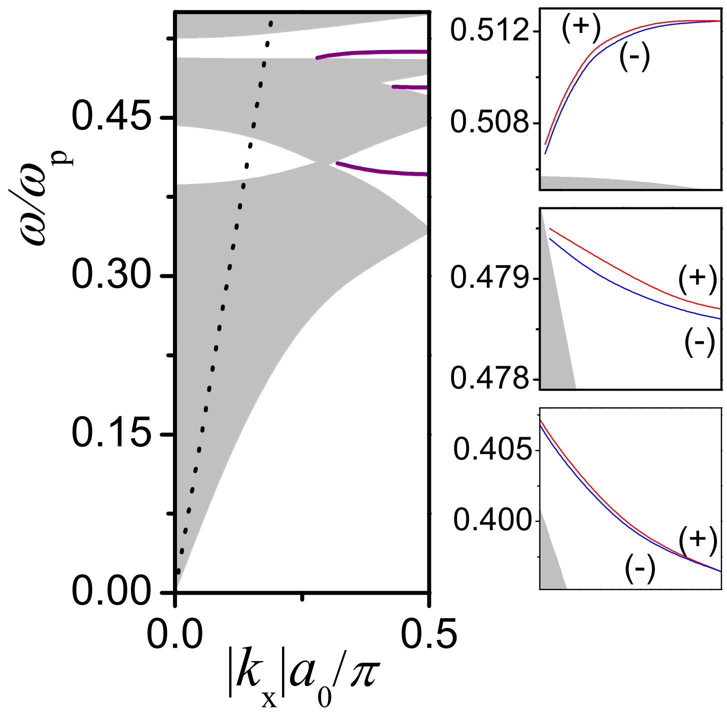
των χασμάτων παραμένουν άδειες. Επιπλέον, για ένα πολυστρωματικό πλακίδιο παίρνουμε δύο ακόμη καμπύλες διασποράς, κοντά η μία στην άλλη, που αντιστοιχούν σε καταστάσεις εντοπισμένες στις δύο επιφάνειες του πλακιδίου, όπως φαίνεται στα Σχ. 7.7(b) και 7.7(c). Καθώς ο αριθμός των στρωμάτων αυξάνει, η αλληλεπίδραση μεταξύ των καταστάσεων αυτών εξασθενεί και οι καμπύλες διασποράς τους συγκλίνουν σε αυτές των αντίστοιχων καταστάσεων Tamm του ημιάπειρου κρυστάλλου.

Στο Σχ. 7.8 απεικονίζεται το διάγραμμα διασποράς των καταστάσεων Tamm του Σχ. 7.6 κατά τη διεύθυνση $\overline{\Gamma \mathrm{X}}$ υπό την επίδραση ενός εξωτερικού στατικού ομοιογενούς μαγνητικού πεδίου, που εφαρμόζεται κατά τη διεύθυνση y (παράλληλα στην επιφάνεια) και αντιστοιχεί σε $\omega_c = 0.01\omega_p$. Η τιμή αυτή της κυκλοτρονικής συχνότητας, αν και μια τάξη μεγέθους μικρότερη από αυτή που χρησιμοποίησαν οι Yu *et al.* [144], για μέταλλα αντιστοιχεί σε ένα απαγορευτικά ισχυρό μαγνητικό πεδίο, της τάξης των 10^3 T, αλλά για ημιαγωγούς το πεδίο αυτό είναι πολύ ασθενέστερο, της τάξης του 1 T ή και λιγότερο. Ας σημειωθεί ότι, στην περίπτωση που εξετάζουμε, το στατικό μαγνητικό πεδίο δε διευθύνεται κατά τον άξονα z, που είναι εξ ορισμού η διεύθυνση ανάπτυξης του κρυστάλλου στη μέθοδο στρωματικής πολλαπλής σκέδασης. Επομένως, στους υπολογισμούς, ο πίνακας σκέδασης T πρέπει να μετασχηματι-



Σχήμα 7.7: Σχηματισμός περιοχών ζωνών και χασμάτων έξω από τον κώνο φωτός στο περιβάλλον μέσο (αέρας), καθώς και των επιφανειακών καταστάσεων του Σχ. 7.6 από τις ιδιοκαταστάσεις πεπερασμένων πλακιδίων (001) του κρυστάλλου του Σχ. 7.5, πάχους ενός (a), δύο (b), και τεσσάρων (c) στρωμάτων, κατά τη διεύθυνση $\overline{\Gamma \mathrm{X}}$.

στεί σύμφωνα με την Εξ. (2.24) χρησιμοποιώντας τις κατάλληλες γωνίες Euler $\alpha = 90°$, $\beta = 90°$, $\gamma = 0°$. Όπως φαίνεται από τη μεγέθυνση των καμπυλών διασποράς, η διάδοση των επιφανειακών καταστάσεων κάθετα στη διεύθυνση του μαγνητικού πεδίου αλλάζει και γίνεται μη αντιστρεπτή: $\omega(-k_x) \neq \omega(k_x)$. Αντιστροφή της κατεύθυνσης του μαγνητικού πεδίου έχει το ίδιο αποτέλεσμα με την αντιστροφή της κατεύθυνσης διάδοσης ($k_x \rightarrow -k_x$) ενώ, αν το μαγνητικό πεδίο είναι κάθετο στην επιφάνεια ή παράλληλο στη διεύθυνση διάδοσης, δεν εμφανίζεται μη αντιστρεπτότητα. Ως αποτέλεσμα του φασματικού διαχωρισμού των καμπυλών διασποράς για τα εμπροσθοδιαδιδόμενα και οπισθοδιαδιδόμενα κύματα, εντός μιας στενής περιοχής συχνοτήτων κοντά στα άκρα τους, υπάρχουν καταστάσεις που διαδίδονται προς μία μόνο κατεύθυνση, όπως φαίνεται στο Σχ. 7.8. Η σχετική φασματική μετατόπιση των ζωνών εξαρτάται από την ένταση του εξωτερικού πεδίου, γεγονός που επιτρέπει τη ρύθμιση επιφανειακών καταστάσεων για μονόδρομη διάδοση του φωτός. Αντίστοιχη μη αντιστρεπτή συμπεριφορά έχει αναφερθεί και σε επιφανειακές καταστάσεις μονοδιάστατων μαγνητοφωτονικών κρυστάλλων [146]. Αξίζει να σημειωθεί ότι μη αντιστρεπτότητα εμφανίζεται επίσης σε επιφανειακές καταστάσεις συντονισμού που βρίσκονται μέσα στον κώνο φωτός στο περιβάλλον μέσο και έτσι μπορούν να διεγερθούν από εξωτερικά προσπίπτον ΗΜ κύμα. Έχει δειχθεί ότι η διέγερση τέτοιων κυμάτων μπορεί να προκαλέσει υπερβολική οπτική διέλευση μέσω ενός διάτρητου μεταλλικού υμενίου σε μαγνητοοπτικό περιβάλλον, υπό πλάγια πρόσπτωση, προς μία μόνο κατεύθυνση [148]. Τέτοιες επιφανειακές καταστάσεις συντονισμού όμως δεν

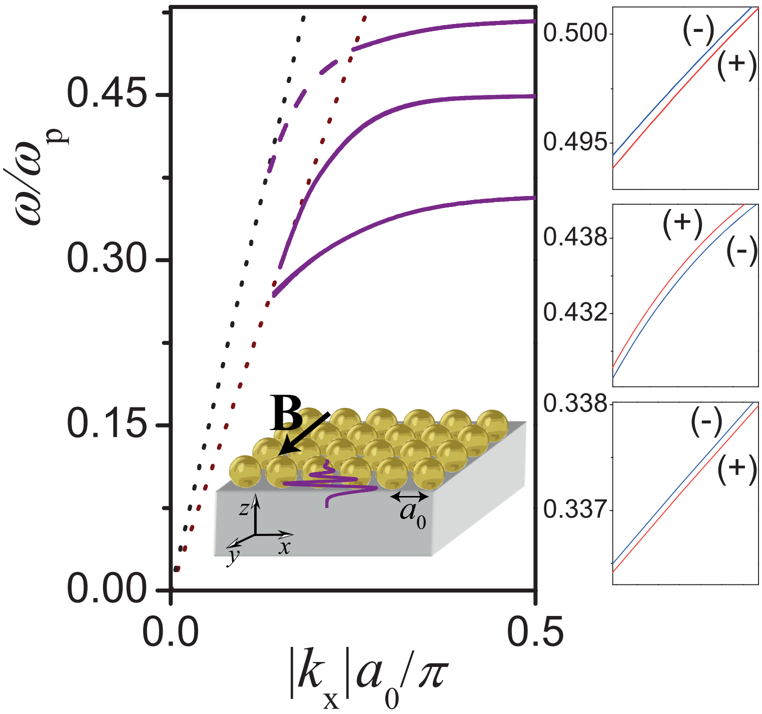


Σχήμα 7.8: Επίδραση ενός στατικού ομοιογενούς μαγνητικού πεδίου που αντιστοιχεί σε $\omega_c = 0.01\omega_p$ και εφαρμόζεται κατά τη διεύθυνση [110] του κρυστάλλου του Σχ. 7.5, η οποία λαμβάνεται κατά τον άξονα y, στις καμπύλες διασποράς των επιφανειακών καταστάσεων του Σχ. 7.6 κατά τη διεύθυνση k_x. Στα δεξιά απεικονίζεται μια μεγέθυνση αυτών των καμπυλών διασποράς, με τα πρόσημα (+) και (−) να υποδηλώνουν θετικές και αρνητικές τιμές του k_x, αντίστοιχα.

εμφανίζονται στην περίπτωση που εξετάζουμε.

Από το Σχ. 7.7(a) είναι σαφές ότι ακόμη και ένα μόνο επίπεδο σφαιρών (001) του κρυστάλλου που μελετάμε εμφανίζει εντοπισμένες καταστάσεις κυματοδηγού. Όμως, στην περίπτωση αυτή η εφαρμογή ενός στατικού ομοιογενούς μαγνητικού πεδίου δεν μπορεί να καταστήσει αυτές τις καταστάσεις μη αντιστρεπτές λόγω της ύπαρξης συμμετρίας αντιστροφής χώρου. Η συμμετρία αυτή μπορεί να αρθεί αν το επίπεδο αυτό εναποτεθεί σε ένα υπόστρωμα. Στο Σχ. 7.9 δείχνουμε το διάγραμμα διασποράς των καταστάσεων κυματοδηγού αυτού του επιπέδου σε υπόστρωμα χαλαζία ($\epsilon = 2.13$, $\mu = 1$), κατά τη διεύθυνση k_x, υπό την επίδραση ενός στατικού ομοιογενούς μαγνητικού πεδίου, που αντιστοιχεί σε $\omega_c = 0.01\omega_p$ και εφαρμόζεται κατά τον άξονα y (βλ. ένθετο στο Σχ. 7.9). Και εδώ, όπως φαίνεται από μια μεγέθυνση του διαγράμματος διασποράς, η διάδοση των καταστάσεων κυματοδηγού κάθετα στη διεύθυνση του μαγνητικού πεδίου γίνεται μη αντιστρεπτή: $\omega(-k_x) \neq \omega(k_x)$.

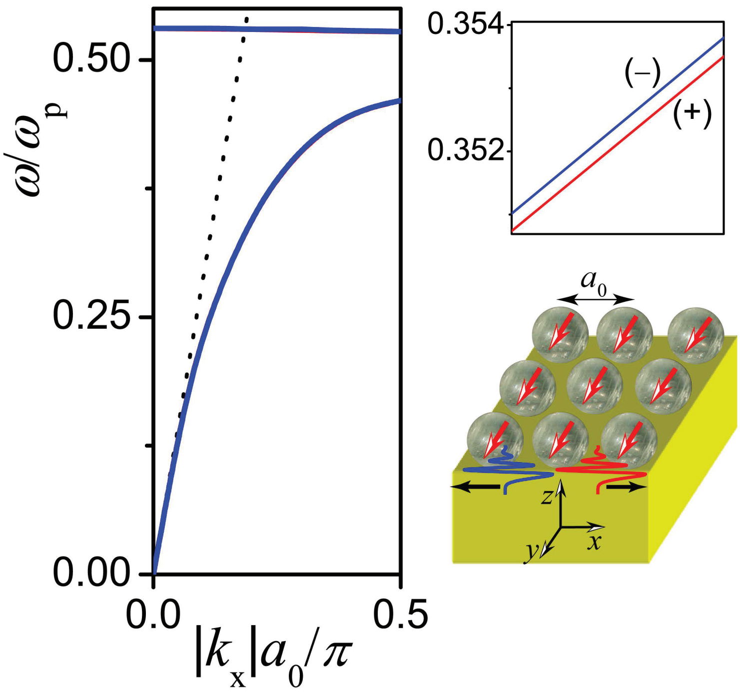
Πρέπει να τονιστεί ότι οι επίπεδες γεωμετρίες που μελετήσαμε είναι αναλλοίωτες υπό τους μετασχηματισμούς συμμετρίας της σημειακής ομάδας C_{4v}. Εάν εφαρμοστεί ένα εξωτερικό μαγνητικό πεδίο κατά τη διεύθυνση z, δηλαδή κάθετα στην επιφάνεια, η σημειακή ομάδα συρ-



Σχήμα 7.9: Διάγραμμα διασποράς κατά τη διεύθυνση k_x των καταστάσεων κυματοδηγού μιας τετραγωνικής δομής σφαιρών πλάσματος που περιγράφονται από τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude (πλεγματική σταθερά: $a_0 = 2.2c/\omega_p$, ακτίνα σφαιρών $S = c/\omega_p$), σε υπόστρωμα χαλαζία ($\epsilon = 2.13$, $\mu = 1$), υπό την επίδραση στατικού ομοιογενούς μαγνητικού πεδίου που αντιστοιχεί σε $\omega_c = 0.01\omega_p$ και εφαρμόζεται κατά τον άξονα y (βλ. ένθετο). Οι εστιγμένες γραμμές δείχνουν τους κώνους φωτός στον αέρα και στο χαλαζία. Στα δεξιά απεικονίζεται μια μεγέθυνση αυτών των καμπυλών διασποράς, με τα πρόσημα $(+)$ και $(-)$ να υποδηλώνουν θετικές και αρνητικές τιμές του k_x, αντίστοιχα.

ρικνώνεται στη C_4 διότι $\mathbf{P}\boldsymbol{\epsilon}_g\mathbf{P}^{-1} = \boldsymbol{\epsilon}_g$ μόνο για τα στοιχεία εκείνα $\widehat{\mathbf{P}}$ της C_{4v} που ανήκουν στη C_4, και η φασματική αντιστρεπτότητα $\omega(-\mathbf{k}_\parallel) = \omega(\mathbf{k}_\parallel)$ εξασφαλίζεται πάντοτε από τη στροφή κατά γωνία π περί τον άξονα z, που είναι ένας μετασχηματισμός συμμετρίας της C_4. Αν τώρα το μαγνητικό πεδίο είναι παράλληλο στο επίπεδο, π.χ. διευθύνεται κατά τον άξονα y, η σημειακή ομάδα συμμετρίας του συστήματος, C_{1h}, περιλαμβάνει μόνο την ταυτότητα και ανάκλαση ως πρός το επίπεδο $x - z$ [151]. Επομένως, αν και η αντιστρεπτότητα κατά τη διεύθυνση k_y, $\omega(-k_y) = \omega(k_y)$, εξασφαλίζεται από την κατοπτρική συμμετρία ως προς το επίπεδο $x - z$, $\omega(-k_x) \neq \omega(k_x)$ διότι δεν υπάρχει στοιχείο συμμετρίας της ομάδας που μετασχηματίζει το $(k_x, 0, 0)$ στο $(-k_x, 0, 0)$, δεδομένης φυσικά και της απουσίας συμμετρίας αντιστροφής χρόνου. Συνεπώς, στις δομές που μελετήσαμε η μη αντιστρεπτότητα εμφανίζεται στη γεωμετρία Voigt (Cotton-Mouton), για εξωτερικό μαγνητικό πεδίο παράλληλο στην επιφάνεια.

Τα μαγνητοοπτικά φαινόμενα, αφού είναι ανάλογα του μέτρου των μη διαγωνίων στοιχείων του τανυστή $\boldsymbol{\epsilon}_g$, αναμένεται να είναι πιο ισχυρά καθώς μειώνεται η συχνότητα στην περιοχή



Σχήμα 7.10: Αριστερά: Διάγραμμα διασποράς κατά τη διεύθυνση k_x των πλασμονίων στην επιφάνεια ενός ομοιογενούς υλικού που περιγράφεται από τη διηλεκτρική συνάρτηση Drude με επίστρωση από σφαίρες γρανάτη σε τετραγωνικό πλέγμα (πλεγματική σταθερά: $a_0 = 2.2c/\omega_p$, ακτίνα σφαιρών $S = c/\omega_p$) μαγνητισμένες κατά τον άξονα y. Η εστιγμένη γραμμή δείχνει τον κώνο φωτός στον αέρα. Δεξιά: Μεγέθυνση του διαγράμματος διασποράς με τα πρόσημα $(+)$ και $(-)$ να υποδηλώνουν θετικές και αρνητικές τιμές του k_x, αντίστοιχα, και σχηματική αναπαράσταση της δομής και των επιφανειακών πλασμονικών καταστάσεων.

$\omega_c \ll \omega < \omega_p$. Επομένως, εντονότερη φασματική μη αντιστρεπτότητα μπορεί να εμφανιστεί σε αντίστοιχες δομές μαγνητισμένων πλασμονικών νανοφλοιών, με βελτιστοποιημένες γεωμετρικές παραμέτρους και γεωμετρικό περιβάλλον, ώστε να εκδηλώνουν πλασμονικούς συντονισμούς σε χαμηλότερη συχνότητα.

Μια εναλλακτική σχεδίαση μη αντιστρεπτής δομής, χωρίς την ανάγκη ισχυρού εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, είναι ένα επίπεδο σωματιδίων μαγνητισμένου γρανάτη στην επιφάνεια ενός ομοιογενούς πλασμονικού υλικού. Στην περίπτωση αυτή, η μη αντιστρεπτότητα προκαλείται από τις μαγνητοοπτικές ιδιότητες του γρανάτη ο οποίος μπορεί να κορεστεί μαγνητικά με σχετικά ασθενή πεδία. Σημειώνεται ότι, μολονότι το ίδιο φαινόμενο μπορεί να επιτευχθεί και με ομοιογενή επίστρωση γυροτροπικού υλικού, ανομοιογενείς επιστρώσεις από σωματίδια προσφέρουν μεγαλύτερη ευελιξία για βελτιστοποίηση της δομής προσαρμόζοντας κατάλληλα τις διάφορες γεωμετρικές παραμέτρους, όπως μέγεθος και σχήμα σωματιδίων και αποστάσεις μεταξύ τους. Ας θεωρήσουμε για παράδειγμα ένα 2Δ πλέγμα σφαιρών γρανάτη πάνω σε μια επιφάνεια ομοιογενούς πλασμονικού υλικού, το οποίο περιγράφεται από τη σχετική διηλεκτρική συνάρτηση Drude της Εξ. (4.1) αγνοώντας τις απώλειες ($\tau^{-1} = 0$). Οι σφαίρες έχουν ακτίνα $S = c/\omega_p$ και είναι διατεταγμένες σε τετραγωνικό πλέγμα πλεγματικής σταθεράς $a_0 = 2.2c/\omega_p$. Η οπτική απόκριση των σφαιρών, αν είναι μαγνητισμένες κατά τη διεύθυνση z, περιγράφεται από ένα διηλεκτρικό τανυστή της μορφής της Εξ. (7.1) με $\epsilon = 6.25$ και $g = 0.01$, που είναι ρεαλιστικές τιμές για μαγνητισμένους γρανάτες. Στο Σχ. 7.10 απεικονίζεται το διάγραμμα διασποράς των επιφανειακών πλασμονίων στη δομή αυτή κατά τη διεύθυνση k_x αν οι σφαίρες είναι μαγνητισμένες κατά τον άξονα y. Λόγω της 2Δ περιοδικότητας της επίστρωσης, οι καμπύλες διασποράς αναδιπλώνονται μέσα στην ΕΖΒ και στις ακμές της ζώνης ανοίγουν χάσματα Bragg. Όπως φαίνεται από μια μεγέθυνση του διαγράμματος διασποράς, και στην περίπτωση αυτή, η διάδοση των επιφανειακών πλασμονίων κάθετα στη διεύθυνση του μαγνητικού πεδίου εμφανίζει μη αντιστρεπτότητα $\omega(-k_x) \neq \omega(k_x)$.

Συμπεράσματα

Σύνθετες ανισοτροπικές νανοδομές, με χειρόμορφα ή γυροτροπικά συστατικά, εμφανίζουν νέα ενδιαφέροντα φαινόμενα και προσφέρουν μοναδικές δυνατότητες για τον έλεγχο του φωτός στη νανοκλίμακα. Για τη μελέτη αυτών των δομών, επεκτάθηκε κατάλληλα η στρωματική μέθοδος πολλαπλής σκέδασης σε περιοδικές διατάξεις ισοτροπικών σωματιδίων με αξονική συμμετρία και οποιονδήποτε προσανατολισμό, σφαίρες από οπτικά ενεργό υλικό χωρίς και με επικάλυψη, καθώς και γυροτροπικές σφαίρες μαγνητισμένες κατά οποιαδήποτε διεύθυνση. Σε κρυστάλλους οπτικά ενεργών σωματιδίων διαπιστώθηκε η εμφάνιση ισχυρής κάμψης των φωτονικών ζωνών εκτός των σημείων Bragg με συνεπακόλουθη αρνητική κλίση των καμπυλών διασποράς εντός της $1^{ης}$ ΖΒ καθώς και η ύπαρξη ζωνών αργών φωτονίων και χασμάτων συχνοτήτων που επάγουν διέλευση επιλεκτική ως προς την πόλωση και αρνητική διάθλαση. Σπειρόμορφες αρχιτεκτονικές μεταλλικών νανοκυλίνδρων παρουσιάζουν ευρέα χάσματα πόλωσης, ζώνες με αρνητική ταχύτητα ομάδας που οδηγούν σε αρνητική διάθλαση, και γιγαντιαία οπτική ενεργότητα σε συνδυασμό με χαμηλές απώλειες. Τέλος, δομές γυροτροπικών σφαιρών επάγουν τεράστια στροφή Faraday και, αν δεν έχουν συμμετρία αντιστροφής χώρου, εκδηλώνουν φαινόμενα μη αντιστρεπτής οπτικής απόκρισης λόγω ταυτόχρονης απουσίας συμμετρίας αντιστροφής χρόνου εξαιτίας της παρουσίας εξωτερικού στατικού ομοιογενούς μαγνητικού πεδίου. Η στρωματική μέθοδος πολλαπλής σκέδασης είναι ιδανική για τη μελέτη σύνθετων ανισοτροπικών νανοδομών σαν αυτές που εξετάσαμε διότι είναι ταχύτατη και ελεγχόμενης ακρίβειας, επιτρέπει την ανάλυση και άμεση κατανόηση των υπεύθυνων φυσικών μηχανισμών, και περιγράφει φωτονικές διατάξεις που μπορούν να υλοποιηθούν στο εργαστήριο χρησιμοποιώντας τις ρεαλιστικές οπτικές σταθερές των συστατικών υλικών.

Παράρτημα Α΄

Διανυσματικές ταυτότητες

Μερικές χρήσιμες ταυτότητες για εκφράσεις στις οποίες υπεισέρχονται συνδυασμοί εσωτερικών και εξωτερικών γινομένων διανυσμάτων είναι οι εξής

$$\mathbf{a}\cdot(\mathbf{b}\times\mathbf{c}) = \mathbf{b}\cdot(\mathbf{c}\times\mathbf{a}) = \mathbf{c}\cdot(\mathbf{a}\times\mathbf{b}) \qquad (\text{Α}'.1)$$

$$\mathbf{a}\times(\mathbf{b}\times\mathbf{c}) = (\mathbf{a}\cdot\mathbf{c})\,\mathbf{b} - (\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})\,\mathbf{c} \qquad (\text{Α}'.2)$$

$$(\mathbf{a}\times\mathbf{b})\cdot(\mathbf{c}\times\mathbf{d}) = (\mathbf{a}\cdot\mathbf{c})\,(\mathbf{b}\cdot\mathbf{d}) - (\mathbf{a}\cdot\mathbf{d})\,(\mathbf{b}\cdot\mathbf{c}) \ . \qquad (\text{Α}'.3)$$

Η δράση των τελεστών $\nabla\cdot$ και $\nabla\times$ σε ένα διάνυσμα ή σε συνδυασμό δύο διανυσμάτων ή ενός διανύσματος και ενός βαθμωτού μεγέθους ϕ περιγράφεται από τις ταυτότητες

$$\nabla\times\nabla\phi = 0 \qquad (\text{Α}'.4)$$

$$\nabla\cdot(\nabla\times\mathbf{a}) = 0 \qquad (\text{Α}'.5)$$

$$\nabla\times(\nabla\times\mathbf{a}) = \nabla\,(\nabla\cdot\mathbf{a}) - \nabla^2\mathbf{a} \qquad (\text{Α}'.6)$$

$$\nabla\cdot(\phi\mathbf{a}) = \mathbf{a}\cdot\nabla\phi + \phi\nabla\cdot\mathbf{a} \qquad (\text{Α}'.7)$$

$$\nabla\times(\phi\mathbf{a}) = \nabla\phi\times\mathbf{a} + \phi\nabla\times\mathbf{a} \qquad (\text{Α}'.8)$$

$$\nabla\,(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}) = (\mathbf{a}\cdot\nabla)\,\mathbf{b} + (\mathbf{b}\cdot\nabla)\,\mathbf{a} + \mathbf{a}\times(\nabla\times\mathbf{b}) + \mathbf{b}\times(\nabla\times\mathbf{a}) \qquad (\text{Α}'.9)$$

$$\nabla\cdot(\mathbf{a}\times\mathbf{b}) = \mathbf{b}\cdot(\nabla\times\mathbf{a}) - \mathbf{a}\cdot(\nabla\times\mathbf{b}) \qquad (\text{Α}'.10)$$

$$\nabla\times(\mathbf{a}\times\mathbf{b}) = \mathbf{a}\,(\nabla\cdot\mathbf{b}) - \mathbf{b}\,(\nabla\cdot\mathbf{a}) + (\mathbf{b}\cdot\nabla)\,\mathbf{a} - (\mathbf{a}\cdot\nabla)\,\mathbf{b} \ . \qquad (\text{Α}'.11)$$

Στη συνέχεια παραθέτουμε μερικά χρήσιμα θεωρήματα που συνδέουν ολοκληρώματα εντός όγκου V που περικλείεται από κλειστή επιφάνεια A με αντίστοιχα επιφανειακά ολοκληρώματα. Το μοναδιαίο διάνυσμα $\widehat{\mathbf{n}}$ είναι κάθετο στην A και κατευθύνεται προς τα έξω.

Θεώρημα της απόκλισης:

$$\int_V d^3r\nabla\phi = \int_A d^2r\widehat{\mathbf{n}}\phi \ . \qquad (\text{Α}'.12)$$

Θεώρημα Gauss:

$$\int_V d^3r\nabla\cdot\mathbf{a} = \int_A d^2r\widehat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{a} \ . \qquad (\text{Α}'.13)$$

Θεώρημα Stokes:

$$\int_V d^3r \nabla \times \mathbf{a} = \int_A d^2r \widehat{\mathbf{n}} \times \mathbf{a} \ . \tag{A′.14}$$

1$^{\text{o}}$Θεώρημα Green:

$$\int_V d^3r \big[\phi_1 \nabla^2 \phi_2 + \nabla\phi_1 \cdot \nabla\phi_2\big] = \int_A d^2r \widehat{\mathbf{n}} \cdot \phi_1 \nabla\phi_2 \ . \tag{A′.15}$$

2$^{\text{o}}$Θεώρημα Green:

$$\int_V d^3r \big[\phi_1 \nabla^2 \phi_2 - \nabla\phi_1 \cdot \nabla\phi_2\big] = \int_A d^2r \widehat{\mathbf{n}} \cdot \big[\phi_1 \nabla\phi_2 - \phi_2 \nabla\phi_1\big] \tag{A′.16}$$

Διανυσματικό θεώρημα Green:

$$\int_V d^3r \big[\mathbf{a}\cdot\nabla\times(\nabla\times\mathbf{b}) - \mathbf{b}\cdot\nabla\times(\nabla\times\mathbf{a})\big] = -\int_A d^2r \big[\mathbf{b}\cdot\widehat{\mathbf{n}}\times(\nabla\times\mathbf{a}) + (\nabla\times\mathbf{b})\cdot(\widehat{\mathbf{n}}\times\mathbf{a})\big] \ . \tag{A′.17}$$

Η Εξ. (Α′.17) αποδεικνύεται αν εφαρμόσουμε το θεώρημα Gauss (Α′.13) για το διάνυσμα $\mathbf{b} \times (\nabla \times \mathbf{a}) - \mathbf{a} \times (\nabla \times \mathbf{b})$ αντί για το $\mathbf{a}$ και χρησιμοποιήσουμε κατάλληλες διανυσματικές ταυτότητες. Η Εξ. (Α′.17) γενικεύεται και στην περίπτωση όπου στη θέση του διανύσματος $\mathbf{b}$ έχουμε ένα δυαδικό τανυστή $\mathbf{B}$. Πράγματι, γράφοντας εν γένει $\mathbf{b} = \mathbf{B}\cdot\widehat{\mathbf{c}}$, όπου $\widehat{\mathbf{c}}$ μοναδιαίο διάνυσμα, η Εξ. (Α′.17) μας δίνει

$$\left\{ \int_V d^3r \Big\{\mathbf{a}\cdot\big[\nabla\times(\nabla\times\mathbf{B})\big] - \big[\nabla\times(\nabla\times\mathbf{a})\big]\cdot\mathbf{B}\Big\} + \int_A d^2r \Big\{\big[\widehat{\mathbf{n}}\times(\nabla\times\mathbf{a})\big]\cdot\mathbf{B} + (\widehat{\mathbf{n}}\times\mathbf{a})\cdot(\nabla\times\mathbf{B})\Big\} \right\}\cdot\widehat{\mathbf{c}} = 0 \ .$$

και επειδή η εξίσωση αυτή ισχύει για κάθε $\widehat{\mathbf{c}}$ έχουμε

$$\int_V d^3r \Big\{\mathbf{a}\cdot\big[\nabla\times(\nabla\times\mathbf{B})\big] - \big[\nabla\times(\nabla\times\mathbf{a})\big]\cdot\mathbf{B}\Big\} = -\int_A d^2r \Big\{\big[\widehat{\mathbf{n}}\times(\nabla\times\mathbf{a})\big]\cdot\mathbf{B} + (\widehat{\mathbf{n}}\times\mathbf{a})\cdot(\nabla\times\mathbf{B})\Big\} \ . \tag{A′.18}$$

Εδώ πρέπει να διευκρινίσουμε ότι το εσωτερικό γινόμενο ενός διανύσματος με ένα δυαδικό τανυστή επενεργεί με εσωτερικό γινόμενο του διανύσματος με τη συνιστώσα του τανυστή που είναι δίπλα του. Δηλαδή, αν $\mathbf{B} = \mathbf{b_1 b_2}$, τότε $\mathbf{a}\cdot\mathbf{B} = (\mathbf{a}\cdot\mathbf{b_1})\mathbf{b_2}$ και $\mathbf{B}\cdot\mathbf{a} = \mathbf{b_1}(\mathbf{b_2}\cdot\mathbf{a})$. Επίσης ο στροβιλισμός ενός δυαδικού τανυστή εννοείται ως πολλαπλασιασμός πινάκων 3×3

$$\nabla \times \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & -\partial_z & \partial_y \\ \partial_z & 0 & -\partial_x \\ -\partial_y & \partial_x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{1x}b_{2x} & b_{1x}b_{2y} & b_{1x}b_{2z} \\ b_{1y}b_{2x} & b_{1y}b_{2y} & b_{1y}b_{2z} \\ b_{1z}b_{2x} & b_{1z}b_{2y} & b_{1z}b_{2z} \end{pmatrix} \ . \tag{A′.19}$$

Παράρτημα Β΄

Σφαιρικές αρμονικές

Οι σφαιρικές αρμονικές, $Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})$, αποτελούν το γωνιακό τμήμα των λύσεων της εξίσωσης Helmholtz και ικανοποιούν τη διαφορική εξίσωση

$$\begin{aligned} \nabla^2 Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) &= \left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\mathbf{L}^2}{r^2}\right] Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) = \\ &= -\frac{\mathbf{L}^2}{r^2} Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) = -\frac{l\,(l+1)}{r^2} Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}), \end{aligned} \tag{B΄.1}$$

όπου $\mathbf{L}$ είναι ο τελεστής της στροφορμής,

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= -i\,(\mathbf{r}\times\nabla) = i\left(\widehat{\boldsymbol{\theta}}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \widehat{\boldsymbol{\phi}}\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \\ \mathbf{L}^2 &= -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\ , \end{aligned} \tag{B΄.2}$$

και το όρισμα $\widehat{\mathbf{r}}$ δηλώνει την εξάρτηση του διανύσματος $\mathbf{r}$ από τις γωνίες θ και ϕ στις σφαιρικές συντεταγμένες. Οι $Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})$ δίνονται από την έκφραση

$$Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) = (-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\;P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi}, \tag{B΄.3}$$

με $l = 0, 1, \ldots$, $m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$ και $P_l^m(\cos\theta)$ τα προσαρτημένα πολυώνυμα Legendre

$$P_l^m(x) = \frac{1}{2^l l!}\left(1-x^2\right)^{m/2}\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}\left(x^2-1\right)^l, \quad x = \cos\theta \tag{B΄.4}$$

για $m > 0$, ενώ για $m < 0$ ορίζονται από την

$$P_l^{-m}(x) = (-1)^m\,\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\;P_l^m(x). \tag{B΄.5}$$

Από τις παραπάνω προκύπτει

$$Y_{lm}^*(\widehat{\mathbf{r}}) = (-1)^m\,Y_{l-m}(\widehat{\mathbf{r}}), \tag{B΄.6}$$

και

$$Y_{lm}(-\widehat{\mathbf{r}}) = (-1)^l \, Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) \tag{B′.7}$$

$$Y_{lm}(\theta = 0, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \, \delta_{m0}. \tag{B′.8}$$

Οι $Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})$ πληρούν τις σχέσεις ορθογωνιότητας και πληρότητας

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \; Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) Y^*_{l'm'}(\widehat{\mathbf{r}}) = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{B′.9}$$

$$\sum_{lm} Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}') = \delta\left(\widehat{\mathbf{r}} - \widehat{\mathbf{r}}'\right), \tag{B′.10}$$

το θεώρημα άθροισης

$$\sum_{m=-l}^{l} |Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})|^2 = \frac{2l+1}{4\pi}, \tag{B′.11}$$

μια σειρά σχέσεων που συνδέουν σφαιρικές αρμονικές διάφορων τάξεων

$$\begin{aligned}
\cos\theta Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) &= \zeta^m_{l+1} Y_{l+1m}(\widehat{\mathbf{r}}) + \zeta^m_l Y_{l-1m}(\widehat{\mathbf{r}}) && \text{(B′.12)}\\
e^{i\phi}\sin\theta Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) &= 2\left[\gamma^{-m}_l Y_{l-1m+1}(\widehat{\mathbf{r}}) - \gamma^{m+1}_{l+1} Y_{l+1m+1}(\widehat{\mathbf{r}})\right] && \text{(B′.13)}\\
e^{-i\phi}\sin\theta Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) &= 2\left[\gamma^{-m+1}_{l+1} Y_{l+1m-1}(\widehat{\mathbf{r}}) - \gamma^m_l Y_{l-1m-1}(\widehat{\mathbf{r}})\right] && \text{(B′.14)}\\
m\cot\theta Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) &= -\left[\alpha^m_l e^{-i\phi} Y_{lm+1}(\widehat{\mathbf{r}}) + \alpha^{-m}_l e^{i\phi} Y_{lm-1}(\widehat{\mathbf{r}})\right], && \text{(B′.15)}
\end{aligned}$$

καθώς και τις

$$\begin{aligned}
\frac{\partial Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})}{\partial\theta} &= \alpha^m_l e^{-i\phi} Y_{lm+1}(\widehat{\mathbf{r}}) - \alpha^{-m}_l e^{i\phi} Y_{lm-1}(\widehat{\mathbf{r}}) && \text{(B′.16)}\\
&= i\psi_l \; X_{lm,\phi}(\widehat{\mathbf{r}}) && \text{(B′.17)}\\
\frac{\partial Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})}{\partial\phi} &= im \; Y_{lm}(\mathbf{r}) && \text{(B′.18)}\\
&= -i\psi_l \; \sin\theta \; X_{lm,\theta}(\widehat{\mathbf{r}}) \; . && \text{(B′.19)}
\end{aligned}$$

Τέλος, ισχύει

$$\begin{aligned}
\nabla\left[f_l(qr) Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\right] &= f_l(qr)\nabla Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) + q f_l^{'}(qr) Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) \; \widehat{\mathbf{r}}\\
&= i\psi_l \frac{f_l(qr)}{r}\left[X_{lm,\phi}(\widehat{\mathbf{r}})\widehat{\boldsymbol{\theta}} - X_{lm,\theta}(\widehat{\mathbf{r}})\widehat{\boldsymbol{\phi}}\right]\\
&\quad + q f_l^{'}(qr) Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) \; \widehat{\mathbf{r}}. && \text{(B′.20)}
\end{aligned}$$

Στις παραπάνω σχέσεις

$$\psi_l = \sqrt{l\,(l+1)} \tag{B′.21}$$

$$\alpha^m_l = \frac{1}{2}\left[(l-m)\,(l+m+1)\right]^{1/2} \tag{B′.22}$$

$$\gamma_l^m = \frac{\left[(l+m)\,(l+m-1)\right]^{1/2}}{2\left[(2l-1)\,(2l+1)\right]^{1/2}} \tag{Β΄.23}$$

$$\zeta_l^m = \frac{\left[(l+m)\,(l-m)\right]^{1/2}}{\left[(2l-1)\,(2l+1)\right]^{1/2}}, \tag{Β΄.24}$$

και $X_{lm,\theta}(\widehat{\mathbf{r}})$, $X_{lm,\phi}(\widehat{\mathbf{r}})$ είναι οι συνιστώσες των διανυσματικών σφαιρικών αρμονικών, $\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})$, που ορίζονται από την

$$\psi_l \mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) = \mathbf{L} Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) \equiv -i\mathbf{r} \times \nabla Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) \ . \tag{Β΄.25}$$

Εξ ορισμού, $\mathbf{X}_{00}(\widehat{\mathbf{r}}) = 0$, ενώ για $l \geq 1$

$$\begin{aligned} \psi_l \mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) &= \left[\alpha_l^{-m} \cos\theta e^{i\phi} Y_{lm-1}(\widehat{\mathbf{r}}) - m \sin\theta Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) + \alpha_l^m \cos\theta e^{-i\phi} Y_{lm+1}(\widehat{\mathbf{r}})\right] \widehat{\boldsymbol{\theta}} \\ &\quad + i\left[\alpha_l^{-m} e^{i\phi} Y_{lm-1}(\widehat{\mathbf{r}}) - \alpha_l^m e^{-i\phi} Y_{lm+1}(\widehat{\mathbf{r}})\right] \widehat{\boldsymbol{\phi}} \qquad (\text{Β΄.26}) \\ &= \alpha_l^{-m} Y_{lm-1}(\widehat{\mathbf{r}})\,(\widehat{\mathbf{x}} + i\widehat{\mathbf{y}}) + m Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\,\widehat{\mathbf{z}} + \alpha_l^m Y_{lm+1}(\widehat{\mathbf{r}})\,(\widehat{\mathbf{x}} - i\widehat{\mathbf{y}}) \ . \qquad (\text{Β΄.27}) \end{aligned}$$

Από τις $\mathbf{L}^2 Y_{lm} = l(l+1) Y_{lm}$ και $\mathbf{L}^2\mathbf{L} = \mathbf{L}\mathbf{L}^2$ θα ισχύει $\mathbf{L}^2 \mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) = l(l+1)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})$. Από τις Εξ. (Β΄.25) προκύπτει ότι

$$\mathbf{X}_{lm}^*(\widehat{\mathbf{r}}) = (-1)^{m+1}\,\mathbf{X}_{l-m}(\widehat{\mathbf{r}}), \tag{Β΄.28}$$

$$\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) \times \widehat{\mathbf{r}} = X_{lm,\phi}(\widehat{\mathbf{r}})\,\widehat{\boldsymbol{\theta}} - X_{lm,\theta}(\widehat{\mathbf{r}})\,\widehat{\boldsymbol{\phi}} = -\frac{ir\nabla Y_{lm}}{\psi_l} \ , \tag{Β΄.29}$$

και

$$\widehat{\mathbf{r}} \times \left[\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) \times \widehat{\mathbf{r}}\right] = \mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}). \tag{Β΄.30}$$

Η δράση των τελεστών $\nabla\times$ και $\nabla\cdot$ στις $\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})$ περιγράφεται από τις

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) &= \frac{1}{r}\left[i\psi_l Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\,\widehat{\mathbf{r}} - X_{lm,\phi}(\widehat{\mathbf{r}})\,\widehat{\boldsymbol{\theta}} + X_{lm,\theta}(\widehat{\mathbf{r}})\,\widehat{\boldsymbol{\phi}}\right] \\ &= \frac{1}{r}\left[i\psi_l Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\,\widehat{\mathbf{r}} - \mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) \times \widehat{\mathbf{r}}\right] \\ &= \frac{i}{\psi_l}\left[\frac{\psi_l^2}{r} Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\,\widehat{\mathbf{r}} + \nabla Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\right] \end{aligned} \tag{Β΄.31}$$

και

$$\nabla \cdot \mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) = 0, \tag{Β΄.32}$$

ενώ με τη βοήθειά τους προκύπτουν οι

$$\nabla \times f_l(x)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) = q\left\{i\psi_l \frac{f_l(x)}{x} Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\,\widehat{\mathbf{r}} - \left[f_l'(x) + \frac{f_l(x)}{x}\right]\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) \times \widehat{\mathbf{r}}\right\} \tag{Β΄.33}$$

$$\nabla \cdot \left[f_l(x)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\right] = 0 \tag{Β΄.34}$$

$$\nabla^2 \left[f_l(x)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\right] = -\nabla \times \left[\nabla \times f_l(x)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\right] = -q^2 f_l(x)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}), \tag{Β΄.35}$$

με $x = qr$. Για την τελευταία χρησιμοποιήσαμε τη σχέση

$$\nabla\left\{\nabla \cdot \left[f_l(x)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\right]\right\} = \nabla\left[\nabla f_l(x) \cdot \mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) + f_l(x)\nabla \cdot \mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\right] =$$

$$= \nabla\left[\nabla f_l(x)\cdot \mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\right] = 0. \quad \text{(B}'\text{.36)}$$

Οι διανυσματικές σφαιρικές αρμονικές πληρούν τις σχέσεις ορθογωνιότητας

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\, \mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\cdot \mathbf{X}^*_{l'm'}(\widehat{\mathbf{r}}) = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \quad \text{(B}'\text{.37)}$$

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\, \mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\cdot \left[\widehat{\mathbf{r}}\times \mathbf{X}^*_{l'm'}(\widehat{\mathbf{r}})\right] = 0, \quad \text{(B}'\text{.38)}$$

από όπου προκύπτει

$$\begin{aligned} \sum_{lm}\left\{\mathcal{A}^{(1)}_{lm}(r)\mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) + \mathcal{A}^{(2)}_{lm}(r)\left[\widehat{\mathbf{r}}\times \mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\right]\right\} &= 0 \Rightarrow \\ \mathcal{A}^{(1)}_{lm}(r) = \mathcal{A}^{(2)}_{lm}(r) &= 0\,. \end{aligned} \quad \text{(B}'\text{.39)}$$

Τέλος, μπορεί να δειχθεί ότι

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\, \mathbf{X}_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\cdot \nabla\left[f_l(r)\mathbf{X}^*_{l'm'}(\widehat{\mathbf{r}})\right] = 0, \quad \text{(B}'\text{.40)}$$

και με τη βοήθεια των Εξ. (B′.9) και (B′.27) ότι

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\, Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\mathbf{X}^*_{l'm'}(\mathbf{r}) &= \frac{\delta_{ll'}}{\psi_l}\Big[\delta_{m+1m'}\alpha^{-m'}_{l'}\left(\widehat{\mathbf{x}} - i\widehat{\mathbf{y}}\right) + \\ &+ \delta_{mm'}m\,\widehat{\mathbf{z}} + \delta_{m-1m'}\alpha^{m'}_{l'}\left(\widehat{\mathbf{x}} + i\widehat{\mathbf{y}}\right)\Big] \end{aligned} \quad \text{(B}'\text{.41)}$$

και

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\, Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})Y^*_{l'm'}(\widehat{\mathbf{r}})\,\widehat{\mathbf{r}} &= \delta_{m+1m'}\left(-\gamma^{m+1}_{l+1}\delta_{l+1l'} + \gamma^{-m}_{l}\delta_{l-1l'}\right)\left(\widehat{\mathbf{x}} - i\widehat{\mathbf{y}}\right) + \\ &+ \delta_{m-1m'}\left(\gamma^{-m+1}_{l+1}\delta_{l+1l'} - \gamma^{m}_{l}\delta_{l-1l'}\right)\left(\widehat{\mathbf{x}} + i\widehat{\mathbf{y}}\right) + \\ &+ \delta_{mm'}\left(\zeta^{m}_{l+1}\delta_{l+1l'} + \zeta^{m}_{l}\delta_{l-1l'}\right)\widehat{\mathbf{z}}. \end{aligned} \quad \text{(B}'\text{.42)}$$

Παράρτημα Γ′

Συναρτήσεις Bessel

Η εξίσωση Laplace για βαθμωτά πεδία, $\nabla^2 F(\mathbf{r}) = 0$, σε κυλινδρικές συντεταγμένες επιδέχεται λύσεις της μορφής $F(\mathbf{r}) = F_\nu(x)\exp(\pm qz + i\nu\phi)$, όπου $\mathbf{r} = (\rho, \phi, z)$ το διάνυσμα θέσης σε κυλινδρικές συντεταγμένες, $x = q\rho$, και $F_\nu(x)$ η ακτινική λύση, που δίνεται από την εξίσωση Bessel,

$$F_\nu''(x) + \frac{1}{x}F_\nu'(x) + \left(1 - \frac{\nu^2}{x^2}\right)F_\nu(x) = 0 \ , \tag{Γ′.1}$$

όπου ο τόνος συμβολίζει παραγώγιση ως προς το όρισμα της συνάρτησης. Η Εξ. (Γ′.1) είναι μια γραμμική διαφορική εξίσωση δεύτερης τάξης και έχει, για συγκεκριμένη τιμή του ν, δύο γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις. Για μη ακέραιες τιμές του ν, δύο γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις είναι οι συναρτήσεις Bessel πρώτου είδους τάξης $\pm\nu$

$$J_{\pm\nu}(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^{\pm\nu} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{s!\Gamma(s \pm \nu + 1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2s} \ . \tag{Γ′.2}$$

Για ακέραιες τιμές του $\nu(= n)$ ισχύει

$$J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x) \ , \tag{Γ′.3}$$

και μια δεύτερη γραμμικά ανεξάρτητη λύση είναι η συνάρτηση Bessel δεύτερου είδους,

$$N_\nu(x) = \frac{J_\nu(x)\cos(\nu\pi) - J_{-\nu}(x)}{\sin(\nu\pi)} \ , \tag{Γ′.4}$$

η οποία υπολογίζεται οριακά για $\nu \to n$. Από όλες τις δυνατές λύσεις της Εξ. (Γ′.1) μόνο η συνάρτηση Bessel πρώτου είδους δεν απειρίζεται στο $x = 0$. Οι συναρτήσεις Bessel πληρούν τις αναγωγικές σχέσεις

$$F_{\nu-1}(x) + F_{\nu+1}(x) = \frac{2\nu}{x}F_\nu(x) \tag{Γ′.5}$$

$$F_{\nu-1}(x) - F_{\nu+1}(x) = 2F_\nu'(x) \ . \tag{Γ′.6}$$

Οι συναρτήσεις Bessel πρώτου είδους μπορούν να υπολογιστούν και από τις ολοκληρωτικές εκφράσεις

$$J_\nu(x) = \frac{1}{\pi}\int_0^\pi d\phi \cos(x\sin\phi - \nu\phi) \tag{Γ′.7}$$

$$= \frac{1}{\pi i^\nu}\int_0^\pi d\phi \exp(ix\cos\phi)\cos(\nu\phi) \quad (\Gamma'.8)$$

$$= \frac{1}{2\pi i^\nu}\int_0^{2\pi} d\phi \exp(i[z\cos\phi+\nu\phi])\ , \quad (\Gamma'.9)$$

ενώ ικανοποιούν τις αθροιστικές ταυτότητες

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n^2(x) = 1 \quad (\Gamma'.10)$$

και

$$\exp(ix\cos\phi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n J_n(x)\exp(in\phi)\ . \quad (\Gamma'.11)$$

Η εξίσωση Helmholtz για βαθμωτά πεδία, $\nabla^2 F(\mathbf{r}) + q^2 F(\mathbf{r}) = 0$, επιδέχεται λύσεις της μορφής $F(\mathbf{r}) = \sum_{lm} f_l(qr) Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})$, όπου $Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})$ είναι οι σφαιρικές αρμονικές (βλ. Παράρτημα Β′), με το $\widehat{\mathbf{r}}$ να δηλώνει την εξάρτηση του διανύσματος $\mathbf{r}$ από τις γωνίες θ, ϕ στις σφαιρικές συντεταγμένες, και $f_l(qr)$ είναι το ακτινικό τμήμα των λύσεων της εξίσωσης Helmholtz

$$\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + q^2 - \frac{l\,(l+1)}{r^2}\right] f_l(qr) = 0\ , \quad (\Gamma'.12)$$

ή, ισοδύναμα,

$$f_l''(x) + \frac{2}{x} f_l'(x) + \left[1 - \frac{l\,(l+1)}{x^2}\right] f_l(x) = 0 \quad (\Gamma'.13)$$

με $x = qr$, αν εκφράσουμε τον τελεστή ∇^2 σε σφαιρικές συντεταγμένες. Η Εξ. (Γ′.13) έχει, για συγκεκριμένη τιμή του l, δύο γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις. Γνωστές μορφές τέτοιων λύσεων είναι οι σφαιρικές συναρτήσεις Bessel, Neumann, και Hankel πρώτου ή δεύτερου είδους, που δίνονται αντίστοιχα από τις

$$j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+1/2}(x) = (2x)^l \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s\,(s+l)!}{s!\,(2s+2l+1)!}\ x^{2s} \quad (\Gamma'.14)$$

$$n_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} N_{l+1/2}(x) = 2\,(-2x)^{-l-1} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s\,(s-l)!}{s!\,(2s-2l)!}\ x^{2s} \quad (\Gamma'.15)$$

$$h_l^+(x) = j_l(x) + i\ n_l(x) \quad (\Gamma'.16)$$

$$h_l^-(x) = j_l(x) - i\ n_l(x)\ . \quad (\Gamma'.17)$$

Από όλες τις λύσεις, μόνο η $j_l(x)$ δεν απειρίζεται στο $x = 0$. Για όλες αυτές τις λύσεις ισχύουν οι αναγωγικές σχέσεις

$$x f_l'(x) = l f_l(x) - x f_{l+1}(x) \quad (\Gamma'.18)$$

$$(2l+1)\, f_l(x) = x f_{l-1}(x) + x f_{l+1}(x) \quad (\Gamma'.19)$$

$$x f_{l-1}(x) = x f_l'(x) + (l+1)\, f_l(x) \quad (\Gamma'.20)$$

$$(2l+1)\, f_l'(x) = l f_{l-1}(x) - (l+1)\, f_{l+1}(x)\ . \quad (\Gamma'.21)$$

Συχνά είναι χρήσιμη είναι και η ορίζουσα Wronski,

$$\begin{vmatrix} j_l(x) & n_l(x) \\ j_l'(x) & n_l'(x) \end{vmatrix} = \frac{1}{x^2} \; . \qquad (\Gamma'.22)$$

Η ασυμπτωτική συμπεριφορά των σφαιρικών συναρτήσεων Bessel, Neumann και Hankel ($x \gg 1$) είναι

$$j_l(x \gg 1) \sim \frac{1}{x}\sin(x - \frac{l\pi}{2}) \qquad (\Gamma'.23)$$

$$n_l(x \gg 1) \sim -\frac{1}{x}\cos(x - \frac{l\pi}{2}) \qquad (\Gamma'.24)$$

$$h_l^+(x \gg 1) \sim (-i)^{l+1}\,\frac{e^{ix}}{x} \qquad (\Gamma'.25)$$

$$h_l^-(x \gg 1) \sim i^{l+1}\frac{e^{-ix}}{x} \; , \qquad (\Gamma'.26)$$

ενώ για μικρά ορίσματα ($x \ll 1$) ισχύουν οι

$$j_l(x \ll 1) \sim \frac{x^l}{(2l+1)!!} \qquad (\Gamma'.27)$$

$$n_l(x \ll 1) \sim -\frac{(2l-1)!!}{x^{l+1}} \; . \qquad (\Gamma'.28)$$

Παράρτημα Δ′

Υπολογισμός των συντελεστών $\tilde{g}_{lm}^{l'm'}$, $\overline{g}_{lm}^{l'm'}$, $\tilde{e}_{lm}^{l'm'}$, $\overline{e}_{lm}^{l'm'}$, $\tilde{f}_{lm}^{l'm'}$, $\overline{f}_{lm}^{l'm'}$

Στο παράρτημα αυτό βρίσκουμε αναλυτικές εκφράσεις για τους συντελεστές $\tilde{g}_{lm}^{l'm'}$, $\overline{g}_{lm}^{l'm'}$, $\tilde{e}_{lm}^{l'm'}$, $\overline{e}_{lm}^{l'm'}$, $\tilde{f}_{lm}^{l'm'}$, $\overline{f}_{lm}^{l'm'}$, που υπεισέρχονται στο ανάπτυγμα (1.44) μέσω των Εξ. (1.45).

Εύκολα μπορεί να δειχθεί ότι

$$\epsilon_z \boldsymbol{\epsilon}_g^{-1} = \begin{pmatrix} \epsilon'_r & -i\epsilon'_\kappa & 0 \\ i\epsilon'_\kappa & \epsilon'_r & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{Δ′.1}$$

που σε δυαδική μορφή γράφεται

$$\epsilon_z \boldsymbol{\epsilon}_g^{-1} = (\epsilon'_r - \epsilon'_\kappa)\widehat{\mathbf{e}}_-\widehat{\mathbf{e}}_+ + (\epsilon'_r + \epsilon'_\kappa)\widehat{\mathbf{e}}_+\widehat{\mathbf{e}}_- + \widehat{\mathbf{e}}_0\widehat{\mathbf{e}}_0 \ , \tag{Δ′.2}$$

όπου $\epsilon'_r = \epsilon_r/(\epsilon_r^2 - \epsilon_\kappa^2)$ και $\epsilon'_\kappa = -\epsilon_\kappa/(\epsilon_r^2 - \epsilon_\kappa^2)$ και $\widehat{\mathbf{e}}_+ = (\widehat{\mathbf{x}} + i\widehat{\mathbf{y}})/\sqrt{2}$, $\widehat{\mathbf{e}}_0 = \widehat{\mathbf{z}}$, $\widehat{\mathbf{e}}_- = (\widehat{\mathbf{x}} - i\widehat{\mathbf{y}})/\sqrt{2}$. Χρησιμοποιώντας τα $\widehat{\mathbf{e}}_\pm$ και $\widehat{\mathbf{e}}_0$, οι διανυσματικές σφαιρικές κυματοσυναρτήσεις γράφονται στη μορφή

$$\mathbf{F}_{Hlm}(\mathbf{r}) = \frac{f_l(qr)}{\psi_l}(\sqrt{2}\alpha_l^{-m}Y_{lm-1}(\widehat{\mathbf{r}})\widehat{\mathbf{e}}_+ + \sqrt{2}\alpha_l^{m}Y_{lm+1}(\widehat{\mathbf{r}})\widehat{\mathbf{e}}_- + mY_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\widehat{\mathbf{e}}_0) \tag{Δ′.3}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{F}_{Elm}(\mathbf{r}) = &\left[\frac{-l}{\sqrt{2}\psi_l}\sqrt{\frac{(l-m+2)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1m-1}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l+1}(qr)\right.\\
&\left.+\frac{l+1}{\sqrt{2}\psi_l}\sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l-1)(2l+1)}}Y_{l-1m-1}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l-1}(qr)\right]\widehat{\mathbf{e}}_+\\
&+\left[\frac{l}{\sqrt{2}\psi_l}\sqrt{\frac{(l+m+2)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1m+1}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l+1}(qr)\right.\\
&\left.+\frac{-(l+1)}{\sqrt{2}\psi_l}\sqrt{\frac{(l-m)(l-m-1)}{(2l-1)(2l+1)}}Y_{l-1m+1}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l-1}(qr)\right]\widehat{\mathbf{e}}_-\\
&+\left[\frac{-l}{\psi_l}\sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1m}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l+1}(qr)\right.\\
&\left.+\frac{-(l+1)}{\psi_l}\sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l-1)(2l+1)}}Y_{l-1m}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l-1}(qr)\right]\widehat{\mathbf{e}}_0
\end{aligned} \qquad (\Delta'.4)$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{F}_{Llm}(\mathbf{r}) = &\left[\frac{-1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{(l-m+2)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1m-1}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l+1}(qr)\right.\\
&\left.-\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l-1)(2l+1)}}Y_{l-1m-1}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l-1}(qr)\right]\widehat{\mathbf{e}}_+\\
&+\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{(l+m+2)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1m+1}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l+1}(qr)\right.\\
&\left.+\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{(l-m)(l-m-1)}{(2l-1)(2l+1)}}Y_{l-1m+1}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l-1}(qr)\right]\widehat{\mathbf{e}}_-\\
&-\left[\sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1m}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l+1}(qr)\right.\\
&\left.+\sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l-1)(2l+1)}}Y_{l-1m}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l-1}(qr)\right]\widehat{\mathbf{e}}_0\ ,
\end{aligned} \qquad (\Delta'.5)$$

όπου $\alpha_l^m = \frac{1}{2}[(l-m)(l+m+1)]^{1/2}$. Πολλαπλασιάζοντας την Εξ. (Δ'.3) με $\epsilon_z\boldsymbol{\epsilon}_g^{-1}$ έχουμε

$$\begin{aligned}
\epsilon_z\boldsymbol{\epsilon}_g^{-1}\mathbf{F}_{Hlm}(\mathbf{r}) &= \frac{f_l(qr)}{\psi_l}\left[\sqrt{2}\alpha_l^{-m}Y_{lm-1}(\widehat{\mathbf{r}})(\epsilon_r'+\epsilon_\kappa')\widehat{\mathbf{e}}_+ + \sqrt{2}\alpha_l^{m}Y_{lm+1}(\widehat{\mathbf{r}})(\epsilon_r'-\epsilon_\kappa')\widehat{\mathbf{e}}_- + mY_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\widehat{\mathbf{e}}_0\right]\\
&= \sum_{qp}[\tilde{g}_{qp}^{lm}\mathbf{F}_{Hqp}(\mathbf{r}) + \tilde{e}_{qp}^{lm}\mathbf{F}_{Eqp}(\mathbf{r}) + \tilde{f}_{qp}^{lm}\mathbf{F}_{Lqp}(\mathbf{r})]\ ,
\end{aligned} \qquad (\Delta'.6)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την Εξ. (Δ'.2) και η δεύτερη ισότητα προκύπτει από το ανάπτυγμα ενός διανυσματικού πεδίου σε βάση διανυσματικών σφαιρικών κυμάτων. Παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο της Εξ. (Δ′.6) με

$$\overline{\mathbf{F}}_{Hl'm'}(\mathbf{r}) = \frac{f_{l'}(qr)}{\psi_{l'}}(\sqrt{2}\alpha_{l'}^{-m'}Y^*_{l'm'-1}(\widehat{\mathbf{r}})\widehat{\mathbf{e}}^*_+ + \sqrt{2}\alpha_{l'}^{m'}Y^*_{l'm'+1}(\widehat{\mathbf{r}})\widehat{\mathbf{e}}^*_- + m'Y^*_{l'm'}(\widehat{\mathbf{r}})\widehat{\mathbf{e}}^*_0) \quad (\Delta'.7)$$

έχουμε

$$\begin{aligned}&\sum_{qp}\overline{\mathbf{F}}_{Hl'm'}(\mathbf{r})\cdot(\tilde{g}^{lm}_{qp}\mathbf{F}_{Hqp}(\mathbf{r}) + \tilde{e}^{lm}_{qp}\mathbf{F}_{Eqp}(\mathbf{r}) + \tilde{f}^{lm}_{qp}\mathbf{F}_{Lqp}(\mathbf{r}))\\ &= \frac{f_{l'}(qr)f_l(qr)}{\psi_{l'}\psi_l}\big[2\alpha_{l'}^{-m'}\alpha_l^{-m}(\epsilon'_r+\epsilon'_\kappa)Y^*_{l'm'-1}(\widehat{\mathbf{r}})Y_{lm-1}(\widehat{\mathbf{r}})\\ &+ 2\alpha_{l'}^{m'}\alpha_l^{m}(\epsilon'_r-\epsilon'_\kappa)Y^*_{l'm'+1}(\widehat{\mathbf{r}})Y_{lm+1}(\widehat{\mathbf{r}}) + m'mY^*_{l'm'}(\widehat{\mathbf{r}})Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\big]\ .\end{aligned} \quad (\Delta'.8)$$

Ολοκληρώνοντας και τα δύο μέλη της Εξ. (Δ′.8) σε όλη τη στερεά γωνία και λαμβάνοντας υπόψη τις σχέσεις ορθογωνιότητας (1.28) καταλήγουμε στη σχέση

$$\tilde{g}^{lm}_{l'm'} = \frac{(l^2+l-m^2)\epsilon'_r + m\epsilon'_\kappa + m^2}{l(l+1)}\delta_{ll'}\delta_{mm'}\ . \quad (\Delta'.9)$$

Αντίστοιχα, παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο της Εξ. (Δ′.6) με $\overline{\mathbf{F}}_{El'm'}$ και $\overline{\mathbf{F}}_{Ll'm'}$, και ολοκληρώνοντας σε όλη τη στερεά γωνία καταλήγουμε σε ένα σύστημα δύο γραμμικών εξισώσεων, του οποίου οι λύσεις είναι

$$\begin{aligned}\tilde{e}^{lm}_{l'm'} &= \sqrt{\frac{(l-1)(l-m)(l+m)}{(l+1)(2l-1)(2l+1)}}\frac{m\overline{\epsilon}'_r-(l+1)\epsilon'_\kappa}{l}\delta_{l-1,l'}\delta_{mm'}\\ &+\sqrt{\frac{(l+2)(l-m+1)(l+m+1)}{l(2l+1)(2l+3)}}\frac{m\overline{\epsilon}'_r+l\epsilon'_\kappa}{l+1}\delta_{l+1,l'}\delta_{mm'}\end{aligned} \quad (\Delta'.10)$$

$$\begin{aligned}\tilde{f}^{lm}_{l'm'} &= \sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{l(l+1)(2l-1)(2l+1)}}[m\overline{\epsilon}'_r-(l+1)\epsilon'_\kappa]\delta_{l-1,l'}\delta_{mm'}\\ &-\sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{l(l+1)(2l+1)(2l+3)}}[m\overline{\epsilon}'_r+l\epsilon'_\kappa]\delta_{l+1,l'}\delta_{mm'}\end{aligned} \quad (\Delta'.11)$$

όπου $\overline{\epsilon}'_r = \epsilon'_r - 1$. Με τον ίδιο τρόπο, παίρνοντας το γινόμενο των $\epsilon_z\boldsymbol{\epsilon}_g^{-1}$ και $\mathbf{F}_{Elm}$, όπως δίνεται από την Εξ. (Δ′.4) και εκφράζοντας το διάνυσμα $\epsilon_z\boldsymbol{\epsilon}_g^{-1}\mathbf{F}_{Elm}$ που προκύπτει συναρτήσει των διανυσματικών σφαιρικών κυματοσυναρτήσεων με συντελεστές $\overline{g}^{lm}_{qp}$, $\overline{e}^{lm}_{qp}$, $\overline{f}^{lm}_{qp}$ οδηγούμαστε σε μια εξίσωση ανάλογη της Εξ. (Δ′.6). Παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο αυτής της εξίσωσης με $\overline{\mathbf{F}}_{Hl'm'}$, $\overline{\mathbf{F}}_{El'm'}$, και $\overline{\mathbf{F}}_{Ll'm'}$, διαδοχικά, και ολοκληρώνοντας σε όλη τη στερεά γωνία, καταλήγουμε σε ένα σύστημα τριών γραμμικών εξισώσεων, του οποίου οι λύσεις είναι

$$\begin{aligned}\overline{g}^{lm}_{l'm'} &= \sqrt{\frac{(l+1)(l-m)(l+m)}{(l-1)(2l-1)(2l+1)}}\frac{m\overline{\epsilon}'_r+(l-1)\epsilon'_\kappa}{l}\delta_{l-1,l'}\delta_{mm'}\\ &+\sqrt{\frac{l(l-m+1)(l+m+1)}{(l+2)(2l+1)(2l+3)}}\frac{m\overline{\epsilon}'_r-(l+2)\epsilon'_\kappa}{l+1}\delta_{l+1,l'}\delta_{mm'}\end{aligned} \quad (\Delta'.12)$$

$$\begin{aligned}\overline{e}_{l'm'}^{lm} &= \delta_{ll'}\delta_{mm'}\\
&+ \frac{[(2l^2+2l+3)m^2+(2l^2+2l-3)l(l+1)]\overline{\epsilon}_r' + (4l^2+4l-3)m\epsilon_\kappa'}{l(l+1)(2l-1)(2l+3)}\delta_{ll'}\delta_{mm'}\\
&- \sqrt{\frac{(l-2)(l+1)(l-m-1)(l-m)(l+m-1)(l+m)}{(l-1)l(2l-3)(2l+1)}}\frac{\overline{\epsilon}_r'}{2l-1}\delta_{l-2,l'}\delta_{mm'}\\
&- \sqrt{\frac{l(l+3)(l-m+1)(l-m+2)(l+m+1)(l+m+2)}{(l+1)(l+2)(2l+1)(2l+5)}}\frac{\overline{\epsilon}_r'}{2l+3}\delta_{l+2,l'}\delta_{mm'}\end{aligned} \tag{Δ΄.13}$$

$$\begin{aligned}\overline{f}_{l'm'}^{lm} &= \frac{(l^2+l-3m^2)\overline{\epsilon}_r' - (2l-1)(2l+3)m\epsilon_\kappa'}{\sqrt{l(l+1)}(2l-1)(2l+3)}\delta_{ll'}\delta_{mm'}\\
&- \sqrt{\frac{(l+1)(l-m-1)(l-m)(l+m-1)(l+m)}{l(2l-3)(2l+1)}}\frac{\overline{\epsilon}_r'}{2l-1}\delta_{l-2,l'}\delta_{mm'}\\
&+ \sqrt{\frac{l(l-m+1)(l-m+2)(l+m+1)(l+m+2)}{(l+1)(2l+1)(2l+5)}}\frac{\overline{\epsilon}_r'}{2l+3}\delta_{l+2,l'}\delta_{mm'}\ .\end{aligned} \tag{Δ΄.14}$$

Παράρτημα Ε΄

Υπολογισμός των συντελεστών $\tilde{\tilde{g}}_{lm}^{l'm'}$, $\overline{\overline{g}}_{lm}^{l'm'}$, $\tilde{\tilde{e}}_{lm}^{l'm'}$, $\overline{\overline{e}}_{lm}^{l'm'}$, $\tilde{\tilde{f}}_{lm}^{l'm'}$, $\overline{\overline{f}}_{lm}^{l'm'}$

Στο παράρτημα αυτό βρίσκουμε αναλυτικές εκφράσεις για τους συντελεστές $\tilde{\tilde{g}}_{lm}^{l'm'}$, $\overline{\overline{g}}_{lm}^{l'm'}$, $\tilde{\tilde{e}}_{lm}^{l'm'}$, $\overline{\overline{e}}_{lm}^{l'm'}$, $\tilde{\tilde{f}}_{lm}^{l'm'}$, $\overline{\overline{f}}_{lm}^{l'm'}$, που υπεισέρχονται στο ανάπτυγμα (1.52) μέσω των Εξ. (1.53).

Εύκολα μπορεί να δειχθεί ότι

$$\mu_z \boldsymbol{\mu}_g^{-1} = \begin{pmatrix} \mu_r' & -i\mu_\kappa' & 0 \\ i\mu_\kappa' & \mu_r' & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{Ε΄.1}$$

που σε δυαδική μορφή γράφεται

$$\mu_z \boldsymbol{\mu}_g^{-1} = (\mu_r' - \mu_\kappa')\widehat{\mathbf{e}}_-\widehat{\mathbf{e}}_+ + (\mu_r' + \mu_\kappa')\widehat{\mathbf{e}}_+\widehat{\mathbf{e}}_- + \widehat{\mathbf{e}}_0\widehat{\mathbf{e}}_0 \,, \tag{Ε΄.2}$$

όπου $\mu_r' = \mu_r/(\mu_r^2 - \mu_\kappa^2)$ και $\mu_\kappa' = -\mu_\kappa/(\mu_r^2 - \mu_\kappa^2)$ και $\widehat{\mathbf{e}}_+ = (\widehat{\mathbf{x}} + i\widehat{\mathbf{y}})/\sqrt{2}$, $\widehat{\mathbf{e}}_0 = \widehat{\mathbf{z}}$, $\widehat{\mathbf{e}}_- = (\widehat{\mathbf{x}} - i\widehat{\mathbf{y}})/\sqrt{2}$. Χρησιμοποιώντας τα $\widehat{\mathbf{e}}_\pm$ και $\widehat{\mathbf{e}}_0$, οι διανυσματικές σφαιρικές κυματοσυναρτήσεις γράφονται στη μορφή

$$\mathbf{F}_{Hlm}(\mathbf{r}) = \frac{f_l(qr)}{\psi_l}(\sqrt{2}\alpha_l^{-m} Y_{lm-1}(\widehat{\mathbf{r}})\widehat{\mathbf{e}}_+ + \sqrt{2}\alpha_l^{m} Y_{lm+1}(\widehat{\mathbf{r}})\widehat{\mathbf{e}}_- + mY_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\widehat{\mathbf{e}}_0) \tag{Ε΄.3}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{F}_{Elm}(\mathbf{r}) = &\left[\frac{-l}{\sqrt{2}\psi_l}\sqrt{\frac{(l-m+2)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1m-1}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l+1}(qr)\right.\\ &\left.+\frac{l+1}{\sqrt{2}\psi_l}\sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l-1)(2l+1)}}Y_{l-1m-1}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l-1}(qr)\right]\widehat{\mathbf{e}}_+\\ &+\left[\frac{l}{\sqrt{2}\psi_l}\sqrt{\frac{(l+m+2)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1m+1}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l+1}(qr)\right.\\ &\left.+\frac{-(l+1)}{\sqrt{2}\psi_l}\sqrt{\frac{(l-m)(l-m-1)}{(2l-1)(2l+1)}}Y_{l-1m+1}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l-1}(qr)\right]\widehat{\mathbf{e}}_-\\ &+\left[\frac{-l}{\psi_l}\sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1m}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l+1}(qr)\right.\\ &\left.+\frac{-(l+1)}{\psi_l}\sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l-1)(2l+1)}}Y_{l-1m}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l-1}(qr)\right]\widehat{\mathbf{e}}_0\end{aligned} \tag{E$'$.4}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{F}_{Llm}(\mathbf{r}) = &\left[\frac{-1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{(l-m+2)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1m-1}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l+1}(qr)\right.\\ &\left.-\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l-1)(2l+1)}}Y_{l-1m-1}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l-1}(qr)\right]\widehat{\mathbf{e}}_+\\ &+\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{(l+m+2)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1m+1}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l+1}(qr)\right.\\ &\left.+\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{(l-m)(l-m-1)}{(2l-1)(2l+1)}}Y_{l-1m+1}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l-1}(qr)\right]\widehat{\mathbf{e}}_-\\ &-\left[\sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1m}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l+1}(qr)\right.\\ &\left.+\sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l-1)(2l+1)}}Y_{l-1m}(\widehat{\mathbf{r}})f_{l-1}(qr)\right]\widehat{\mathbf{e}}_0\ ,\end{aligned} \tag{E$'$.5}$$

όπου $\alpha_l^m = \frac{1}{2}[(l-m)(l+m+1)]^{1/2}$. Πολλαπλασιάζοντας την Εξ. (Ε′.3) με $\mu_z\boldsymbol{\mu}_g^{-1}$ έχουμε

$$\begin{aligned}\mu_z\boldsymbol{\mu}_g^{-1}\mathbf{F}_{Hlm}(\mathbf{r}) &= \frac{f_l(qr)}{\psi_l}\left[\sqrt{2}\alpha_l^{-m}Y_{lm-1}(\widehat{\mathbf{r}})(\mu_r'+\mu_\kappa')\widehat{\mathbf{e}}_+ + \sqrt{2}\alpha_l^{m}Y_{lm+1}(\widehat{\mathbf{r}})(\mu_r'-\mu_\kappa')\widehat{\mathbf{e}}_- + mY_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\widehat{\mathbf{e}}_0\right]\\ &= \sum_{qp}\left[\tilde{\tilde{g}}_{qp}^{lm}\mathbf{F}_{Hqp}(\mathbf{r}) + \tilde{\tilde{e}}_{qp}^{lm}\mathbf{F}_{Eqp}(\mathbf{r}) + \tilde{\tilde{f}}_{qp}^{lm}\mathbf{F}_{Lqp}(\mathbf{r})\right]\ ,\end{aligned} \tag{E$'$.6}$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την Εξ. (Ε′.2) και η δεύτερη ισότητα προκύπτει από το ανάπτυγμα ενός διανυσματικού πεδίου σε βάση διανυσματικών σφαιρικών κυμάτων. Παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο της Εξ. (Ε′.6) με

$$\overline{\mathbf{F}}_{Hl'm'}(\mathbf{r}) = \frac{f_{l'}(qr)}{\psi_{l'}}\Big[\sqrt{2}\alpha_{l'}^{-m'}Y_{l'm'-1}^{*}(\widehat{\mathbf{r}})\widehat{\mathbf{e}}_{+}^{*} + \sqrt{2}\alpha_{l'}^{m'}Y_{l'm'+1}^{*}(\widehat{\mathbf{r}})\widehat{\mathbf{e}}_{-}^{*} + m'Y_{l'm'}^{*}(\widehat{\mathbf{r}})\widehat{\mathbf{e}}_{0}^{*}\Big] \quad (\mathrm{E}'.7)$$

έχουμε

$$\begin{aligned}&\sum_{qp}\overline{\mathbf{F}}_{Hl'm'}(\mathbf{r})\cdot\Big[\tilde{\tilde{g}}_{qp}^{lm}\mathbf{F}_{Hqp}(\mathbf{r}) + \tilde{\tilde{e}}_{qp}^{lm}\mathbf{F}_{Eqp}(\mathbf{r}) + \tilde{\tilde{f}}_{qp}^{lm}\mathbf{F}_{Lqp}(\mathbf{r})\Big]\\ &= \frac{f_{l'}(qr)f_l(qr)}{\psi_{l'}\psi_l}\Big[2\alpha_{l'}^{-m'}\alpha_l^{-m}(\mu_r'+\mu_\kappa')Y_{l'm'-1}^{*}(\widehat{\mathbf{r}})Y_{lm-1}(\widehat{\mathbf{r}})\\ &+ 2\alpha_{l'}^{m'}\alpha_l^{m}(\mu_r'-\mu_\kappa')Y_{l'm'+1}^{*}(\widehat{\mathbf{r}})Y_{lm+1}(\widehat{\mathbf{r}}) + m'mY_{l'm'}^{*}(\widehat{\mathbf{r}})Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}})\Big]\,.\end{aligned} \quad (\mathrm{E}'.8)$$

Ολοκληρώνοντας και τα δύο μέλη της Εξ. (Ε′.8) σε όλη τη στερεά γωνία και λαμβάνοντας υπόψη τις σχέσεις ορθογωνιότητας (1.28) βρίσκουμε ότι ο συντελεστής $\tilde{\tilde{g}}_{l'm'}^{lm}$ δίδεται από την ίδια έκφραση όπως ο $\tilde{g}_{l'm'}^{lm}$ [Εξ. (Δ′.9)] με τις ποσότητες μ_r' και μ_κ' στη θέση των ϵ_r' και ϵ_κ', αντίστοιχα.

Αντίστοιχα, παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο της Εξ. (Ε′.6) με $\overline{\mathbf{F}}_{El'm'}$ και $\overline{\mathbf{F}}_{Ll'm'}$, και ολοκληρώνοντας σε όλη τη στερεά γωνία καταλήγουμε σε ένα σύστημα δύο γραμμικών εξισώσεων, του οποίου οι λύσεις δίνουν τους συντελεστές $\tilde{\tilde{e}}_{l'm'}^{lm}$ και $\tilde{\tilde{f}}_{l'm'}^{lm}$. Όπως προκύπτει, οι συντελεστές αυτοί δίδονται από τις ίδιες σχέσεις [Εξ. (Δ′.10) και (Δ′.11)] όπως οι $\tilde{e}_{l'm'}^{lm}$ και $\tilde{f}_{l'm'}^{lm}$ με τις ποσότητες $\overline{\mu}_r'$ και μ_κ' στη θέση των $\overline{\epsilon}_r'$ και ϵ_κ', αντίστοιχα, όπου $\overline{\mu}_r' = \mu_r' - 1$. Με τον ίδιο τρόπο, παίρνοντας το γινόμενο των $\mu_z\boldsymbol{\mu}_g^{-1}$ και $\mathbf{F}_{Elm}$, όπως δίνεται από την Εξ. (Ε′.4) και εκφράζοντας το διάνυσμα $\mu_z\boldsymbol{\mu}_g^{-1}\mathbf{F}_{Elm}$ που προκύπτει συναρτήσει των διανυσματικών σφαιρικών κυματοσυναρτήσεων με συντελεστές $\overline{\overline{g}}_{qp}^{lm}$, $\overline{\overline{e}}_{qp}^{lm}$, $\overline{\overline{f}}_{qp}^{lm}$ οδηγούμαστε σε μια εξίσωση ανάλογη της Εξ. (Ε′.6). Παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο αυτής της εξίσωσης με $\overline{\mathbf{F}}_{Hl'm'}$, $\overline{\mathbf{F}}_{El'm'}$, και $\overline{\mathbf{F}}_{Ll'm'}$, διαδοχικά, και ολοκληρώνοντας σε όλη τη στερεά γωνία, καταλήγουμε σε ένα σύστημα τριών γραμμικών εξισώσεων, του οποίου οι λύσεις δίνονται από τις Εξ. (Δ′.12), (Δ′.13), και (Δ′.14), αντίστοιχα, θέτοντας $\overline{\mu}_r'$ αντί για $\overline{\epsilon}_r'$ και μ_κ' αντί για ϵ_κ'.

Παράρτημα ϛ΄

Αλλαγή βάσης κυμάτων

Για την απόδειξη της σχέσης

$$\sum_{\mathbf{R}_n} \exp(i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{R}_n) h_l^+(qr_n) Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}_n) = \sum_{\mathbf{g}} \frac{2\pi\,(-i)^l}{qA_0 K_{\mathbf{g}z}^+} Y_{lm}(\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s) \exp(i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^s \cdot \mathbf{r}) \tag{ϛ΄.1}$$

ξεκινάμε από την έκφραση της συνάρτησης Green για την εξίσωση Helmholtz για βαθμωτά πεδία, $(\nabla^2 + q^2)F(\mathbf{r}) = 0$. Η συνάρτηση Green στη φασματική αναπαράσταση γράφεται

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \kappa) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}'])}{(\kappa + i\epsilon)^2 - q^2} \ . \tag{ϛ΄.2}$$

Περνώντας από τον διακριτό χώρο $\mathbf{q}$ στον συνεχή θα έχουμε

$$\begin{aligned} g(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \kappa) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \lim_{\epsilon \to 0} \int d^3q \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}'])}{(\kappa + i\epsilon)^2 - q^2} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \lim_{\epsilon \to 0} \int d^2q_\parallel \int dq_z \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}'])}{(\kappa + i\epsilon)^2 - q_{\parallel^2} - q_z^2} \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^3} \lim_{\epsilon \to 0} \int d^2q_\parallel \frac{\exp(i\mathbf{q}_\parallel \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}']_\parallel)}{2\sqrt{\kappa^2 - q_\parallel^2}} \int dq_z \exp(iq_z[z - z']) \\ &\times \left[\frac{1}{q_z - \sqrt{(\kappa + i\epsilon)^2 - q_\parallel^2}} - \frac{1}{q_z + \sqrt{(\kappa + i\epsilon)^2 - q_\parallel^2}} \right] \ . \end{aligned} \tag{ϛ΄.3}$$

Υπολογίζοντας με τη βοήθεια του λήμματος Jordan τα δύο ολοκληρώματα στην αγκύλη[1], βρίσκουμε

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \kappa) = \frac{i}{2(2\pi)^2} \int d^2q_\parallel \frac{\exp(i\mathbf{q}_\pm \cdot [\mathbf{r} - \mathbf{r}'])}{\sqrt{\kappa^2 - q_\parallel^2}} \ , \tag{ϛ΄.4}$$

[1] Διακρίνουμε τις περιπτώσεις $z - z' > 0$ και $z - z' < 0$ και, επιλέγοντας σαν διαδρομή ολοκλήρωσης το άνω και κάτω ημικύκλιο άπειρης ακτίνας, έχουμε συνεισφορά από τον θετικό $\sqrt{(\kappa + i\epsilon)^2 - q_\parallel^2}$, ή αρνητικό πόλο, $-\sqrt{(\kappa + i\epsilon)^2 - q_\parallel^2}$, αντίστοιχα.

όπου

$$\mathbf{q}_{\pm} = \mathbf{q}_{\parallel} \pm \sqrt{\kappa^2 - q_{\parallel}^2}\, \widehat{\mathbf{z}}\ , \quad +(-) \text{ για } z - z' > 0(< 0)\ . \tag{ϛ$'$.5}$$

Επειδή τα $\mathbf{r}$, $\mathbf{r}'$ είναι αυθαίρετα μπορούμε να επιλέξουμε το $\mathbf{r}'$ στο επίπεδο $x - y$, ώστε η Εξ. (ϛ$'$.5) να ισχύει για τη σύμβαση $+(-)$ για $z > (<)0$. Χρησιμοποιώντας τις Εξ. (;;) και (Β$'$.8) η Εξ.(ϛ$'$.4) θα γίνει

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \kappa) = \frac{1}{2\pi} \sum_{lm} (-i)^{l+1} j_l(\kappa r') Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}') \int d^2 q_{\parallel} \frac{\exp(i\mathbf{q}_{\pm} \cdot \mathbf{r})}{\sqrt{\kappa^2 - q_{\parallel}^2}} Y_{lm}(\widehat{\mathbf{q}}_{\pm})\ . \tag{ϛ$'$.6}$$

Όμως η συνάρτηση Green για $r' > r$ (εφόσον τα $\mathbf{r}$, $\mathbf{r}'$ είναι αυθαίρετα) δίνεται από την έκφραση [βλ. Εξ. (3.1)]

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \kappa) = -\frac{\exp(i\kappa\, |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{4\pi\, |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = -i\kappa \sum_{lm} j_l(\kappa r') h_l^+(\kappa r) Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) Y^*_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}'). \tag{ϛ$'$.7}$$

Με σύγκριση των δύο τελευταίων σχέσεων, και εκμεταλλευόμενοι την ορθογωνιότητα των σφαιρικών αρμονικών, Εξ. (Β$'$.9), παίρνουμε

$$h_l^+(\kappa r) Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}) = \frac{(-i)^l}{2\pi\kappa} \int d^2 q_{\parallel} \frac{\exp(i\mathbf{q}_{\pm} \cdot \mathbf{r})}{\sqrt{\kappa^2 - q_{\parallel}^2}} Y_{lm}(\widehat{\mathbf{q}}_{\pm})\ , \tag{ϛ$'$.8}$$

από όπου, για $\mathbf{r} \to \mathbf{r}_n$, έχουμε

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{R}_n} \exp(i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n) h_l^+(\kappa r_n) Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}}_n) &= \frac{(-i)^l}{2\pi\kappa} \int d^2 q_{\parallel} \frac{Y_{lm}(\widehat{\mathbf{q}}_{\pm})}{\sqrt{\kappa^2 - q_{\parallel}^2}} \\ &\times \sum_{\mathbf{R}_n} \exp(i[\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n + \mathbf{q}_{\pm} \cdot \mathbf{r}_n])\ . \end{aligned} \tag{ϛ$'$.9}$$

Όμως, επειδή $\mathbf{r}_n = \mathbf{r} - \mathbf{R}_n$, με $\mathbf{R}_n$ στο επίπεδο $x - y$, με τη βοήθεια της Εξ. (ϛ$'$.5) θα ισχύει

$$\sum_{\mathbf{R}_n} \exp(i[\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_n + \mathbf{q}_{\pm} \cdot \mathbf{r}_n]) = \exp(i\mathbf{q}_{\pm} \cdot \mathbf{r}) \sum_{\mathbf{R}_n} \exp(i[\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}] \cdot \mathbf{R}_n)\ , \tag{ϛ$'$.10}$$

και λόγω της

$$\sum_{\mathbf{R}_n} \exp(i[\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}] \cdot \mathbf{R}_n) = \frac{(2\pi)^2}{A_0} \sum_{\mathbf{g}} \delta(\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel} + \mathbf{g})\ , \tag{ϛ$'$.11}$$

οι Εξ. (ϛ$'$.9) και (ϛ$'$.10) δίνουν για $\mathbf{q}_{\pm} \to \mathbf{K}^s_{\mathbf{g}}$ τη ζητούμενη σχέση, Εξ. (ϛ$'$.1). Η Εξ. (ϛ$'$.11) μπορεί να αποδειχτεί ξεκινώντας από τη σχέση [185]

$$\sum_{\mathbf{R}_n} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n) = \begin{cases} N, & \mathbf{k} = \mathbf{g} \\ 0, & \mathbf{k} \neq \mathbf{g} \end{cases} = N \sum_{\mathbf{g}} \delta_{\mathbf{kg}}\ , \quad \mathbf{k}\text{: διακριτό}\ , \tag{ϛ$'$.12}$$

όπου $\mathbf{R}_n$ και $\mathbf{g}$, είναι διανύσματα του ευθέος και του αντίστροφου πλέγματος, αντίστοιχα, N είναι το πλήθος των πλεγματικών σημείων, και $\delta_{\mathbf{kg}}$ το δέλτα του Kronecker, οπότε θα είναι

$$\sum_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{kg}} = 1 \; . \tag{ϛ΄.13}$$

Αν περάσουμε από το διάκριτο χώρο $\mathbf{k}$ στο συνεχή, η τελευταία σχέση παίρνει τη μορφή

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k (\delta_{\mathbf{kg}})_{\text{συνεχ.}} = 1 \; . \tag{ϛ΄.14}$$

Όμως γνωρίζουμε ότι

$$\int d^3k \delta(\mathbf{k} - \mathbf{g}) = 1 \; , \tag{ϛ΄.15}$$

οπότε με σύγκριση των δύο τελευταίων παίρνουμε

$$(\delta_{\mathbf{kg}})_{\text{ συνεχ.}} = \frac{(2\pi)^3}{V} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{g}) \; . \tag{ϛ΄.16}$$

Έτσι, από την τελευταία και λαμβάνοντας υπόψη ότι $V = NU$, όπου U ο όγκος της θεμελιώδους κυψελίδας, η Εξ. (ϛ΄.12) γράφεται

$$\sum_{\mathbf{R}_n} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n) = \frac{(2\pi)^3}{U} \sum_{\mathbf{g}} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{g}) \; . \tag{ϛ΄.17}$$

Η παραπάνω απόδειξη αφορούσε ένα 3Δ σύστημα. Αντίστοιχα μπορεί κανείς να δουλέψει και στις δύο διαστάσεις, οπότε θα πάρει την Εξ. (ϛ΄.11), με την αντιστοίχιση $\mathbf{k} \to \mathbf{k}_{\|} - \mathbf{q}_{\|}$.

Παράρτημα Ζ′

Μη σύμμορφες ομάδες χώρου

Στο παράρτημα αυτό χρησιμοποιούμε βασικές έννοιες της θεωρίας ομάδων, και πιο συγκεκριμένα των μη σύμμορφων ομάδων χώρου, με σκοπό να οικοδομήσουμε το αναγκαίο υπόβαθρο για την ανάλυση των ιδιοτήτων συμμετρίας των φωτονικών ζωνών στις χειρόμορφες δομές που μελετάμε. Γενικά, οι μετασχηματισμοί συμμετρίας που αφήνουν έναν κρύσταλλο αναλλοίωτο συνιστούν μια ομάδα, που ονομάζεται ομάδα χώρου $\mathcal{G}$ του κρυστάλλου. Ένα στοιχείο της ομάδας χώρου, $\{\widehat{P}|\boldsymbol{\tau}_p+\mathbf{R}\}$, μετασχηματίζει ένα σημείο $\mathbf{r}$ στο $\mathbf{Pr}+\boldsymbol{\tau}_p+\mathbf{R}$, όπου $\mathbf{R}$ είναι ένα διάνυσμα του πλέγματος Bravais και $\boldsymbol{\tau}_p$ μια μη θεμελιώδης μετατόπιση συνυφασμένη με μία (αμιγή ή μη) στροφή $\widehat{P}$, που περιγράφεται από έναν ορθογώνιο πίνακα $\mathbf{P}$, διαστάσεων 3×3, της σχετικής κρυσταλλογραφικής σημειακής ομάδας $\mathcal{G}_0$. Για μια σύμμορφη ομάδα χώρου, οι μετατοπίσεις $\boldsymbol{\tau}_p$ είναι μηδέν για κάθε $\widehat{P}$, το οποίο δεν συμβαίνει στην περίπτωση των μη σύμμορφων ομάδων χώρου.

Η ομάδα χώρου του κρυστάλλου του Σχ. 7.1, απουσία στατικού μαγνητικού πεδίου, είναι η D_4^7. [186] Αυτή περιλαμβάνει όλους τους συνδυασμούς των θεμελιωδών μετατοπίσεων του τετραγωνικού πλέγματος, $\mathbf{R}=n_1\mathbf{a}_1+n_2\mathbf{a}_2+n_3\mathbf{a}_3$, όπου $\mathbf{a}_1=(a,0,0)$, $\mathbf{a}_2=(0,a,0)$, $\mathbf{a}_3=(0,0,d)$, και $n_1,n_2,n_3=0,\pm1,\ldots$, με τους ακόλουθους μετασχηματισμούς συμμετρίας: $\{\widehat{E}|\mathbf{0}\}$ (ταυτότητα), $\{\widehat{C}_{2z}|2\boldsymbol{\tau}\}$ (στροφή κατά π περί τον άξονα z ακολουθούμενη από μετατόπιση κατά $2\boldsymbol{\tau}$), $\{\widehat{C}_{4z}|\boldsymbol{\tau}\}$ (στροφή κατά $\pi/2$ περί τον άξονα z ακολουθούμενη από μετατόπιση κατά $\boldsymbol{\tau}$), $\{\widehat{C}_{4z}^{-1}|-\boldsymbol{\tau}\}$ (στροφή κατά $-\pi/2$ περί τον άξονα z ακολουθούμενη από μετατόπιση κατά $-\boldsymbol{\tau}$), $\{\widehat{C}_{2x}|2\boldsymbol{\tau}\}$ (στροφή κατά π περί τον άξονα x ακολουθούμενη από μετατόπιση κατά $2\boldsymbol{\tau}$), $\{\widehat{C}_{2y}|\mathbf{0}\}$ (στροφή κατά π περί τον άξονα y), $\{\widehat{C}_{2a}|\boldsymbol{\tau}\}$ (στροφή κατά π περί τον άξονα [110] ακολουθούμενη από μετατόπιση κατά $\boldsymbol{\tau}$) $\{\widehat{C}_{2b}|-\boldsymbol{\tau}\}$ (στροφή κατά π περί τον άξονα $[\bar{1}10]$ ακολουθούμενη από μετατόπιση κατά $-\boldsymbol{\tau}$), όπου $\boldsymbol{\tau}=(0,0,d/4)$. Με την εφαρμογή ενός στατικού ομοιογενούς μαγνητικού πεδίου κατά τη διεύθυνση z, η βαθμωτή σχετική διηλεκτρική συνάρτηση Drude του πλάσματος γίνεται τανυστής, $\boldsymbol{\epsilon}_g$, που έχει τη γυροτροπική μορφή της Εξ. (1.20). Επομένως μόνο οι στροφές $\widehat{P}=\widehat{E},\widehat{C}_{2z},\widehat{C}_{4z},\widehat{C}_{4z}^{-1}$ που αφήνουν αυτόν τον τανυστή αναλλοίωτο ($\mathbf{P}\boldsymbol{\epsilon}_g\mathbf{P}^{-1}=\boldsymbol{\epsilon}_g$) είναι επιτρεπτές στην ομάδα χώρου, και έτσι η ομάδα χώρου ανάγεται στη C_4^4. [186]

Η συμμετρία των φωτονικών ζωνών προσδιορίζεται από την ομάδα $\mathcal{G}(\mathbf{k})$ του αντίστοιχου κυματανύσματος $\mathbf{k}$. Αυτή είναι μια υποομάδα της ομάδας χώρου και απαρτίζεται από όλους τους μετασχηματισμούς συμμετρίας $\{\widehat{P}|\boldsymbol{\tau}_p+\mathbf{R}\}$ που έχουν την ιδιότητα $\mathbf{Pk}=\mathbf{k}+\mathbf{K}$, όπου $\mathbf{K}$ είναι κάποιο διάνυσμα αντιστρόφου πλέγματος, που μπορεί να είναι μηδέν. Αν ορίσουμε την ομάδα $\mathcal{T}(\mathbf{k})$, η οποία αποτελείται από όλες τις θεμελιώδεις μετατοπίσεις $\{\widehat{E}|\mathbf{R}\}$ που ικανοποιούν την εξίσωση $\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R})=1$, η $\mathcal{T}(\mathbf{k})$ είναι προφανώς υποομάδα της ομάδας $\mathcal{T}$ όλων των πλεγματικών μετατοπίσεων. Επιπλέον, είναι μια αναλλοίωτη υποομάδα της $\mathcal{G}(\mathbf{k})$ και έτσι είναι δυνατό να ορίσουμε την παραγοντική ομάδα $\mathcal{G}(\mathbf{k})/\mathcal{T}(\mathbf{k})$. Εν γένει, οι μη αναγωγίσιμες αναπαραστάσεις της $\mathcal{G}(\mathbf{k})$ μπορούν να προκύψουν από αυτές της $\mathcal{G}(\mathbf{k})/\mathcal{T}(\mathbf{k})$ που ικανοποιούν τις κατάλληλες συνθήκες, και συνεπώς οι φωτονικές ζώνες έχουν τη συμμετρία των επιτρεπτών μη αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων των σχετικών παραγοντικών ομάδων. Αν και για σύμμορφες ομάδες χώρου το πρόβλημα ανάγεται στην εύρεση των μη αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων της αντίστοιχης σημειακής ομάδας $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$, για μη σύμμορφες ομάδες χώρου, η παραγοντική ομάδα δεν είναι εν γένει ισόμορφη με μια σημειακή ομάδα, και επομένως η εύρεση των επιτρεπτών της μη αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων δεν είναι προφανής. Μια μέθοδος για την κατασκευή των πινάκων χαρακτήρων των ομάδων αυτών έχει προταθεί από τον Herring [187].

Ο πίνακας χαρακτήρων της παραγοντικής ομάδας $\mathcal{G}(\mathbf{k})/\mathcal{T}(\mathbf{k})$ για $\mathbf{k}$ στη διεύθυνση Λ (βλ. Σχ. 7.1), και για τις δύο ομάδες χώρου, D_4^7 και C_4^4, οι οποίες μας ενδιαφέρουν, δίνεται στον Πίνακα 7.1. Στο σημείο Γ ($\mathbf{k}=\mathbf{0}$), η παραγοντική ομάδα $\mathcal{G}(\mathbf{k})/\mathcal{T}(\mathbf{k})$ είναι ταυτόσημη με την $\mathcal{G}/\mathcal{T}$ η οποία είναι ισόμορφη με τη σημειακή ομάδα $\mathcal{G}_0$, δηλαδή, D_4 ή C_4 για τις ομάδες χώρου D_4^7 ή C_4^4, αντίστοιχα. Οι πίνακες χαρακτήρων αυτών των σημειακών ομάδων δίνονται στους Πίνακες 7.1 και 7.1. Για το σημείο Z, που αντιστοιχεί στο $\mathbf{k}=(0,0,\pi/d)$, η $\mathcal{T}(\mathbf{k})$ περιλαμβάνει όλες τις θεμελιώδεις μετατοπίσεις $\{\widehat{E}|n_1\mathbf{a}_1+n_2\mathbf{a}_2+n_3\mathbf{a}_3\}$, εκτός από αυτές για τις οποίες ο n_1 είναι περιττός ακέραιος. Η παραγοντική ομάδα $\mathcal{G}(\mathbf{k})/\mathcal{T}(\mathbf{k})$ έχει, επομένως, διπλάσιο αριθμό στοιχείων από ό,τι για το σημείο Γ. Οι Πίνακες 7.1 και 7.1 δίνουν τους πίνακες χαρακτήρων των $\mathcal{G}(\mathbf{k})/\mathcal{T}(\mathbf{k})$ για το σημείο Z, για τις ομάδες χώρου D_4^7 και C_4^4, περιλαμβάνοντας μόνο τις επιτρεπτές μη αναγωγίσιμες αναπαραστάσεις, δηλαδή αυτές για τις οποίες ο χαρακτήρας για το στοιχείο $\{\widehat{E}|4\boldsymbol{\tau}\}$ ισούται με μείον τη διάστασή τους.

Βιβλιογραφία

[1] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics* (Wiley, New York, 1998).

[2] A. H. Sihvola and I. V. Lindell, Micro. Opt. Tech. Lett. **4**, 295 (1991).

[3] P. Drude, *Lehrbuch der Optik* (S. Hirzel, Leipzig, 1990).

[4] M. Born, Zeitschrift für Physik **16**, 251 (1915).

[5] F. I. Fedorov, Opt. Spectrosc. **6**, 49 (1959).

[6] P. S. Pershan, J. Appl. Phys. **38**, 1482 (1967).

[7] V. Dmitriev, Phot. Nano. Fund. Appl. **11**, 203 (2013).

[8] G. B. Arfken and H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists, 6th Edition* (Academic Press, 2005).

[9] C. F. Bohren and D. R. Huffman, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles* (Wiley, New York, 1983).

[10] G. Mie, Ann. Phys. **25**, 377 (1908).

[11] P. Debye, Ann. Phys. **30**, 57 (1909).

[12] Z. S. Wu and Y. P. Wang, Radio Sci. **26**, 1393 (1991).

[13] Χ. Τσερκέζης, *Σκέδαση Ηλεκτρομαγνητικής Ακτινοβολίας από Πολυστρωματικούς Σφαιρικούς Σκεδαστές*, Διπλωματική Εργασία (Αθήνα, 2005).

[14] N. Stefanou, C. Tserkezis, and G. Gantzounis, Proc. SPIE **6989**, 698910 (2008).

[15] A. Moroz, Ann. Phys. **315**, 352 (2005).

[16] N. L. Tsitsas and C. Athanasiadis, Q. J. Mech. Appl. Math. **59**, 55 (2006).

[17] A. Christofi, N. Stefanou, and G. Gantzounis, Phys. Rev. B **83**, 245126 (2011).

[18] Z. Lin and S. T. Chui, Phys. Rev. E **69**, 056614 (2004).

[19] J. L. W. Li and W. L. Ong, IEEE Trans. Antennas Propag. **59**, 3370 (2011).

[20] J. L. W. Li, W. L. Ong, and K. H. R. Zheng, Phys. Rev. E **85**, 036601 (2012).

[21] Γ. Γκαντζούνης, *Οπτικές Ιδιότητες Σύνθετων Φωτονικών Συστημάτων*, Διδακτορική Διατριβή (Αθήνα, 2008).

[22] G. Gantzounis and N. Stefanou, Phys. Rev. B **73**, 035115 (2006).

[23] M. I. Mishchenko, L. D. Travis, and A. A. Lacis, *Scattering, Absorption, and Emission of Light by Small Particles* (Cambridge University Press, 2002).

[24] A. Moroz, Appl. Opt. **44**, 3604 (2005).

[25] J. F. Cornwell, *Group Theory in Physics* (Academic, 1984).

[26] A. Gonis, *Green Functions for Ordered and Disordered Systems* (North-Holand, 1992).

[27] J. Korringa, Physica **13**, 392 (1947).

[28] W. Kohn and N. Rostoker, Phys. Rev. **94**, 1111 (1954).

[29] F. S. Ham and B. Segall, Phys. Rev. **124**, 1786 (1961).

[30] K. Kambe, Z. Naturforsh. **22**a, 322 (1967).

[31] J. B. Pendry, *Low Energy Electron Diffraction: The Theory and Its Application to Determination of Surface Structure* (Academic Press, 1974).

[32] N. G. van Kampen, Phys. Rev. **89**, 1072 (1953).

[33] E. G. McRae, Surf. Sci. **11**, 479 (1968).

[34] E. G. McRae, Surf. Sci. **11**, 492 (1968).

[35] C. Tserkezis and N. Stefanou, Phys. Rev. B **81**, 115112 (2010).

[36] L. C. Botten, N. A. Nicorovici, R. C. McPhedran, C. M. de Sterke, and A. A. Asatryan, Phys. Rev. E **64**, 046603 (2001).

[37] Z.-Y. Li and K.-M. Ho, Phys. Rev. B **68**, 155101 (2003).

[38] C. Tserkezis, N. Stefanou, G. Gantzounis, and N. Papanikolaou, Phys. Rev. B **84**, 115455 (2011).

[39] K. M. Flood and D. L. Jaggard, J. Opt. Soc. Am. A. **13**, 1395 (1996).

[40] J. Chongjun, Q. Bai, Y. Miao, and Q. Ruhu, Opt. Commun, **142**, 179 (1997).

[41] I. E. Psarobas, N. Stefanou, and A. Modinos, J. Opt. Soc. Am. A. **16**, 343 (1999).

[42] S. Tretyakov, I. Nevedov, A. Sihvola, S. Maslovski, and C. Simovski, J. Electromagn. Waves Appl. **17**, 695 (2003).

[43] C. Monzon and D. W. Forester, Phys. Rev. Lett. **95**, 123904 (2005).

[44] J. B. Pendry, Science **306**, 1353 (2004).

[45] V. Yannopapas, J. Phys.: Condens. Matter **18**, 6883 (2006).

[46] J. K. Gansel, M. Thiel, M. S. Rill, M. Decker, K. Bade, V. Saile, G. von Freymann, S. Linden, and M. Wegener, Science **325**, 1513 (2009).

[47] S. Zhang, Y. S. Park, J. Li, X. C. Lu, W. Zhang, and X. Zhang, Phys. Rev. Lett. **102**, 023901 (2009).

[48] E. Plum, J. Zhou, J. Dong, V. A. Fedotov, T. Koschny, C. M. Soukoulis, and N. I. Zheludev, Phys. Rev. B **79**, 035407 (2009).

[49] X. Xiong, W. H. Sun, Y. J. Bao, M. Wang, R. W. Peng, C. Sun, X. Lu, J. Shao, Z. F. Li, and N. B. Ming, Phys. Rev. B **81**, 075119 (2010).

[50] C. Wu, H. Q. Li, Z. Wei, X. T. Yu, and C. T. Chan, Phys. Rev. Lett. **105**, 247401 (2010).

[51] C. He, M. H. Lu, R. C. Yin, T. Fan, and Y. F. Chen, J. Appl. Phys. **108**, 073103 (2010).

[52] F. Jonsson and C. Flytzanis, Phys. Rev. Lett. **97**, 193903 (2006).

[53] C. Tserkezis, G. Gantzounis, and N. Stefanou, J. Phys.: Condens. Matter **20**, 075232 (2008).

[54] E. Prodan, C. Radloff, N. J. Halas, and P. Nordlander, Science **302**, 419 (2003).

[55] T. V. Teperik, V. V. Popov, and F. J. Garcia de Abajo, Phys. Rev. B **69**, 155402 (2004).

[56] J. F. Cornwell, *Group Theory and Electronic Energy Bands in Solids* (North-Holland, Amsterdam, 1969).

[57] M. P. Silverman, J. Opt. Soc. Am. A. **3**, 830 (1986).

[58] S. Bassiri, C. H. Papas, and N. Engheta, J. Opt. Soc. Am. A. **5**, 1450 (1988).

[59] Y. Tajitsu, R. Hosoya, T. Maruyama, M. Aoki, Y. Shikinami, M. Date, and E. Fukada, J. Mater. Sci. Lett. **18**, 1785 (1999).

[60] H. X. Ge, Y. Hu, S. C. Yang, X. Q. Jiang, and C. Z. Yang, J. Appl. Polym. Sci. **75**, 874 (2000).

[61] S. F. Mason, *Molecular Optical Activity and the Chiral Discriminations* (Cambridge University Press, Cambridge, 1982).

[62] J. C. Bose, Proc. R. Soc. London **63**, 146 (1898).

[63] K. F. Lindman, Ann. Physik **368**, 621 (1920), *ibid.* **374**, 241 (1922).

[64] I. Tinoco Jr. and M. P. Freeman, J. Phys. Chem. **61**, 1196 (1957).

[65] D. L. Jaggard and N. Engheta, Electron. Lett. **25**, 173 (1989).

[66] N. Berova, K. Nakanishi, R. W. Woody, *Circular Dichroism: Principles and Applications*, 2nd Edition, Wiley-VCH, New York, **2000**.

[67] P. G. de Gennes, J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals*, 2nd Edition, Clarendon Press, Oxford, **1993**.

[68] V. I. Kopp, B. Fan, H. K. M. Vithana, A. Z. Genack, Opt. Lett., **23**, 1707 (1998).

[69] J. Hwang, M. H. Song, B. Park, S. Nishimura, T. Toyooka, J. W. Wu, Y. Takanishi, K. Ishikawa, H. Takezoe, Nat. Mater., **4**, 383 (2005).

[70] J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn, and R. D. Meade, *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light* (Princeton University Press, Princeton, 2008), 2nd ed.

[71] V. Karathanos, N. Stefanou, and A. Modinos, J. Mod. Opt. **42**, 619 (1995).

[72] I. Hodgkinson, Q. H. Wu, B. Knight, A. Lakhtakia, and K. Robbie, Appl. Opt. **39**, 642 (2000).

[73] A. Chutinan and S. Noda, Phys. Rev. B **57**, R2006 (1998).

[74] O. Toader and S. John, Science **292**, 1133 (2001).

[75] J. Lee and C. Chan, Opt. Express **13**, 8083 (2005).

[76] M. Thiel, M. Decker, M. Deubel, M. Wegener, S. Linden, and G. von Freymann, Adv. Mater. **19**, 207 (2007).

[77] P. C. P. Hrudey, B. Szeto, M. J. Brett, Appl. Phys. Lett. **88**, 251106 (2006).

[78] S. Furumi and Y. Sakka, Adv. Mater. **18**, 775 (2006).

[79] M. Mitov and N. Dessaud, Nat. Mater. **5**, 361 (2006).

[80] Y. Svirko, N. Zheludev, and M. Osipov, Appl. Phys. Lett. **78**, 498 (2001).

[81] A. Papakostas, A. Potts, D. M. Bagnall, S. L. Prosvirnin, H. J. Coles, and N. I. Zheludev, Phys. Rev. Lett. **90**, 107404 (2003).

[82] T. Vallius, K. Jefimovs, J. Turunen, P. Vahimaa, and Y, Svirko, Appl. Phys. Lett. **83**, 234 (2003).

[83] M. Kuwata-Gonokami, N. Saito, Y. Ino, M. Kauranen, K. Jefimovs, T. Vallius, J. Turunen, and Y. Svirko, Phys. Rev. Lett. **95**, 227401 (2005).

[84] A. V. Rogacheva, V. A. Fedotov, A. S. Schwanecke, and N. I. Zheludev, Phys. Rev. Lett. **97**, 177401 (2006).

[85] E. Plum, V. A. Fedotov, A. S. Schwanecke, N. I. Zheludev, and Y. Chen, Appl. Phys. Lett. **90**, 223113 (2007).

[86] B. Bai, Y. Svirko, J. Turunen, and T. Vallius, Phys. Rev. A **76**, 023811 (2007).

[87] D. H. Kwon, P. L. Werner, and D. H. Werner, Opt. Express **16**, 11802 (2008).

[88] C. Rockstuhl, C. Menzel, T. Paul, and F. Lederer, Phys. Rev. B **79**, 035321 (2009).

[89] A. Demetriadou and J. B. Pendry, J. Phys. Condens. Matter **21**, 376003 (2009).

[90] G. Shvets, Appl. Phys. Lett. **89**, 141127 (2006).

[91] M. Decker, M. W. Klein, M. Wegener, and S. Linden, Opt. Lett. **32**, 856 (2007).

[92] K. Konishi, T. Sugimoto, B. Bai, Y. Svirko, M. Kuwata-Gonokami, Opt. Express **15**, 9575 (2007).

[93] C. Helgert, E. Pshenay-Severin, M. Falkner, C. Menzel, C. Rockstuhl, E. -B. Kley, A. Tünnermann, F. Lederer, T. Pertsch, Nano Lett. **11**, 4400 (2011).

[94] Z. Fan, A. O. Govorov, Nano Lett. **10**, 2580 (2010).

[95] Z. Fan, A. O. Govorov, J. Phys. Chem. C **115**, 13254 (2011).

[96] B. Auguié, J. L. Alonso-Gómez, A. Guerrero-Martínez, L. M. Liz-Marzán, Phys. Chem. Lett. **2**, 846 (2011).

[97] A. Guerrero-Martínez, B. Auguié, J. L. Alonso-Gómez, Z. Džolić, S. Gómez-Graña, M. Žinić, M. M. Cid, L. M. Liz-Marzán, Angew. Chem., Int. Ed. **123**, 5613 (2011).

[98] A. Guerrero-Martínez, J. L. Alonso-Gómez, B. Auguié, M. M. Cid, L. M. Liz-Marzán, Nano Today, **6**, 381 (2011).

[99] W. Gao, H. M. Leung, Y. Li, H. Chen, W. Y. Tam, J. Opt. **13**, 115101 (2011).

[100] M. Hentschel, M. Schäferling, T. Weiss, N. Liu, H. Giessen, Nano Lett. **12**, 2542 (2012).

[101] R. Zhao, L. Zhang, J. Zhou, Th. Koschny, and C. M. Soukoulis, Phys. Rev. B **83**, 035105 (2011).

[102] D. B. Amabilino, *Ed. Chirality at the Nanoscale*, Wiley-VCH, New York, 2008.

[103] N. Berova, L. D. Bari, G. Pescitelli, Chem. Soc. Rev. **36**, 914 (2007).

[104] W. Chen, A. Bian, A. Agarwal, L. Liu, H. Shen, L. Wang, C. Xu, N. A. Kotov, Nano Lett. **9**, 2153 (2009).

[105] J. A. Fan, C. Wu, K. Bao, J. Bao, R. Bardhan, N. J. Halas, V. N. Manoharan, P. Nordlander, G. Shvets, F. Capasso, Science **328**, 1135 (2010).

[106] M. R. Jones, K. D. Osberg, R. J. Macfarlane, M. R. Langille, C. A. Mirkin, Chem. Rev. **111**, 3736 (2011).

[107] A. J. Mastroianni, S. A. Claridge, A. P. Alivisatos, J. Am. Chem. Soc. **131**, 8455 (2009).

[108] J. Sharma, R. Chhabra, A. Cheng, J. Brownell, Y. Liu, and H. Yan, Science **323**, 112 (2009).

[109] S. J. Tan, M. J. Campolongo, D. Luo, W. Cheng, Nat. Nanotechnol. **6**, 268 (2011).

[110] X. Shen, C. Song, J. Wang, D. Shi, Z. Wang, N. Liu, and B. Ding, J. Am. Chem. Soc. **134**, 146 (2012).

[111] A. Kuzyk, R. Schreiber, Z. Fan, G. Pardatscher, E. M. Roller, A. Högele, F. C. Simmel, A. O. Govorov, and T. Liedl, Nature **483**, 311 (2012).

[112] Y. Jin and S. He, Opt. Express **13**, 4974 (2005).

[113] Q. Cheng and T. J. Cui, Phys. Rev. B **73**, 113104 (2006).

[114] J. Zhou, J. Dong, B. Wang, Th. Koschny, M. Kafesaki, and C. M. Soukoulis, Phys. Rev. B **79**, 121104(R) (2009).

[115] M. C. K. Wiltshire, J. B. Pendry, and J. V. Hajnal, J. Phys. Condens. Matter **21**, 292201 (2009).

[116] B. Wang, J. Zhou, Th. Koschny, and C. M. Soukoulis, Appl. Phys. Lett. **94**, 151112 (2009).

[117] Z. Li, R. Zhao, Th. Koschny, M. Kafesaki, K. Boratay Alici, E. Colak, H. Caglayan, E. Ozbay, and C. M. Soukoulis, Appl. Phys. Lett. **97**, 081901 (2010).

[118] Z. Wu, J. Zhu, M. Jia, H. Lu, and B. Zeng, Microw. Opt. Tech. Lett. **53**, 163 (2011).

[119] T. G. Mackay and A. Lakhtakia, SPIE Reviews **1**, 018003 (2010).

[120] A. Andryieuski, C. Menzel, C. Rockstuhl, R. Malureanu, F. Lederer, and A. Lavrinenko, Phys. Rev. B **82**, 235107 (2010).

[121] J. Venermo, A. Sihvola, J. Electrost. **63**, 101 (2005).

[122] C. Tserkezis, N. Papanikolaou, E. Almpanis, N. Stefanou, Phys. Rev. B **80**, 125124 (2009).

[123] I. J. Hodgkinson, A. Lakhtakia, Q. H. Wu, L. De Silva, M. W. McCall, Opt. Commun. **239**, 353 (2004).

[124] M. Inoue, K. Arai, T. Fujii, and M. Abe, J. Appl. Phys. **85**, 5768 (1999).

[125] A. A. Fedyanin, O. A. Aktsipetrov, D. Kobayashi, K. Nishimura, H. Uchida, and M. Inoue, IEEE Trans. Magn. **40**, 2850 (2004).

[126] A. B. Khanikaev, A. B. Baryshev, P. B. Lim, H. Uchida, M. Inoue, A. G. Zhdanov, A. A. Fedyanin, A. I. Maydykovskiy, and O. A. Aktsipetrov, Phys. Rev. B **78**, 193102 (2008).

[127] V. I. Safarov, V. A. Kosobukin, C. Hermann, G. Lampel, J. Peretti, and C. Marliere, Phys. Rev. Lett. **73**, 3584 (1994).

[128] C. Hermann, V. A. Kosobukin, G. Lampel, J. Peretti, V. I. Safarov, and P. Bertrand, Phys. Rev. B **64**, 235422 (2001).

[129] J. B. González-Díaz, A. García-Martín, G. Armelles, J. M. García-Martín, C. Clavero, A. Cebollada, R. A. Lukaszew, J. R. Skuza, D. P. Kumah, and R. Clarke, Phys. Rev. B **76**, 153402 (2007).

[130] C. Clavero, K. Yang, J. R. Skuza, and R. A. Lukaszew, Opt. Express **18**, 7743 (2010).

[131] C. Clavero, K. Yang, J. R. Skuza, and R. A. Lukaszew, Opt. Lett. **35**, 1557 (2010).

[132] J. B. González-Díaz, A. García-Martín, J. M. García-Martín, A. Cebollada, G. Armelles, B. Sepúlveda, Y. Alaverdyan, and M. Käll, Small **4**, 202 (2008).

[133] G. X. Du, T. Mori, M. Suzuki, S. Saito, H. Fukuda, and M. Takahashi, Appl. Phys. Lett. **96**, 081915 (2010).

[134] J. C. Banthí, D. Meneses-Rodríguez, F. García, M. U. González, A. García-Martín, A. Cebollada, and G. Armelles, Advanced Materials **24**, OP36 (2012).

[135] P. K. Jain, Y. H. Xiao, R. Walsworth, A. E. Cohen, Nano Lett. **9**, 1644 (2009).

[136] L. Wang, K. Yang, C. Clavero, A. J. Nelson, K. J. Carroll, E. E. Carpenter, and R. A. Lukaszew, J. Appl. Phys. **107**, 09B303 (2010)

[137] L. Wang, C. Clavero, Z. Huba, K. J. Carrol, E. E. Carpenter, D. Gu, and R. A. Lukaszew, Nano Lett. **11**, 1237 (2011).

[138] G. Armelles, A. Cebollada, and A. García-Martín , J. M. Montero-Moreno, M. Waleczek, and K. Nielsch, Langmuir **28**, 9127 (2012).

[139] G. Armelles, J. B. González-Díaz, A. García-Martín, J. M. García-Martín, A. Cebollada, M. U. González, S. Acimovic, J. Cesario, R. Quidant, and G. Badenes, Opt. Express **16**, 16104 (2008).

[140] M. Caminale, L. Anghinolfi, E. Magnano, F. Bondino, M. Canepa, L. Mattera, and F. Bisio, ACS Applied Materials & Interfaces **5**, 1955 (2013).

[141] A. V. Baryshev, H. Uchida, and M. Inoue, J. Opt. Soc. Am. B **30**, 2371 (2013).

[142] B. A. van Tiggelen and G. L. J. A. Rikken, in *Optical Properties of Nanostructured Random Media*, edited by V. M. Shalaev (Springer-Verlag, Berlin, 2002), p.275.

[143] Z. Yu, Z. Wang, and S. Fan, Appl. Phys. Lett. **90**, 121133 (2007).

[144] Z. Yu, G. Veronis, Z. Wang, and S. Fan, Phys. Rev. Lett. **100**, 023902 (2008).

[145] A. B. Khanikaev and M. J. Steel, Opt. Express **17**, 5265 (2009).

[146] A. B. Khanikaev, A. V. Baryshev, M. Inoue, and Y. S. Kivshar, Appl. Phys. Lett. **95**, 011101 (2009).

[147] Y. Hadad and B. Z. Steinberg, Phys. Rev. Lett. **105**, 233904 (2010).

[148] A. B. Khanikaev, S. H. Mousavi, G. Shvets, and Y. S. Kivshar, Phys. Rev. Lett. **105**, 126804 (2010).

[149] S. M. Drezdzon and T. Yoshie, Opt. Express. **17**, 9276 (2009).

[150] K. Fang, Z. Yu, V. Liu, and S. Fan, Opt. Lett. **36**, 4254 (2009).

[151] T. Inui, Y. Tanabe, and Y. Onodera, *Group Theory and its Applications in Physics* (Springer, Berlin, 1990).

[152] M. P. Groenewege, Mol. Phys. **5**, 541 (1962).

[153] W. F. Brown Jr., S. Shtrieman, and D. Treves, J. Appl. Phys. **34**, 1233 (1963).

[154] D. L. Portigal and E. Burstein, J. Phys. Chem. Solids **32**, 603 (1971).

[155] N. B. Baranova, Yu. V. Bogdanov, and B. Ya. Zel'Dovich, Opt. Commun. **22**, 243 (1977).

[156] N. B. Baranova and B. Ya. Zel'Dovich, Mol. Phys. **38**, 1085 (1977).

[157] G. Wagnière and A. Meier, Chem. Phys. Lett. **93**, 78 (1982).

[158] L. D. Barron and J. Vrbancich, Mol. Phys. **51**, 715 (1984).

[159] G. L. J. A. Rikken and E. Raupach, Nature (London) **405**, 932 (2000).

[160] G. L. J. A. Rikken and E. Raupach, Nature (London) **390**, 493 (1997).

[161] G. L. J. A. Rikken and E. Raupach, Phys. Rev. E **58**, 5081 (1998).

[162] P. Kleindienst and G. H. Wagnière, Chem. Phys. Lett. **288**, 89 (1988).

[163] N. K. Kalugin, P. Kleindienst, and G. H. Wagnière, Chem. Phys. **248**, 105 (1999).

[164] M. Vallet, R. Ghosh, A. Le Floch, T. Ruchon, F. Bretenaker, and J. -Y. Thepot, Phys. Rev. Lett. **87**, 183003 (2001).

[165] C. Train, R. Gheorghe, V. Krstic, L. -M. Chamoreau, N. S. Ovanesyan, G. L. J. A. Rikken, M. Gruselle, and M. Verdaguer, Nature Materials **7**, 729 (2008).

[166] Y. Kitagawa, H. Segawa, and K. Ishii, Angew. Chem. Int. Ed. **50**, 9133 (2011).

[167] Y. Kitagawa, T. Miyatake, and K. Ishii, Chem. Commun. (in press) DOI: 10.1039/c2cc30996.

[168] D. Szaller, S. Bordács, and I. Kézsmárki, Phys. Rev. B **87**, 014421 (2013).

[169] N. Yahya, R. M. Al Habashi, K. Koziol, R. D. Borkowski, M. N. Akhtar, M. Kashif, and M. Hashim, J. Nanoscience Nanotech. **11**, 2652 (2011).

[170] D. T. T. Nguyet, N. P. Duong, T. Satoh, L. N. Anh, and T. D. Hien, J. Alloys Comp. **541**, 18 (2012).

[171] R. J. Ji, W. Yin, C. Fang and Y. Zeng, J. Mater. Chem. C **1**, 1763 (2013).

[172] L. Remer, E. Mohler, W. Grill, and B. Lüthi, Phys. Rev. B **30**, 3277 (1984).

[173] B. Sepúlveda, J. B. González-Díaz, A. García-Martín, L. M. Lechuga, and G. Armelles, Phys. Rev. Lett **104**, 147401 (2010).

[174] N. Félidj, J. Aubard, G. Lévi, J. R. Krenn, G. Schider, A. Leitner, and F. R. Aussenegg, Phys. Rev. B **66**, 245407 (2002).

[175] J. Aizpurua, P. Hanarp, D. S. Sutherland, M. Käll, G. W. Bryant, and F. J. García de Abajo, Phys. Rev. Lett. **90**, 057401 (2003).

[176] P. Hanarp, M. Käll, and D. S. Sutherland, J. Phys. Chem. B **107**, 5768 (2003).

[177] N. Papanikolaou, Phys. Rev. B **75**, 235426 (2007).

[178] G. Gantzounis, N. Stefanou, and N. Papanikolaou, Phys. Rev. B **77**, 035101 (2008).

[179] C. Y. Tsai, K. H. Chang, C. Y. Wu, and P. T. Lee, Opt. Express **21**, 14090 (2013).

[180] V. Yannopapas, Phys. Rev. B **83**, 113101 (2011).

[181] Y. Zhao, M. A. Belkin, and A. Alú, Nat. Commun. **3**, 870 (2012).

[182] A. Guerrero-Martínez, B. Auguié, J. L. Alonso-Gómez, Z. Džolić, S. Gómez-Graña, M. Žinić, M. M. Cid, and L. M. Liz-Marzán, Angew. Chem., Int. Ed. **123**, 5613 (2011).

[183] V. Dmitriev, Eur. Phys. J. Appl. Phys. **32**, 159 (2005).

[184] K. Sakoda, J. Opt. Soc. Am. B **29**, 2770 (2012).

[185] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders, New York, 1976).

[186] Th. Hahn (ed.), *International Tables for X-Ray Crystallography* Vol. A: Space Group Symmetry, $5^{\text{th.}}$ ed., (Wiley-VCH, New York, 2005).

[187] C. Herring, J. Franklin Inst. **233**, 525 (1942).